

Forschungszentrum Karlsruhe  
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte  
FZKA 6504

**Anwendung Neuronaler Netze bei  
nichtlinearen Problemen der Mechanik**

**Norbert Huber  
Institut für Materialforschung**

**Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)  
genehmigte  
Habilitationsschrift**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe  
2000**



# Anwendung Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik

Von der Fakultät für Maschinenbau  
der Universität Karlsruhe (TH)  
genehmigte

Habilitationsschrift

von

Dr.-Ing. Norbert Huber  
aus Baden-Baden

Referenten:

Prof. Dr.-Ing. P. Haupt  
Prof. Dr. rer. nat. D. Munz  
Prof. Dr.-Ing. Ch. Tsakmakis

Tag der Habilitation: 4. Juli 2000



## Vorwort

Diese Habilitationsschrift entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Materialforschung II des Forschungszentrums Karlsruhe. Die lange Tradition des Instituts mit dem konzentrierten Fachwissen auf den Gebieten der Werkstoffmechanik, der Strukturmechanik und der experimentellen Mechanik hat dabei einen soliden Rahmen für die hier behandelten Themen gebildet. Aufbauend auf diesem Fundament wurde die anspruchsvolle Fragestellung nach der Inversion nichtlinearer Probleme mit einer für die Mechanik neuartigen Methode, den Neuronalen Netzen, behandelt.

Natürlich war speziell das Thema der Materialparameteridentifikation bereits in der Vergangenheit vielfach Gegenstand wissenschaftlicher Arbeiten, weswegen die Eigenschaften der dort verwendeten Optimierungsverfahren denen der Neuronalen Netze gegenübergestellt wurden. Eine für mich faszinierende Erfahrung im Umgang mit den Neuronalen Netzen war dabei das Erleben der besonderen Fähigkeit, aus Beispielen zu lernen, dies als Wissen zu speichern und damit auf nicht Gesehenes zu schließen. Dabei hat sich aber auch gezeigt, daß es hilfreich ist, physikalisches Vorwissen in die Netze einzuarbeiten, damit diese auch bei komplexen Problemen den Genauigkeitsanforderungen genügen. Im Verlauf der Entwicklung eines Neuronalen Netzes entsteht dadurch eine rege Interaktion zwischen Schüler und Lehrer, wobei die Rollen nach einiger Zeit nicht mehr klar zuzuordnen sind.

Sich bei anspruchsvollen Problemen mit seinem physikalischen Wissen in die Entwicklung Neuronaler Netze einzubringen ist, im Gegensatz zu Optimierungsverfahren, unumgänglich. Umgekehrt wird aber die Möglichkeit geboten, selbst hinzuzulernen, kreativ zu arbeiten und ein Gefühl für die physikalischen Zusammenhänge zu entwickeln. Oft kann ein Problem analog auch mit Optimierungsverfahren behandelt werden, wenn der Lösungsweg bekannt ist. Den Lösungsweg aber alleine mit Optimierungsverfahren zu finden, möchte ich jedoch gerne anderen überlassen.

Für die fachliche und moralische Unterstützung während der letzten Jahre, ohne die diese Schrift nicht entstanden wäre, möchte ich mit hiermit bei all meinen Vorgesetzten, Kollegen und Freunden sowie bei meiner Familie herzlich bedanken.



# Kurzfassung

## Anwendung Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik

In der vorliegenden Monographie wird anhand von unterschiedlichen Beispielen gezeigt, wie Neuronale Netze zur Lösung nichtlinearer Probleme in der Mechanik angewendet werden können. Die möglichen Fragestellungen werden in direkte und inverse Probleme untergliedert. Im Vordergrund stehen die inversen Probleme, wobei die Identifikation von Materialparametern von besonderer Bedeutung ist.

Nach einer Darstellung der kontinuumsmechanischen Beziehungen werden die Grundlagen direkter und inverser Probleme erläutert. Zur Lösung derartiger Aufgaben werden Optimierungsverfahren und Neuronale Netze betrachtet. Deren Eigenschaften werden anhand von einfachen Beispielen erläutert. Die konkrete Anwendung Neuronaler Netze für nichtlineare mechanische Probleme wird in Form von fünf ausgewählten Beispielen dargestellt. Hierbei wird der Art und Weise, wie Vorwissen bei der Verarbeitung der Daten eingearbeitet werden kann, große Beachtung geschenkt.

In den behandelten Beispielen werden mechanische Eigenschaften von Polymeren und Metallen mit Zug-Druck- oder Kugeleindruck-Experimenten ermittelt. Das mechanische Verhalten der Polymere wird mit rheologischen Modellen beschrieben. Die Untersuchung der metallischen Werkstoffe basiert auf Materialmodellen der Plastizität bzw. der Viskoelastizität und statischer Erholung. Zunächst werden homogene Materialien betrachtet. In allen Fällen werden spezielle Lastgeschichten entwickelt, mit denen die in den Materialmodellen enthaltenen Parameter, soweit dies möglich ist, eindeutig ermittelt werden können.

Ein besonders interessantes Problem stellt die Identifikation der Materialparameter dünner Schichten dar. Die hohe Komplexität, bedingt durch die Nichtlinearität des Materialmodells, die Inhomogenität der Deformation sowie die Heterogenität mit ihrer zusätzlichen Längenskala, kann durch Aufspaltung in Teilprobleme aufgelöst werden. Als Zwischenschritt wird ein fiktives homogenes Schichtmaterial eingeführt, das die mechanischen Eigenschaften der Schicht besitzt, aber in Makroabmessungen vorliegt. Auf diese Weise ist es möglich, zuerst die Heterogenität zu eliminieren, um anschließend Verfahren anwenden zu können, die für homogene Werkstoffe entwickelt wurden.

# **Abstract**

## **Application of Neural Networks on Nonlinear Problems of Mechanics**

In the present monograph the application of neural networks for solving nonlinear problems of mechanics is demonstrated. It is distinguished between direct and inverse problems, where the inverse problems and especially the identification of material parameters is emphasized.

After a short description of the basic continuum mechanical relations, the foundations of direct and inverse problems are explained. For the treatment of such problems, optimization methods and neural networks are considered and their respective properties are exemplified. The detailed application of neural networks on nonlinear mechanical problems is presented by consideration of five selected examples. At this, attention is paid to the incorporation of previous knowledge into the data.

In the examples considered, mechanical properties of polymers and metals are determined by tension-compression experiments or spherical indentation experiments. The mechanical behavior of polymers is described by viscoelasticity using spring-dashpot linear solids. The investigation of metallic materials is based on constitutive models of plasticity or viscoplasticity with recovery, respectively. First, homogeneous materials are considered. In all cases, a loading history is developed in such a way, that the material parameters can be determined uniquely as far as possible.

In particular, the very interesting problem of identification of material parameters of thin films is addressed. The strong complexity as a consequence of the nonlinearity of the constitutive model, the inhomogeneous deformation as well as the heterogeneity with its additional length scale is reduced by splitting the problem. First, the effect of heterogeneity is eliminated by introduction of a fictitious bulk material having the same mechanical properties as the thin film. Thereafter, it is possible to apply methods for the investigation of homogeneous materials, which have been developed previously.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Zielsetzung . . . . .	1
1.2	Überblick . . . . .	4
1.2.1	Prädiktion . . . . .	4
1.2.2	Inverse Probleme . . . . .	5
1.3	Inhalt der vorliegenden Arbeit . . . . .	6
1.4	Allgemeine Angaben – Beziehungen . . . . .	8
1.4.1	Rechenregeln mit Tensoren . . . . .	8
1.4.2	Kinematik . . . . .	9
1.4.3	Duale Dehnungs- und Spannungsvariablen . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Einführung in Optimierungsverfahren und Neuronale Netze</b>	<b>15</b>
2.1	Direktes und inverses mechanisches Problem . . . . .	15
2.1.1	Direktes Problem . . . . .	16
2.1.2	Inverses Problem . . . . .	16
2.1.3	Verifikation und Validierung . . . . .	19
2.2	Optimierungsverfahren . . . . .	20
2.2.1	Deterministische Optimierungsverfahren . . . . .	22
2.2.2	Stochastische Optimierungsverfahren . . . . .	29
2.2.3	Vergleich der Optimierungsverfahren . . . . .	32
2.3	Neuronale Netze . . . . .	34
2.3.1	Mathematische Formulierung . . . . .	34
2.3.2	Trainingsalgorithmen . . . . .	36
2.3.3	Aufbereitung der Daten . . . . .	42
2.3.4	Trainings- und Verifikationsmuster . . . . .	45
2.3.5	Einbringen von Vorwissen . . . . .	49
2.3.6	Hinweise zur Darstellung . . . . .	52
2.3.7	Anwendung Neuronaler Netze am Beispiel des Hyperboloids . . . . .	53
2.4	Gegenüberstellung Neuronaler Netze und Optimierungsverfahren . . . . .	58
2.4.1	Zahl der Simulationen . . . . .	58
2.4.2	Simulationsaufwand in Abhängigkeit der Dimension . . . . .	59
2.4.3	Vergleich für Daten mit Rauschen . . . . .	62

<b>3</b>	<b>Identifikation von Materialparametern der Viskoelastizität für mikrostrukturiertes Polyimid</b>	<b>64</b>
3.1	Methoden der mechanischen Mikroprüftechnik . . . . .	64
3.2	Funktionsweise des Mikrodrucksensors . . . . .	66
3.3	Das verwendete Materialmodell . . . . .	67
3.3.1	Das Drei-Parameter-Modell . . . . .	67
3.3.2	Verallgemeinerung des Drei-Parameter-Modells . . . . .	69
3.3.3	Dreidimensionale Formulierung . . . . .	71
3.4	Identifikation der Materialparameter . . . . .	73
3.4.1	Experimentelle Ermittlung der Systemantwort . . . . .	73
3.4.2	Finite Elemente Simulationen . . . . .	74
3.4.3	Anwendung Neuronaler Netze . . . . .	76
3.5	Abschließende Bemerkungen . . . . .	81
<b>4</b>	<b>Identifikation der Materialparameter der Viskoplastizität mit statischer Erholung anhand einachsiger homogener Deformationen</b>	<b>83</b>
4.1	Zusammenhänge zwischen wahren und experimentell meßbaren Größen . . . . .	85
4.2	Das verwendete Materialmodell . . . . .	86
4.3	Sonderfälle und Näherungslösungen . . . . .	91
4.3.1	Effekte der Viskosität . . . . .	92
4.3.2	Effekte der Plastizität . . . . .	94
4.3.3	Statische Erholung . . . . .	96
4.4	Erläuterungen zur Prozeßführung . . . . .	98
4.4.1	Wahl des Simulationsbereichs . . . . .	103
4.5	Generierung der Neuronalen Netze . . . . .	105
4.5.1	Abtastung der Spannung . . . . .	106
4.5.2	Elastizitätsmodul . . . . .	107
4.5.3	Parameter der Viskosität . . . . .	110
4.5.4	Innere Variablen . . . . .	112
4.5.5	Plastizitätsparameter . . . . .	118
4.5.6	Parameter der statischen Erholung . . . . .	121
4.6	Verifikation der Identifikationskette . . . . .	125
4.7	Experimente . . . . .	130
4.7.1	Experimentelle Realisierung . . . . .	131
4.7.2	Aufbereitung der Meßdaten . . . . .	131
4.7.3	Auswertung der Experimente . . . . .	133

4.7.4	Temperaturinterpolation . . . . .	135
4.7.5	Validierung der Temperaturinterpolation . . . . .	138
4.8	Zusammenfassende Bemerkungen . . . . .	140
<b>5</b>	<b>Identifikation der Materialparameter der Plastizität aus Kugelein-</b>	
	<b>drücken in homogene Materialien</b>	<b>142</b>
5.1	Das verwendete Materialmodell . . . . .	144
5.2	Plastizität mit nichtlinearer kinematischer Verfestigung . . . . .	146
5.2.1	Finite Elemente Simulationen . . . . .	149
5.2.2	Identifikation auf der Basis der Hysteresenöffnung . . . . .	152
5.2.3	Identifikation auf der Basis der Hysteresenöffnung und Hystere-	
	senweite . . . . .	156
5.3	Plastizität mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung . .	158
5.3.1	Effekte bezüglich der Belastungskurve . . . . .	159
5.3.2	Effekte bezüglich der Hysterese . . . . .	162
5.3.3	Generierung der Muster . . . . .	163
5.3.4	Gesamtverfestigungsverhalten . . . . .	165
5.3.5	Identifikation des reduzierten Moduls $E_r$ sowie der Spannungen	
	$k_0$ , $\Delta\Sigma$ und $(3c)/(2b)$ . . . . .	170
5.3.6	Plastische Moduli $3c/2$ und $\sigma'$ . . . . .	173
5.3.7	Verifikation der Identifikationskette . . . . .	177
5.3.8	Validierung für viskoplastisches Materialverhalten . . . . .	178
<b>6</b>	<b>Ermittlung der Querkontraktionszahl aus Kugelein-</b>	
	<b>drücken in homo-</b>	
	<b>gene Materialien</b>	<b>181</b>
6.1	Einleitung . . . . .	181
6.2	Theoretische Überlegungen . . . . .	182
6.3	Finite Elemente Simulationen . . . . .	188
6.4	Identifikation von $\nu$ für gegebenes $\Pi_1^*$ . . . . .	192
6.4.1	Eine Entlastung (Set 1) . . . . .	192
6.4.2	Zwei Entlastungen (Set 2) . . . . .	194
6.5	Identifikation von $h_y^*$ und $\nu$ . . . . .	196
6.5.1	Bestimmung des elastischen Anstiegs $m$ . . . . .	197
6.5.2	Neuronale Netze für die Belastungsdaten und die Entlastungsstei-	
	gungen . . . . .	197
6.5.3	Neuronale Netze für die Identifikation . . . . .	199

6.5.4	Ergebnisse . . . . .	202
6.5.5	Validierung . . . . .	203
6.6	Abschließende Bemerkungen . . . . .	206
<b>7</b>	<b>Identifikation der Materialparameter der Plastizität einer dünnen Schicht auf einem Substrat</b>	<b>208</b>
7.1	Diskussion bestehender Methoden . . . . .	209
7.1.1	Ermittlung des reduzierten Moduls . . . . .	209
7.1.2	Ermittlung der Härte . . . . .	211
7.2	Konzept zur Lösung des inversen Problems . . . . .	212
7.2.1	Zusammenfassung . . . . .	212
7.2.2	Die fiktive Eindringtiefe-Last-Trajektorie der Schicht . . . . .	214
7.3	Finite Elemente Simulationen . . . . .	215
7.4	Generierung des inversen Operators IP2 . . . . .	217
7.4.1	Fiktive Belastungskurve . . . . .	218
7.4.2	Fiktive Hysterese . . . . .	222
7.4.3	Validierung der Identifikationskette . . . . .	227
7.5	Abschließende Bemerkungen . . . . .	230
<b>8</b>	<b>Zusammenfassende und abschließende Bemerkungen</b>	<b>232</b>

# Nomenklatur

## Materialparameter

$b, c$	Materialparameter der nichtlinearen kinematischen Verfestigung
$E$	Elastizitätsmodul der Probe
$E_i$	Elastizitätsmodul des Prüfkörpers (Indenter)
$E_r$	reduzierter Modul der Probe
$E_r^*$	effektiver Modul (Prüfkörper und Probe)
$E_*$	Elastizitätsmodul der Feder im Kelvin-Element
$E^{(G)}$	Gleichgewichtsmodul
$E_0$	spontaner Elastizitätsmodul
$E_T$	Tangentenmodul
$K$	Kompressionsmodul
$K_0$	spontaner Kompressionsmodul
$k_i, \tau_i^k$	Materialparameter des verallgemeinerten Drei-Parameter-Modells (Deviatorischer Anteil)
$k_0$	Fließspannung
$p, \mathbf{w}$	Materialparameter der statischen Erholung (kinemat. Verf.)
$r$	Dämpferkonstante im Kelvin-Element
$\beta, \gamma$	Materialparameter der nichtlinearen isotropen Verfestigung
$\eta, m$	Materialparameter der Viskosität
$\mu, \lambda$	Lamé'sche Konstanten
$\mu_0$	spontaner Schubmodul
$\mu_i, \tau_i^\mu$	Materialparameter des verallgemeinerten Drei-Parameter-Modells (Spur-Anteil)
$\nu$	Querkontraktionszahl
$\nu_0$	spontane Querkontraktionszahl

$\nu_i$	Querkontraktionszahl des Prüfkörpers (Indenter)
$\pi, \omega$	Materialparameter der statischen Erholung (isotr. Verf.)

## Skalare Variablen

$A$	Kontaktfläche
$A_e$	effektive Kontaktfläche
$A_e^*$	dimensionslose effektive Kontaktfläche
$a$	Kontaktradius
$\tilde{a}$	geschätzter Kontaktradius (ohne Aufwölben o. Einsinken)
$b$	Breite
$b^*$	Achsenabschnitt der Entlastungskurve nach plastischer Belastung
$d_l$	Gewünschter Wert am Ausgabeneuron $l$ (desired)
$E$	Wert der Zielfunktion
$E_\sigma$	Fehlermaß für die Spannungs-Dehnungs-Kennlinie
$e$	technische Dehnung
$e_a$	Dehnungsamplitude
$e_l$	Fehler am Ausgabeneuron $l$
$e_m$	Mitteldehnung
$e_o$	oberer Dehnungswert bei Zyklisierung
$e_u$	unterer Dehnungswert bei Zyklisierung
$err_l$	Betrag des relativen Fehlers am Ausgabeneuron $l$
$\dot{e}_s$	technische Dehnrates der schnellen Belastung
$\dot{e}_l$	technische Dehnrates der langsamen Belastung
$F$	Überspannung
$F_0$	Überspannung zu Beginn der Relaxation
$F_s$	Überspannung durch schnelle Belastung
$F_l$	Überspannung durch langsame Belastung
$\hat{F}$	Fließfunktion
$H$	Härte
$h$	Eindrucktiefe
$h^*$	dimensionslose Eindrucktiefe
$h_r$	bleibende Eindrucktiefe nach Entlastung

$h_t$	maximale Eindringtiefe nach Belastung
$h_t^*$	maximale dimensionslose Eindringtiefe nach Belastung
$h_y$	Fließtiefe
$h_y^*$	Fließtiefe für $\nu = 0.3$
$\tilde{h}_y^*$	angenommene Fließtiefe für $\nu = 0.3$
$\Delta h$	Weite der Hysterese
$\Delta h^*$	dimensionslose Breite der Hysterese
$\Delta \bar{h}$	Weite für homogenes Substrat
$\Delta \hat{h}$	Weite für Schicht-Substrat-Verbund
$\Delta \hat{h}$	Weite für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$k$	isotrope Verfestigungsvariable
$L$	Kantenlänge des Finite Elemente Netzes
$l$	Länge
$MSE$	bezogene Summe aller Fehlerbeträge
$m$	Steigung der Belastungskurve für elastische Belastung
$m^*$	Steigung der Entlastungskurve nach plastischer Belastung
$P$	Last
$P^*$	dimensionslose Last
$\bar{P}$	Last für homogenes Substrat
$\hat{P}$	Last für Schicht-Substrat-Verbund
$\hat{P}$	Last für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$P_l$	Last der Belastungskurve
$P_m$	mittlerer Druck in der Kontaktfläche
$P_{mt}$	mittlerer Druck in der Kontaktfläche bei maximaler Last
$\tilde{P}_{mt}$	geschätzter Wert von $P_{mt}$ (ohne Aufwölben o. Einsinken)
$P_r$	Last der Wiederbelastungskurve
$P_t$	maximale Last
$P_t^{(e)}$	maximale Last für fiktive elastische Belastung
$P_u$	Last der Entlastungskurve
$P_y$	Fließlast
$P_y^*$	Fließlast für $\nu = 0.3$
$\Delta P$	Öffnung der Hysterese
$\Delta P^*$	dimensionslose Öffnung der Hysterese
$\Delta \bar{P}$	Öffnung für homogenes Substrat
$\Delta \hat{P}$	Öffnung für Schicht-Substrat-Verbund

$\Delta\hat{P}$	Öffnung für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$p$	Druck
$\Delta p$	Differenzdruck
$p_{ref}$	Referenzdruck
$q$	Materialparameter (allgemein)
$R$	Kugelradius des Prüfkörpers
$R^*$	relativer Radius zwischen Kugel und deformierter Oberfläche
$R_0$	Referenzkonfiguration
$R_s$	Radius der plastisch deformierten, entlasteten Oberfläche
$R_t$	Momentankonfiguration
$\hat{R}_t$	Zwischenkonfiguration
$R'$	relativer Radius zwischen Prüfkörper und Oberfläche
$R_m$	Zugfestigkeit
$R_\sigma$	Vorzeichen der Belastungsrichtung
$r$	Radius, radiale Koordinate
$r$	skalarwertige Variable vom Dehnungstyp, konjugiert zu $k$
$S$	Entlastungssteifigkeit
$\bar{S}$	Entlastungssteifigkeit für homogenes Substrat
$\hat{S}$	Entlastungssteifigkeit für Schicht-Substrat-Verbund
$\hat{S}$	Entlastungssteifigkeit für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$SSE$	Summe aller Fehlerbeträge
$\mathcal{S}$	Systemantwort
$s$	plastische Bogenlänge
$T$	Temperatur
$t$	Zeit bzw. Schichtdicke
$t_0$	Zeit zu Beginn der Relaxations- bzw. Kriechphase
$\Delta t_r$	Relaxationsdauer
$v_j$	Aktivierung des Neurons $j$
$W$	Spannungsleistung
$w$	Aufwölbung des Kontaktrandes
$w_{kj}$	synaptisches Gewicht von Neuron $j$ zu Neuron $k$
$x_i$	Eingabewert des Eingabeneurons $i$
$y_l$	Ausgabewert des Neurons $l$
$\alpha$	Lernrate des Gradientenverfahrens



$\alpha_{kj}$	Lernrate für das synaptische Gewicht $w_{kj}$
$\beta$	Dämpfungsparameter
$\Delta, \Delta_e, \Delta_p$	Verzerrungsmaß (Familie 1), elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\delta$	Verzerrungsmaß (Familie 2)
$\delta^*$	dimensionslose Eindrucktiefe bzgl. der Hysterese
$\delta_l$	lokaler Gradient am Neuron $l$
$\delta_y$	Annäherung, bei der plastisches Fließen einsetzt
$\delta_y^*$	Annäherung, bei der plastisches Fließen einsetzt ( $\nu = 0.3$ )
$\varepsilon, \varepsilon_e, \varepsilon_p$	wahre Dehnung (logarithmische $\sim$ ), elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\varepsilon_0$	Dehnung zu Beginn der Relaxations- bzw. Kriechphase
$\dot{\varepsilon}$	Dehnrates
$\dot{\varepsilon}_s$	Dehnrates der schnellen Belastung
$\dot{\varepsilon}_l$	Dehnrates der langsamen Belastung
$\dot{\varepsilon}_r$	repräsentative Dehnung
$\Theta_k$	Schwellwert des Neurons $k$
$\kappa := k - k_0$	isotroper Verfestigungsbetrag
$\kappa_0$	Wert von $\kappa$ zu Beginn der Relaxation
$\Delta\kappa^*$	bezogene statische Erholung der isotropen Verfestigung
$\tilde{\nu}$	Ermittelter Wert der Querkontraktionszahl für $\tilde{h}_y^*$
$\xi$	kinematische Verfestigung bei eindimensionaler Belastung
$\bar{\xi}$	kinematische Verfestigung für homogenes Substrat
$\hat{\xi}$	kinematische Verfestigung für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$\xi'$	initialer Tangentenmodul der kinematischen Verfestigung
$\xi_0$	Wert von $\xi$ zu Beginn der Relaxation
$\Delta\xi^*$	bezogene statische Erholung der kinematischen Verfestigung
$\Pi_1$	auf Fließtiefe bezogene Eindrucktiefe
$\Pi_1^*$	auf Fließtiefe bezogene Eindrucktiefe für $\nu = 0.3$
$\Pi_2$	Verhältnis der Entlastungssteigungen
$\Pi_3$	Kenngröße zur Beschreibung der plastischen Deformation
$\rho_0$	Dichte in $R_0$
$\Delta\Sigma$	maximale Verfestigung
$\Delta\Sigma_k^*$	Anteil der isotropen Verfestigung an der maximalen Verfestigung
$\Delta\Sigma_\xi^*$	Anteil der kinematischen Verfestigung an der maximalen Verfestigung
$\sigma$	wahre Spannung
$\bar{\sigma}$	Spannung für homogenes Substrat

x

$\hat{\sigma}$	Spannung für fiktives Bulk-Schichtmaterial
$\sigma_0$	Spannung zu Beginn der Relaxations- bzw. Kriechphase
$\sigma_r$	repräsentative Spannung
$\sigma_t$	technische Spannung
$\sigma'$	initialer Tangentenmodul
$\sigma'_k$	Anteil der isotropen Verfestigung am initialen Tangentenmodul
$\sigma'_\xi$	Anteil der kinematischen Verfestigung am initialen Tangentenmodul
$\sigma^{(G)}$	Gleichgewichtsspannung
$\sigma^{(s)}$	statische Spannung
$\phi$	Relaxationsfunktion
$\varphi$	Aktivierungsfunktion
$\Psi$	frei Energiefunktion

## Vektoren

<b>d</b>	konjugierte Richtung
<b>g</b>	Gradient der Zielfunktion $E$
<b>N</b>	Normale an materielle Fläche in $R_0$
<b>n</b>	Normale an materielle Fläche in $R_t$
<b>P</b>	Lastgeschichte
<b>q</b>	Materialparametervektor
$\bar{\mathbf{q}}$	Materialparametervektor des homogenen Substrats
$\hat{\mathbf{q}}$	Materialparametervektor des Schicht-Substrat-Verbundes (Mischung)
$\hat{\mathbf{q}}$	Materialparametervektor des fiktiven Bulk-Schichtmaterials
<b>S</b>	Systemantwortvektor
$\tilde{\mathbf{S}}$	gemessener Systemantwortvektor
<b>u</b>	Verschiebungsvektor
<b>v</b>	Geschwindigkeitsvektor
<b>X</b>	Ortsvektor in $R_0$
$d\mathbf{X}$	Tangentenvektor an materielle Linie in $R_0$
<b>x</b>	Ortsvektor in $R_t$
$d\mathbf{x}$	Tangentenvektor an materielle Linie in $R_t$

## Tensoren

$\mathbf{1}$	Einheitstensor zweiter Stufe
$\mathbf{A}, \mathbf{A}_e, \mathbf{A}_p$	Almansi Verzerrungstensor, elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\mathbf{D}, \mathbf{D}_e, \mathbf{D}_p$	Dehnungsgeschwindigkeitstensor, elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\mathbf{E}$	Green'scher Verzerrungstensor
$\mathbf{F}, \mathbf{F}_e, \mathbf{F}_p$	Deformationsgradient, elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\mathbf{G}$	Hesse-Matrix der Zielfunktion $E$
$\mathbf{L}$	Geschwindigkeitsgradient
$\mathbf{L}_p$	plastischer Anteil von $\mathbf{L}$
$\mathbf{N}$	Normale auf die Fließfläche
$\hat{\mathbf{P}}$	Mandel'scher Spannungstensor in $\hat{R}_t$
$\mathbf{Q}$	orthogonaler Tensor
$\mathbf{S}$	gewichteter Cauchy'scher Spannungstensor
$\mathbf{T}$	Cauchy'scher Spannungstensor
$\tilde{\mathbf{T}}$	zweiter Piola-Kirchhoff Spannungstensor in $R_0$
$\hat{\mathbf{T}}$	zweiter Piola-Kirchhoff Spannungstensor in $\hat{R}_t$
$\mathbf{W}$	Wirbeltensor
$\mathbf{Y}$	Tensor vom Dehnungstyp konjugiert zu $\mathbf{Z}$
$\mathbf{Z}$	interner Spannungstensor, zugeordnet zum Tensor der kinematischen Verfestigung $\xi$
$\mathcal{C}$	Elastizitätstensor vierter Stufe
$\mathcal{E}$	Einheitstensor vierter Stufe
$\varepsilon$	Piola Verzerrungstensor
$\hat{\Gamma}, \hat{\Gamma}_e, \hat{\Gamma}_p$	Verzerrungstensor in $\hat{R}_t$ (Familie 1), elastischer Anteil, plastischer Anteil
$\xi$	Tensor der kinematischen Verfestigung

## Operatoren

grad	Gradient
det $\mathbf{A}$	Determinante von $\mathbf{A}$
Sp $\mathbf{A}$	Spur von $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^D$	deviatorischer Anteil von $\mathbf{A}$ ( $\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - 1/3 (\text{Sp}\mathbf{A}) \mathbf{1}$ )

$\ \mathbf{A}\ $	euklidische Norm von $\mathbf{A}$ ( $\ \mathbf{A}\  = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ )
$\ \mathbf{A}\ _D$	deviatorische Norm von $\mathbf{A}$ ( $\ \mathbf{A}\ _D = \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ )
$\langle \cdot \rangle$	Föppl-Symbol (Mc Auley Klammer)
$(\cdot)^{-1}$	Inverse von $(\cdot)$
$(\cdot)^T$	Transponierte von $(\cdot)$
$(\cdot)^\cdot$	materielle Zeitableitung von $(\cdot)$
$\overset{\Delta}{\mathbf{A}}$	untere Oldroyd Ableitung von $\mathbf{A}$ ( $\overset{\Delta}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L}$ )
$\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$	obere Oldroyd Ableitung von $\mathbf{A}$ ( $\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{A}} - \mathbf{L} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{L}^T$ )
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	dyadisches Produkt von $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$ ( $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = a_i b_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ )
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	dyadisches Produkt von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ( $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A_{ij} B_{mn} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n$ )
$\mathbf{A} \mathbf{B}$	Tensorprodukt von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ( $\mathbf{A} \mathbf{B} = A_{ij} B_{jm} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_m$ )
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	Skalarprodukt von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ( $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \text{Sp}(\mathbf{A} \mathbf{B}^T)$ )
$\mathcal{D}[\mathbf{A}]$	Anwendung von $\mathcal{D}$ auf $\mathbf{A}$ ( $\mathcal{D}[\mathbf{A}] = D_{ijkl} A_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ )
$\mathbf{X}[\cdot, \cdot]$	Kreuzungsoperator
$\mathbf{M}_+[\cdot]$	Mutationsoperator (Addition einer Zufallszahl)
$\mathbf{M}_r[\cdot]$	Mutationsoperator (Ersetzen mit einer Zufallszahl)
$\mathcal{N}[\cdot]$	Abbildungsvorschrift des Neuronalen Netzes

# 1 Einleitung

## 1.1 Zielsetzung

In den Naturwissenschaften wird angestrebt, Zusammenhänge als Gleichungen in geschlossener Form anzugeben. Auf diese Weise kann eine Auswertung schnell und unabhängig von festinstallierten Einrichtungen, wie z.B. Computer mit hohen Rechenleistungen oder experimentellen Einrichtungen, durchgeführt werden. Bei immer komplexer werdenden Problemen nehmen jedoch auch aufgrund der verfügbaren Rechenkapazitäten numerische Lösungen einen stetig wachsenden Stellenwert ein, womit die allgemeine Verfügbarkeit schwindet.

Für die geschlossene Darstellung experimentell oder numerisch gewonnener Zusammenhänge bewährt sich seit Jahrhunderten das Auftragen in Diagrammen. Diagramme können große Datenmengen in einfachen Kurvenverläufen vereinigen. Zusammenhänge zwischen zwei oder mehr Größen lassen sich so mit einem Blick ablesen.

Auf diese Weise werden nach wie vor neue wissenschaftliche Erkenntnisse, die nur punktweise ermittelt werden können, sei es experimentell oder mit dem Supercomputer, mit einem durch diese Punkte gelegten Kurvenzug zusammengefaßt. Dabei ist die verwendete Funktion zur Beschreibung des Zusammenhangs in vielen Fällen empirisch gewählt. Die Ergebnisse werden mit Hilfe der Erfahrung des Menschen in einen geschlossenen Zusammenhang überführt. Dabei hängt die resultierende Darstellung aber von dem Umfang der Funktionen ab, die diesem Menschen bekannt sind, seinem Abstraktionsvermögen, seiner räumlichen Vorstellungskraft, der Kenntnis über Optimierungsverfahren zur Anpassung der Verläufe usw. Das heißt, die Erfahrung im Umgang mit solchen Problemen bestimmt die Qualität und die Aussagekraft des so ermittelten geschlossenen Zusammenhangs.

Bei komplexen Abhängigkeiten mit vielen Eingangsgrößen übersteigt die Dimensionalität jedoch schnell das menschliche Vorstellungsvermögen. Hier kommen vielfach Computermodelle zum Einsatz, die Zusammenhänge beliebiger Dimension mühelos verarbeiten können. Sind jedoch die Zusammenhänge nicht bekannt, wird eine abstrakte Methode benötigt, mit der punktweise gegebene Zusammenhänge systematisch in eine geschlossene explizite Funktion überführt werden können. Neuronale Netze bieten diese Möglichkeiten, da sie ähnlich dem Gehirn die Fähigkeit besitzen, anhand einer beschränkten Anzahl von Beispielen Zusammenhänge zu erlernen. Auf diese Weise wird die Erfahrung

aus den betrachteten Beispielen in eine explizite Funktion überführt. Somit kann jeder beliebige Wert im Inneren des erlernten Bereiches wieder gegeben werden. Dabei ist es für das Neuronale Netz ohne Bedeutung, ob diese Funktion die Lösung eines direkten oder eines inversen Problems darstellt.

Die Unterscheidung in direkte und inverse Probleme ist beim Einsatz konventioneller Verfahren jedoch von großer Bedeutung. Nehmen wir an, das direkte Problem kann mit einem numerischen Algorithmus gelöst werden, wobei der Aufwand hierfür einer Einheit  $\Delta t$  entspricht. Soll das zugehörige inverse Problem gelöst werden, kommen üblicherweise Optimierungsverfahren zum Einsatz. Dabei wird das direkte Problem gelöst, mit dem gewünschten Ergebnis verglichen und die Eingangsparameter des direkten Problems geeignet verändert, so daß die Abweichungen kleiner werden. Dieser Schritt wird  $N$ -mal durchgeführt, bis die Übereinstimmung des Ergebnisses mit dem gewünschten Ergebnis akzeptabel ist. Der Aufwand hierbei ergibt sich aus dem Produkt  $N \cdot \Delta t$ . Ist das inverse Problem  $M$ -mal zu lösen, z.B. bei der Identifikation der Materialparameter unterschiedlicher Experimente, ergibt sich der gesamte Aufwand zu  $M \cdot N \cdot \Delta t$ . Der Verbrauch an Rechenleistung erreicht somit schnell die Größenordnung von Tagen oder Wochen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Anwendung Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik, insbesondere bei der Lösung inverser Probleme, behandelt. Natürlich wird für die Erstellung der Neuronalen Netze auch Rechenzeit verbraucht. Diese ist in erster Näherung mit einer Identifikation durch Optimierungsverfahren  $N \cdot \Delta t$  anzusetzen. Der besondere Reiz in der Verwendung von Neuronalen Netzen liegt aber in der Generierung einer expliziten Funktion, die beliebig oft in Bruchteilen von Sekunden ausgewertet werden kann. Die auf eine Identifikation gemittelte Rechenleistung beträgt somit  $N \cdot \Delta t / M$ , statt  $N \cdot \Delta t = konst$  bei Verwendung konventioneller Verfahren.

Eine besondere Schwierigkeit bei der Problemlösung stellt die Bedingung dar, daß der Zusammenhang, den das Neuronale Netz wiedergeben soll, eine Funktion sein muß. Im Fall direkter Probleme und der Beschränkung auf deterministische Systeme ist dies von vornherein gewährleistet, wenn die Lösungen mit numerischen oder experimentellen Methoden erzeugt werden. Es müssen lediglich alle Eingangsgrößen zur Ermittlung der Beispiele bekannt sein. Die eindeutige Lösbarkeit des direkten Problems gewährleistet nicht, daß das zugeordnete inverse Problem ebenfalls eindeutig ist. Da die direkten Probleme bezüglich der Herstellung der Eindeutigkeit kein besonderes Vorgehen erfordern, soll deren Behandlung auf die Verweise entsprechender Literatur beschränkt werden. Die in dieser Arbeit behandelten Methoden, die zur Erhöhung der Leistungsfähigkeit der Neuronalen Netze bei der Lösung inverser Probleme dienen, können ohne Einschränkung

auch für direkte Probleme angewendet werden.

Da der Mensch durch Neuronale Netze auf der Stufe der Verarbeitung von Beispielen und der Generierung des Zusammenhangs entlastet wird, kann dieser sich den nächsthöheren Stufen widmen. Dies sind die Herstellung der Eindeutigkeit und der Vollständigkeit, die Verbesserung der Generalisierung durch Einbringen von Vorwissen und die Erhöhung der Genauigkeit.

An einem einfachen Beispiel sollen diese übergeordneten Aufgaben verdeutlicht werden: Ein Lehrer versucht einer Schulklasse eine Rechenoperation anhand von Beispielen zu vermitteln. Stellt der Lehrer den Zusammenhang nicht eindeutig oder unvollständig dar, d.h. seine Aussagen sind widersprüchlich oder es fehlen notwendige Angaben, wird keiner der Schüler die Operation begreifen. Sind diese Schwierigkeiten durch Rückfragen der Schüler ausgeräumt, können diese zumindest für die gezeigten Beispiele begreifen, wie die Rechenoperation auszuführen ist. Dennoch kann es vorkommen, daß für andere Beispiele Fehler gemacht werden. Auch hier kann der Lehrer Einfluß nehmen, indem er den Schülern ein tiefgreifendes Verständnis für den Zusammenhang vermittelt. Erst wenn dieses Verständnis vorhanden ist, können die Schüler das Gelernte auf bislang nicht gesehene Beispiele anwenden. Werden nun immer noch Fehler gemacht, z.B. für schwierige Zahlenkombinationen, so bedarf es lediglich zusätzlicher Übung. Die Zahl der Schüler, welche die gelernte Operation nun korrekt beherrschen, ist abhängig davon, wie gewissenhaft jeder der vorangehenden Schritte von dem Lehrer ausgeführt wurde.

Die in dem obigen Beispiel enthaltenen Stufen des Erlernens sind direkt auf die Arbeit mit Neuronalen Netzen übertragbar (siehe Tabelle 1.1). Bei Eindeutigkeits- oder Vollständigkeitsproblemen liefert der Trainingsalgorithmus Hinweise, daß das zu Erlernende nicht erlernbar ist. Dann ist die Formulierung zu ändern bzw. die fehlende Information zu identifizieren und in Form weiterer Eingabedaten hinzuzufügen. Die Anwendung

Stufe	Neuronales Netz
1 Eindeutigkeit	Formulierung des Problems
2 Vollständigkeit	Eingabedaten
3 Generalisierung	Ausgabedaten
4 Genauigkeit	Lage der Muster
5 Intelligenz	Komplexität der Netzstruktur

Tabelle 1.1: Untergliederung des Lernprozesses und zugeordnete Instanzen bei dem Training eines Neuronalen Netzes.

des Erlernten auf bislang unbekannte Beispiele zeigt die erzielte Generalisierung der begrenzten Anzahl gezeigter Beispiele auf den zugrundeliegenden kontinuierlichen Zusammenhang. Hier spielt die Unterstützung mittels Vorwissen eine entscheidende Rolle, welche durch eine geeignete Formulierung der Ausgabedaten eingebracht werden kann. Eine Steigerung der Genauigkeit für schwierige Beispiele kann durch eine dichtere Belegung mit Trainingsbeispielen in dem betreffenden Gebiet erreicht werden. Letztendlich ist die Intelligenz des Schülers vergleichbar mit der Anzahl von Neuronen und Schichten eines Neuronalen Netzes. Durch Variation der Neuronenzahlen ist es möglich, ein Netz zu finden, das den Zusammenhang besser erlernt als andere. Sind jedoch die Stufen 1–4 optimal ausgearbeitet worden, so ist die Genauigkeit der trainierten Neuronalen Netze nahezu invariant bezüglich der Netzstruktur, sofern diese vernünftig gewählt ist.

Unter diesen Gesichtspunkten soll die vorliegende Arbeit nicht nur eine Sammlung interessanter Anwendungen Neuronaler Netze darstellen. Vielmehr werden systematische Vorgehensweisen zur optimalen Bearbeitung der Stufen 1–4 vorgestellt und deren Anwendung an den verschiedensten Beispielen demonstriert. Dabei soll nicht verschwiegen werden, daß auch diese Methoden ihre Grenzen besitzen. Aus diesem Grund ist es ein besonderes Anliegen dieser Arbeit, durch sukzessive Komplizierung der Probleme diese Grenzen zu erforschen und in Relation zu konventionellen Vorgehensweisen zu diskutieren.

## 1.2 Überblick

Die Anwendungsmöglichkeiten Neuronaler Netze sind vielfältig und können mit den Begriffen Approximation, Vervollständigung, Klassifikation, Prädiktion, Optimierung, Identifikation, Regelung und Filterung zusammengefaßt werden. Der interessierte Leser sei für nähere Informationen zu diesen Punkten z.B. auch auf [26, 39] verwiesen. Zur Beschränkung auf die Aspekte, die für mechanische Probleme von besonderem Interesse sind, soll im folgenden lediglich auf die Prädiktion, die Optimierung und die Identifikation eingegangen werden.

### 1.2.1 Prädiktion

Die Aufgabe von Methoden zur Lösung direkter (Prädiktions-)Probleme ist es, ein bislang unbekanntes Ergebnis vorauszusagen. Hierzu werden Modellvorstellungen in mathematischen Gleichungen oder Gleichungssystemen abstrahiert, die analytisch oder numerisch auszuwerten sind. Die Modelle können aber in vielen Fällen nur wenige we-



sentliche Einflüsse berücksichtigen. In anderen Fällen wiederum kann der Aufwand für die numerische Lösung erheblich sein. Dies kann zu hohen Kosten verursachen, zum anderen die technische Realisierbarkeit (z.B. von Reglern) unmöglich machen. Eine kostengünstige und schnelle Lösung kann mit Hilfe von Neuronalen Netzen realisiert werden, wobei die Anzahl der zu berücksichtigenden Eingangsgrößen nicht durch das Netz beschränkt ist.

So wurden Neuronale Netze z.B. zur Modellierung von Erden [70], von Beton unter hohen Temperaturen [84], des konstitutiven Verhaltens von Kohlenstoffstählen [59] oder zur Voraussage der elastischen Eigenschaften von Silikon-Gel [86], dem Sinterverhalten von Aluminiumoxid [44], der mechanischen Eigenschaften von hochfesten Kupfer-Nickel Legierungen [31], den Eigenschaften von Polymeren [105] oder der mechanischen Eigenschaften von Metall-Matrix Komposite [83] eingesetzt.

Das zum Training verwendete Datenmaterial kann hierbei sowohl aus Experimenten als auch aus numerischen Simulationen stammen. Mit Hilfe von solchen Modellen können z.B. die Eigenschaften des Endproduktes in Abhängigkeit der Herstellungsparameter vorausgesagt werden.

## 1.2.2 Inverse Probleme

Liegt ein inverses Problem vor, so sind einzelne oder alle Eingangsgrößen des direkten Problems gesucht. Bei der Anwendung Neuronaler Netze können zwei Klassen inverser Probleme unterschieden werden.

### Optimierung

Liegt ein Optimierungsproblem vor, so ist von vornherein nicht bekannt, welchen Wert das direkte Problem im gesuchten Extremum ergibt. Dann kann das Neuronale Netz zur Prädiktion des direkten Problems, punktweise gegeben durch Experimente oder numerische Lösungen, trainiert werden. Repräsentiert das Netz den gegebenen Zusammenhang, kann dieses an Stelle der Experimente oder numerischen Simulationen in ein Optimierungsverfahren eingebettet werden. Aufgrund der einfachen mathematischen Struktur des Neuronalen Netzes und der damit verbundenen geringen Rechenzeit wird somit das Optimierungsverfahren mit einer vielfachen Geschwindigkeit ablaufen [19].

Als Anwendungsbeispiele in der Literatur seien die Strukturoptimierung [91], die Optimierung von Kompositen [92] sowie die Optimierung von Stahlträgern [2] genannt.

## Identifikation

Bei dem Identifikationsproblem sind alle oder ein Teil der Eingangsgrößen des direkten Problems gesucht, während die zugehörigen Ausgangsgrößen und der restliche Teil der Eingangsgrößen explizit gegeben sind. Hier kann das Neuronale Netz in der Form trainiert werden, daß es eine Funktion repräsentiert, die alle gegebenen Werte als Argumente geliefert bekommt und die gesuchten Werte als Funktionswerte ausgibt. Auf diesem Gebiet haben YAGAWA & OKUDA sowie YOSHIMURA ET AL. grundlegende Arbeit geleistet (siehe [117, 119] und die dort zitierte Literatur). Als in diesen Arbeiten behandelte Probleme sind zu nennen: die Identifikation der Lage, Größe und Orientierung von Defekten im Inneren von Körpern mit Ultraschall, die Identifikation der Verteilung der Plattendicke mit Schwingungsanalyse, die Identifikation von Materialparametern für viskoplastisches Materialverhalten aus einachsigen homogenen Experimenten (hierauf wird in Kapitel 4 näher eingegangen), die Identifikation des Rißwachstumsverhaltens von gewalzten Proben durch die gemessenen Schallemissionen sowie die Identifikation der Verteilung des Elastizitätsmoduls in einem inhomogenen Balken aufgrund der Eigenfrequenzen.

## 1.3 Inhalt der vorliegenden Arbeit

Im einzelnen werden in dieser Arbeit die folgenden Themen behandelt. Kapitel 2 dient der Einführung in die Grundlagen zur Lösung inverser Probleme, wobei zwischen Optimierungsverfahren und Neuronalen Netzen unterschieden wird. Repräsentativ werden aus der Menge deterministischer Optimierungsverfahren ein einfaches Gradientenverfahren und die Methode der konjugierten Gradienten vorgestellt. Als Vertreter der stochastischen Methoden kommen die Evolutionsstrategie und die Schwarmssuche in Betracht. Nach dem Vergleich der Eigenschaften der ausgewählten Optimierungsverfahren werden Aufbau und Trainingsalgorithmen Neuronaler Netze ausführlich dargestellt. Hinzu kommt eine Zusammenfassung der Möglichkeiten zur Aufbereitung der Daten und des Einbringens von Vorwissen. An einem anschaulichen Beispiel werden schließlich die Vorgehensweisen im Umgang mit Neuronalen Netzen und deren Fähigkeiten demonstriert.

Die Identifikation der Materialparameter einer mikrostrukturierten Platte aus dem Kunststoff Polyimid wird in Kapitel 3 erläutert. Die Verknüpfung eines inhomogenen Experimentes mit Finite Elemente Simulationen und Neuronalen Netzen ist hierbei be-

dingt durch die Abmessung der Platte, deren Durchmesser etwa einen halben Millimeter beträgt. Nach einer Einführung in die Problematik der Messung von mechanischen Eigenschaften bei Bauteilen mit kleinen Abmessungen wird das verwendete Materialmodell der Viskoelastizität hergeleitet. Die in diesem Modell enthaltenen Materialparameter stellen die gesuchten Größen dar und sollen mit Hilfe eines Neuronalen Netzes ermittelt werden. Zu diesem Zweck werden das mit einem registrierenden Härtemeßgerät durchgeführte Experiment, die Finite Elemente Simulationen sowie das Training des Netzes dargestellt.

Das behandelte Problem ist hierbei so speziell, daß noch keine Notwendigkeit besteht, Vorwissen in besonderer Weise in das Neuronale Netz einzuarbeiten. In sofern stellt dieses Kapitel einen Einstieg in die behandelte Materie in der Form dar, daß zunächst gezeigt wird, wie die Eingabe- und Ausgabedaten für die Neuronalen Netze in konventioneller Weise, d.h. ohne Vorwissen, formuliert werden.

Wie die Materialparameter eines Materialmodells der Viskoplastizität mit isotroper und kinematischer Verfestigung sowie statischer Erholung aus einem eindimensionalen Zug-Druck-Experiment ermittelt werden können, zeigt Kapitel 4. Als Einstieg wird die Herleitung des Materialmodells unter Berücksichtigung großer Deformationen und der thermodynamischen Konsistenz skizziert. Neben der dreidimensionalen Formulierung werden die resultierenden eindimensionalen Materialgleichungen und Näherungslösungen für Sonderfälle diskutiert. Diese Näherungslösungen stellen die Grundlage für die Art und Weise dar, wie entsprechendes Vorwissen in die Netzdefinition einzuarbeiten ist.

In diesem Kapitel nimmt das Vorgehen zur Herstellung der Eindeutigkeit bezüglich der sich stets additiv überlagernden Erholungseffekte einen besonderen Stellenwert ein. Abgerundet wird dieses komplexe Thema durch die Anwendung der Neuronalen Netze auf Experimente an ferritischem Stahl bei höherer Temperatur. In diesem Zusammenhang bildet die Behandlung des Problems der Interpolation von Materialparametersätzen über der Temperatur einen interessanten Beitrag.

Die Identifikation der Materialparameter eines Materialmodells der Plastizität mit einem inhomogenen Kugeleindruckexperiment ist Gegenstand der Kapitel 5 und 6. Die zusätzliche Komplizierung besteht in der Beschränkung auf die global meßbaren Größen Kraft und Eindrucktiefe, ohne weitere Größen zu verwenden, welche das Deformationsfeld charakterisieren (z.B. der Kontaktfläche oder der Aufwölbung am Kontaktrand).

Unter dem Aspekt, daß das Materialverhalten nichtlineare isotrope und kinematische

Verfestigung aufweist, besteht zunächst die Aufgabe, die meßbaren Eindrucktiefelast-Trajektorien auf Effekte zu untersuchen, die sich auf die unterschiedlichen Verfestigungen zurückführen lassen. Diese Effekte werden zur Bildung geeigneter Maße herangezogen, welche zur eindeutigen Ermittlung der Materialparameter geeignet sind. Der Zusammenhang zwischen diesen Maßen und den gesuchten Materialparametern wird zunächst punktweise aus Eindrucksimulationen ermittelt und anschließend durch Neuronale Netze als kontinuierliche Funktion repräsentiert. Somit kann aus einer gegebenen Eindrucktiefelast-Trajektorie quasi per Tastendruck der zugeordnete Satz an Materialparametern ermittelt werden.

Die typische Anwendung von Eindrucksexperimenten ist die Ermittlung mechanischer Eigenschaften dünner Schichten. Diesem Problem widmet sich das letzte Kapitel. Zur Ermittlung der Schichteigenschaften mit dem Kugeleindruckexperiment ist es notwendig, die Einflüsse des sich unter der Schicht befindlichen Substrates aus der gemessenen Eindrucktiefelast-Trajektorie des Schicht-Substrat-Verbundes zu eliminieren. Für die Separation der Schichteigenschaften wird eine fiktive Eindrucktiefelast-Trajektorie eines halbumendlichen Körpers eingeführt, der dasselbe Materialverhalten wie das Schichtmaterial aufweisen soll. Mit Hilfe eines Neuronalen Netzes werden die Eindrucktiefelast-Trajektorien des Schicht-Substrat-Verbundes und des unbeschichteten Substrates auf die fiktive Eindrucktiefelast-Trajektorie des Schichtmaterials abgebildet. Aus dieser können anschließend mit dem in Kapitel 5 entwickelten Verfahren die Materialparameter der Schicht gewonnen werden.

## 1.4 Allgemeine Angaben – Beziehungen

Den Schwerpunkt dieser Arbeit stellen Anwendungen Neuronaler Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik dar. Zur besseren Verständlichkeit sollen zunächst die verwendeten Grundlagen der Kontinuumsmechanik skizziert werden. Zur Einführung der meist tensoriellen Größen wird in den folgenden Abschnitten auf die wichtigsten Rechenregeln, die Beschreibung der Deformation und das Konzept der dualen Variablen eingegangen.

### 1.4.1 Rechenregeln mit Tensoren

Tensoren werden durch Fettdruck gekennzeichnet. Unterschieden wird dabei zwischen Tensoren 1. Stufe (Vektoren)  $\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}_i$ , Tensoren 2. Stufe  $\mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$  und Tensoren 4. Stufe  $\mathcal{A} = \mathcal{A}_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ , wobei das orthogonale kartesische

Basissystem durch die linear unabhängigen Basisvektoren  $\mathbf{e}_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  aufgespannt wird. Bei Indexschreibweise gilt die Einstein'sche Summationskonvention. Für weitere Erläuterungen sei auf Lehrbücher von De Boer [8] und Klingbeil [65] verwiesen.

Es gelten die Beziehungen:

$\mathbf{1} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$	Einheitstensor 2. Stufe
$\mathcal{E} = \delta_{ij} \delta_{mn} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_n$	Einheitstensor 4. Stufe
$\text{grad}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\cdot)$	Gradient bezüglich der Momentankonfiguration
$(\cdot)' = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot)$	Materielle Zeitableitung
$\text{Sp } \mathbf{A} = A_{ii}$	Spur des Tensors zweiter Stufe $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^T = A_{ji} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$	Transposition von $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\text{Sp } \mathbf{A})\mathbf{1}$	Deviator von $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{-1} \quad (\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{1})$	Inverse von $\mathbf{A}$
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	Dyadisches Produkt zweier Vektoren
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	Dyadisches Produkt zweier Tensoren zweiter Stufe
$\mathbf{A}\mathbf{b} = A_{ij}b_j \mathbf{e}_i$	Anwendung des Tensors zweiter Stufe $\mathbf{A}$ auf den Vektor $\mathbf{b}$
$\mathbf{A}\mathbf{B} = A_{ij}B_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k$	Multiplikative Verknüpfung zweier Tensoren 2. Stufe
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$	Skalarprodukt zweier Vektoren
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \text{Sp}(\mathbf{A}\mathbf{B}^T) = A_{ij}B_{ij}$	Skalarprodukt zweier Tensoren 2. Stufe
$\mathbf{A} = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$	Euklidische Norm von $\mathbf{A}$
$\mathcal{A}[\mathbf{B}] = \mathcal{A}_{ijkl}B_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$	Anwendung des Tensors 4. Stufe $\mathcal{A}$ auf den Tensor 2. Stufe $\mathbf{B}$

### 1.4.2 Kinematik

Ein Körper ist gegeben durch eine Menge von materiellen Punkten. Jeder dieser materiellen Punkte ist gekennzeichnet durch einen Ortsvektor  $\mathbf{X}$  in der undeformierten Referenzkonfiguration  $R_0$ . Es wird angenommen, daß der Raumbereich in  $R_0$  zur Zeit  $t = 0$  vom materiellen Körper angenommen wird. Zur Beschreibung der Deformation wird die Bewegung der materiellen Punkte in die Momentankonfiguration  $R_t$  betrachtet, die zu jedem beliebigen Zeitpunkt  $t$  durch den Ortsvektor  $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$  gegeben ist:

$$\mathbf{x} : (\mathbf{X}, t) \rightarrow \mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t) . \quad (1.1)$$

Für einen festen Zeitpunkt  $t$  ist die Inverse von  $\hat{\mathbf{x}}$  gegeben mit  $\mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, t)$ . Der Verschiebungsvektor berechnet sich nach

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) = \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} . \quad (1.2)$$

Der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} := \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \quad (1.3)$$

beschreibt die Verformung einer materiellen Linie durch einen betrachteten materiellen Punkt als erstes Glied einer Taylor-Reihe

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} \quad (1.4)$$

und charakterisiert damit zu einem beliebigen aber festen Zeitpunkt  $t$  die Deformation in der Umgebung eines materiellen Punktes. Aus Gleichung (1.4) folgt direkt die Eigenschaft des Deformationsgradienten, einen Tangentenvektor  $d\mathbf{X}$  der Referenzkonfiguration in den zugehörigen Tangentenvektor  $d\mathbf{x}$  der Momentankonfiguration zu transformieren:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X} . \quad (1.5)$$

Dies legt ein Verzerrungsmaß der Form

$$\Delta := \frac{1}{2}(d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X}) \quad (1.6)$$

nahe, das mit (1.5) in die Form

$$\Delta = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{X} \quad (1.7)$$

gebracht werden kann. Der Green'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} := \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) \quad (1.8)$$

bezieht sich auf die Referenzkonfiguration und besitzt somit spezielle Invarianzeigenschaften (siehe nächsten Abschnitt).

Andere Verzerrungsmaße können z.B. unter Verwendung von Normalen an materielle Flächen gewonnen werden. Es kann gezeigt werden, daß die Normale  $\mathbf{N}$  einer materiellen Fläche in  $R_0$  in die zugehörige Normale nach

$$\mathbf{n} = \mathbf{F}^{T-1} \mathbf{N} \quad (1.9)$$

in  $R_t$  transformiert wird. Somit ergibt sich aus dem zugehörigen Verzerrungsmaß

$$\delta := \frac{1}{2}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{N} \cdot \mathbf{N}) = \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{N} \quad (1.10)$$

der Piola Verzerrungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} := \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{T-1} - \mathbf{1}) . \quad (1.11)$$

Verzerrungsmaße auf der Basis von  $\Delta$  werden als zugehörige der Familie 1 bezeichnet, während diejenigen auf der Basis von  $\delta$  als Verzerrungsmaße der Familie 2 bezeichnet werden. Die folgenden Betrachtungen werden stellvertretend nur für Familie 1 durchgeführt.

### 1.4.3 Duale Dehnungs- und Spannungsvariablen

Bei der Formulierung konstitutiver Gleichungen in der Plastizität in Verbindung mit großen Deformationen sollten Dehnungs- und Spannungsgrößen sowie die damit verbundenen Raten entsprechend dem Konzept der dualen Variablen gewählt werden. Dieses Konzept wurde von HAUPT & TSAKMAKIS [36] eingeführt und weiterentwickelt (siehe [37]). Einige mathematische Aspekte wurden von SVENDSEN & TSAKMAKIS [106] aus der Sicht der lokalen differentialgeometrischen Formulierung der Theorie diskutiert. Es sei anzumerken, daß das Konzept der dualen Variablen sich von der bekannten Methode der konjugierten Variablen unterscheidet (siehe [37]).

Mit der Geschwindigkeit eines materiellen Punktes

$$\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t) = \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{X}, t) = \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \quad (1.12)$$

folgt für die materielle Zeitableitung des Deformationsgradienten

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} \right) = \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{F} = \mathbf{L} \mathbf{F} . \quad (1.13)$$

Der räumliche Geschwindigkeitsgradient  $\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$  kann additiv zerlegt werden nach

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (1.14)$$

in den symmetrischen Dehnungsgeschwindigkeitstensor  $\mathbf{D} := \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$  und den antisymmetrischen Wirbeltensor  $\mathbf{W} := \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$ .

Bei großen Deformationen wird von der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p \quad (1.15)$$

in einen reversiblen elastischen Anteil  $\mathbf{F}_e$  und einen irreversiblen Anteil  $\mathbf{F}_p$  ausgegangen. Die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten definiert eine spannungsfreie, lokal entlastete Zwischenkonfiguration  $\hat{R}_t$ , die i.a. nicht kompatibel ist. Die Zwischenkonfiguration kann durch Einfügen eines orthogonalen Tensors  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{-1}$ ,  $\det \mathbf{Q} = 1$  beliebig gedreht werden, womit weitere mögliche Zwischenkonfigurationen entstehen:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T \mathbf{F}_p = \mathbf{F}_e^* \mathbf{F}_p^* \quad (1.16)$$

mit

$$\mathbf{F}_e^* := \mathbf{F}_e \mathbf{Q} , \quad (1.17)$$

$$\mathbf{F}_p^* := \mathbf{Q}^T \mathbf{F}_p . \quad (1.18)$$

Diese unbestimmte Starrkörperrotation in  $\hat{R}_t$  begründet das Invarianzpostulat von Green & Naghdi, welches die Invarianz der konstitutiven Beziehungen gegen beliebige Rotationen der Zwischenkonfiguration fordert und somit eine Restriktion an die Materialgleichungen darstellt [30].

Analog zu (1.7) lassen sich unter Verwendung von (1.15) zwei Verzerrungstensoren bezüglich der Zwischen- bzw. Momentankonfiguration ableiten:

$$\Delta = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{X} = d\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\Gamma} d\hat{\mathbf{x}} = d\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} d\mathbf{x} , \quad (1.19)$$

mit

$$\hat{\Gamma} := \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e - \mathbf{F}_p^{T-1} \mathbf{F}_p^{-1}) , \quad (1.20)$$

$$\mathbf{A} := \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{T-1} \mathbf{F}^{-1}) . \quad (1.21)$$

Ebenso wie Verzerrungstensoren existieren auch unterschiedliche Spannungstensoren, wodurch eine Vielzahl von Möglichkeiten entsteht, Verzerrungs- und Spannungstensoren zu verknüpfen sowie deren Geschwindigkeiten zu definieren. Eine systematische Vorgehensweise ist durch das Konzept der dualen Variablen von HAUPT & TSAKMAKIS gegeben [36, 37, 111]. Darin werden alle Tensoren von skalaren Größen abgeleitet, die als forminvariant bezüglich der gewählten Konfiguration definiert werden.



Verzerrungstensoren der Familie 1 leiten sich nach diesem Konzept entsprechend (1.19) aus  $\Delta$  ab. Deren Raten entstehen aus der Invarianzforderung bezüglich  $\hat{\Delta}$  gegenüber einem Wechsel der zugrundegelegten Konfiguration:

$$\dot{\hat{\Delta}} = d\mathbf{X} \cdot \dot{\mathbf{E}} d\mathbf{X} = d\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}} d\hat{\mathbf{x}} = d\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{A}} d\mathbf{x} , \quad (1.22)$$

mit

$$\hat{\mathbf{\Gamma}} := \dot{\hat{\mathbf{\Gamma}}} + \mathbf{L}_p^T \hat{\mathbf{\Gamma}} + \hat{\mathbf{\Gamma}} \mathbf{L}_p , \quad (1.23)$$

$$\hat{\mathbf{A}} := \dot{\hat{\mathbf{A}}} + \mathbf{L}^T \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \mathbf{L} = \mathbf{D} . \quad (1.24)$$

In analoger Weise lassen sich Verzerrungsmaße definieren, die den reversiblen bzw. irreversiblen Anteil der Deformation charakterisieren, wenn die Invarianz bezüglich  $\Delta_e$  bzw.  $\Delta_p$  mit  $\Delta = \Delta_e + \Delta_p$  gefordert wird (siehe [36]). Für die Zwischenkonfiguration erhält man z.B.

$$\Delta = \Delta_e + \Delta_p , \quad \Delta_e = d\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}}_e d\hat{\mathbf{x}} , \quad \Delta_p = d\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}}_p d\hat{\mathbf{x}} , \quad (1.25)$$

mit

$$\hat{\mathbf{\Gamma}} = \hat{\mathbf{\Gamma}}_e + \hat{\mathbf{\Gamma}}_p , \quad \hat{\mathbf{\Gamma}}_e := \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^T \mathbf{F}_e - \mathbf{1}) , \quad \hat{\mathbf{\Gamma}}_p := \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}_p^{T-1} \mathbf{F}_p^{-1}) . \quad (1.26)$$

Analog zu (1.22) folgen die objektiven Ableitungen aus der Invarianz bezüglich  $\hat{\Delta}_e$  bzw.  $\hat{\Delta}_p$ . Speziell für  $\hat{\mathbf{\Gamma}}_p$  kann gezeigt werden, daß

$$\dot{\hat{\mathbf{\Gamma}}}_p := \dot{\hat{\mathbf{\Gamma}}}_p + \mathbf{L}_p^T \hat{\mathbf{\Gamma}}_p + \hat{\mathbf{\Gamma}}_p \mathbf{L}_p = \mathbf{D}_p = \frac{1}{2}(\mathbf{L}_p + \mathbf{L}_p^T) , \quad (1.27)$$

wobei

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} . \quad (1.28)$$

In der Momentankonfiguration ergibt die Zerlegung

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_e + \mathbf{A}_p , \quad \mathbf{A}_e := \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}_e^{T-1} \mathbf{F}_e^{-1}) , \quad \mathbf{A}_p := \frac{1}{2}(\mathbf{F}_e^{T-1} \mathbf{F}_e^{-1} - \mathbf{F}^{T-1} \mathbf{F}^{-1}) . \quad (1.29)$$

Die Wahl des zugehörigen Spannungstensors erfolgt über die Forderung der Invarianz der spezifischen Spannungsleistung pro Volumeneinheit in  $R_0$ :  $\rho_0 W = \mathbf{S} \cdot \mathbf{D}$ , wobei

$$\mathbf{S} := (\det \mathbf{F}) \mathbf{T} \quad (1.30)$$

den gewichteten Cauchy'schen und  $\mathbf{T}$  den Cauchy'schen Spannungstensor bezeichnet. Damit ergeben sich die dualen Dehnungsgeschwindigkeiten und Spannungstensoren zu

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{D} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\dot{\mathbf{T}}} = \mathbf{S} \cdot \hat{\dot{\mathbf{A}}} , \quad (1.31)$$

mit dem zweiten Piola-Kirchhoff Spannungstensor in der Zwischenkonfiguration  $\hat{\mathbf{T}}$  und dem zweiten Piola-Kirchhoff Spannungstensor  $\tilde{\mathbf{T}}$  in der Bezugskonfiguration:

$$\tilde{\mathbf{T}} := \mathbf{F}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{F}^{T-1} , \quad (1.32)$$

$$\hat{\mathbf{T}} := \mathbf{F}_e^{-1} \mathbf{S} \mathbf{F}_e^{T-1} . \quad (1.33)$$

Analog zu den Verzerrungstensoren werden die objektiven Ableitungen für die Spannungstensoren anhand der Invarianzforderung bezüglich  $\rho_0 \dot{W}$  gebildet. Für die Zwischen- und Momentankonfiguration resultieren die Oldroyd-Ableitungen

$$\overset{\nabla}{\hat{\mathbf{T}}} := \dot{\hat{\mathbf{T}}} - \mathbf{L}_p \hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{T}} \mathbf{L}_p^T , \quad (1.34)$$

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} := \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{L} \mathbf{S} - \mathbf{S} \mathbf{L}^T . \quad (1.35)$$

## 2 Einführung in Optimierungsverfahren und Neuronale Netze

Die Anwendung von Optimierungsverfahren in der Mechanik beschränkt sich in der Regel auf die Lösung inverser Probleme, wie z.B. Spannungsminimierung, Gewichtsreduktion, Parameteridentifikation. Neuronale Netze können sowohl direkte Probleme (Voraussage des mechanischen Verhaltens) als auch inverse Probleme (Identifikation) lösen. Zur Bearbeitung von Optimierungsaufgaben können Neuronale Netze und Optimierungsverfahren kombiniert werden. In diesem Kapitel werden die Grundlagen der Optimierungsverfahren und der Neuronalen Netze ausführlich erläutert und deren Eigenschaften mit Hilfe von Beispielen dargestellt.

### 2.1 Direktes und inverses mechanisches Problem

Ein mechanisches Problem wird durch die Geometrie, das Materialverhalten sowie die Randbedingungen definiert. Die Geometrie zu Beginn der Belastung zur Zeit  $t = 0$  wird als *Referenzkonfiguration*  $R_0$  bezeichnet. Bei einem Experiment ist das Materialverhalten durch den Werkstoff vorgegeben, wobei neben der chemischen Zusammensetzung noch viele weitere Abhängigkeiten bestehen, wie z.B. von dem Herstellungsverfahren, den Lagerungsbedingungen, dem Umgebungsmedium sowie Beanspruchungen durch Bearbeitung, Montage und Betrieb. Unter Beanspruchungen durch Montage zählen u.a. solche, wie sie durch thermische (Presspassungen, Schweißen) oder plastische Montageverfahren (Nieten, Biegen) entstehen. Bei der Anwendung von Berechnungsmethoden wird das mechanische Verhalten des Werkstoffs durch ein *Materialmodell* beschrieben, in welchem die beobachtbaren Phänomene in mathematischer Form abstrahiert werden. Die einzelnen Modellgleichungen definieren die Erscheinungsform der Effekte (z.B. Nichtlinearität, Sättigung, Kopplungen). Die quantitative Charakterisierung wird mit den in den Gleichungen enthaltenen *Materialparametern* vorgenommen, welche durch den Vektor  $\mathbf{q}$  gegeben sind. Die Randbedingungen können sowohl in der Amplitude als auch bezüglich des belasteten Gebietes zeitlich veränderlich sein. In der Regel können die Randbedingungen durch einen zeitabhängigen Vektor endlicher Größe, in Form der *Lastgeschichte*  $\mathbf{P}(\tau)$  definiert werden, wobei die einzelnen Komponenten einem bestimmten Gebiet (Punkt, Linie, Fläche, Volumen) des Körpers zugeordnet sind.

### 2.1.1 Direktes Problem

Das direkte mechanische Problem sei durch das Funktional  $\mathcal{F}$

$$\mathcal{S}(t) = \mathcal{F}_{\tau=0}^t \{R_0, \mathbf{q}, \mathbf{P}(\tau)\} \quad (2.1)$$

in Abhängigkeit von der Geometrie  $R_0$ , den Materialparametern  $\mathbf{q}$  sowie der Lastgeschichte  $\mathbf{P}(\tau)$  definiert. Das betrachtete Funktional  $\mathcal{F}$  kann durch ein Experiment, eine analytische Lösung oder ein numerisches Verfahren gegeben sein. Im Falle elastischen Materialverhaltens degeneriert das Funktional  $\mathcal{F}$  zu einer Funktion, da die Lösung wegunabhängig ist und somit nicht von der Vorgeschichte  $\mathbf{P}(\tau)$ , sondern nur von der aktuellen Belastung  $\mathbf{P}(t)$  abhängt.

Die Argumente des Funktionals  $\mathcal{F}$  werden als *Eingangsgrößen* des direkten Problems bezeichnet, während die *Ausgangsgrößen* des Lösungsverfahrens meist in Form eines Verschiebungsfeldes, eines Verzerrungsfeldes oder eines Spannungsfeldes ermittelt werden.

Die Größe  $\mathcal{S}$  soll hierbei nur diejenige Ausgangsgröße repräsentieren, die für den Betrachter relevant ist. Zum Beispiel kann  $\mathcal{S}$  die Verschiebung eines Punktes in der Symmetrieachse oder die resultierende Kraft sein, welche die Antwort eines u.U. komplizierten mechanischen Systems charakterisiert. Im folgenden wird  $\mathcal{S}$  als *Systemantwort* bezeichnet.

### 2.1.2 Inverses Problem

Ein inverses Problem basiert auf der Fragestellung nach dem Wert einer oder mehrerer Eingangsgrößen. Jedes der drei Argumente  $R_0$ ,  $\mathbf{q}$  oder  $\mathbf{P}(\tau)$  kann Gegenstand eines inversen Problems sein, d.h. es wird danach gefragt, wie der Körper vor der Belastung aussah, welches Materialverhalten der Körper besitzt oder welche Lastgeschichte auf den Körper eingewirkt hat. Für jedes dieser drei Typen inverser Probleme sind Beispiele in der Literatur zu finden. Die Frage nach der Referenzkonfiguration findet häufig Anwendung bei der Detektion von Rissen im Inneren eines Körpers mit Ultraschall [14, 117]. Die Identifikation der Materialparameter als bekanntestes inverses Problem wurde z.B. in [77, 98, 117] diskutiert. Nach der korrekten Lastgeschichte wird z.B. dann gesucht, wenn ein Halbzeug, z.B. beim Walzen [110, 63], in eine gewünschte Geometrie umgeformt werden soll.

Voraussetzungen zur Lösung des inversen Problems sind neben der notwendigen Existenz und Eindeutigkeit die stetige Abhängigkeit sowie die Vollständigkeit der Daten [77, S.

16]. In vielen Fällen können diese Bedingungen durch gezielte Wahl der Prozeßführung  $\mathbf{P}(\tau)$  und der meßbaren Größen  $\mathcal{S}$  erfüllt werden.

### Identifikation der Materialparameter

Das klassische inverse Problem in der Mechanik ist die Ermittlung von Materialparametern aus Experimenten. Im folgenden wird vorausgesetzt, daß die Methode zur Lösung des direkten Problems (2.1) verfügbar ist und die Lösung existiert. Sind die Referenzkonfiguration  $R_0$  sowie der Prozeß  $\mathbf{P}(\tau)$  festgelegt, reduziert sich das Funktional  $\mathcal{F}$  zu einer Abbildung

$$\mathcal{S} = \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}, t) , \quad (2.2)$$

wobei  $R_0$  und  $\mathbf{P}(\tau)$  als Konstanten in  $\hat{\mathcal{S}}$  enthalten sind.

Weder bei der experimentellen noch bei der numerischen Realisierung stehen jedoch unendlich viele Lösungspunkte  $\mathcal{S}$  zur Verfügung. Vielmehr wird die betreffende Größe *abgetastet*, d.h. zu beliebigen aber festen, diskreten Zeitpunkten  $t_i$ ,  $i = 1..N_t$ , ermittelt. Somit ergibt sich der Lösungsvektor der Systemantwort von der Dimension  $N_t$ :

$$\mathcal{S} = \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}) , \quad \mathcal{S}_i := \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}, t_i) . \quad (2.3)$$

Das zugehörige inverse Problem besteht darin, für eine gegebene Systemantwort  $\mathcal{S}$ , die zugehörigen Materialparameter  $\mathbf{q}$  nach

$$\mathbf{q} = \hat{\mathcal{S}}^{-1}(\mathcal{S}) \quad (2.4)$$

zu bestimmen. Hierbei kann die Eindeutigkeit von  $\hat{\mathcal{S}}^{-1}$  und die Vollständigkeit von  $\mathcal{S}$  in vielen Fällen durch die Wahl eines geeigneten Prozesses  $\mathbf{P}(\tau)$  erreicht werden, wie es z.B. in den Kapiteln 4 und 5 gezeigt wird.

### Meßfehler

Eine gemessene Systemantwort  $\tilde{\mathcal{S}}$  enthält i.a. Meßfehler unterschiedlicher Natur. Neben dem begrenzten Auflösungsvermögen der Sensoren sind Fehlerfortpflanzung in der Meßkette sowie der Einfluß von Störungen durch die Umgebung an verschiedenen Stellen der Meßkette, wie z.B. Temperatur, Luftfeuchte und elektromagnetische Einflüsse, für die letztendlich in der gemessenen Systemantwort enthaltenen Fehler verantwortlich.

Meßfehler, die ein zufällig um den korrekten Wert schwankendes Signal erzeugen, können durch Mittelung weitestgehend eliminiert werden. Andere Fehler, wie z.B. Drift oder ein

systematischer Fehler müssen durch geeignete Kompensationen (z.B. Vollbrückenschaltung) oder Korrekturen (z.B. Messen der Temperatur) beseitigt werden.

Eine weitere Quelle von Unsicherheiten ist die Streuung der Materialeigenschaften selbst. Wird mehr als eine Probe zur Identifikation eines Parametersatzes verwendet, ist grundsätzlich zu berücksichtigen, daß jede Probe einen anderen Materialparametersatz repräsentiert. Werden mehrere Experimente durchgeführt, um aufgrund unterschiedlicher Lastgeschichten bestimmte Teile des Parametersatzes identifizieren zu können, kann nicht zwingend vorausgesetzt werden, daß der jeweils nicht sichtbare Teil des Parametersatzes demjenigen entspricht, der aus den anderen Experimenten hervorgeht.

So hat z.B. MAHNKEN einen Parametersatz aus jeweils einem Kriechexperiment bei verschiedenen Temperaturen bzw. Nennspannungen ermittelt (siehe [77, S. 76–81]). Die Temperaturabhängigkeit bzw. die Abhängigkeit von der Nennspannung wird jedoch durch Materialparameter beschrieben, womit eine eventuelle Streuung der Materialeigenschaften von Probe zu Probe von dem Optimierungsverfahren als Effekt der Materialparameter interpretiert wird. Dasselbe gilt auch für die Arbeit von YAGAWA & OKUDA [117], in der die Materialparameter aus einem Zugexperiment und einem zyklischen Experiment ermittelt werden.

Um solche Fehlereinflüsse zu vermeiden, hat SCHWERTEL [98, S. 58] jedes Experiment mehrfach durchgeführt sowie in der Zielfunktion verschiedene Experimente unterschiedlich gewichtet, um so für den zu identifizierenden Materialparametersatz den robusteren Zugexperimenten und zyklischen Experimente gegenüber den stark streuenden Kriechexperimenten mehr Bedeutung beizumessen.

Die vorliegende Arbeit hat das Ziel, die betreffenden Materialparameter möglichst aus einem einzigen Experiment zu ermitteln. Gelingt dies, ist es möglich, die Streuung der Materialeigenschaften verschiedener Proben auf die Streuung der zugeordneten Parameter abzubilden. Eine weitere mögliche Vorgehensweise wird von SEIBERT ET AL. [99] vorgeschlagen, wobei Optimierungsverfahren und statistische Methoden auf unterschiedliche Experimente angewendet werden. Können den Materialparametern statistische Verteilungen zugeordnet werden, so ist es auf diese Weise möglich, die Materialstreuung bei der Auslegung mit z.B. stochastischen Finiten Elementen zu berücksichtigen.

## Modellabweichung

Ein realer Werkstoff läßt sich auch durch sehr komplizierte Materialmodelle nur näherungsweise in seinem komplexen Verhalten beschreiben. Somit besteht immer ein Unterschied zwischen der gemessenen Systemantwort  $\tilde{\mathcal{S}}$  und der daran anzupassenden

Systemantwort des Modells  $\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{q})$ .

Die Modellabweichung kann zum Beispiel durch eine Erhöhung der Zahl an inneren Variablen, einer Berücksichtigung von Nichtlinearitäten (Armstrong-Frederick-Ansatz) oder der Verwendung von mehr als einer kinematischen Verfestigung im Stoffgesetz reduziert werden.

Die Frage ist jedoch, welchen Einfluß der Modellabweichung auf die ermittelten Materialparameter hat. Im konkreten Fall der viskoplastischen Stoffmodelle mit einer kinematischen Verfestigung besteht z.B. die Gefahr, daß aufgrund des stark nichtlinearen Verfestigungsverhaltens zu Beginn eine experimentell gemessene Zugkurve mit einer sehr viel höheren viskosen Überspannung, als tatsächlich vorhanden, besser beschrieben wird.

Es ist daher von Bedeutung, durchaus Abweichungen zwischen der gemessenen und der vom Modell erzeugten Systemantwort zu akzeptieren, um eine physikalisch sinnvolle Zuordnung der Materialparameter zu gewährleisten.

### 2.1.3 Verifikation und Validierung

Bei der Beurteilung der Qualität einer Methode werden die Schritte Verifikation und Validierung unterschieden (siehe z.B. [77, S. 27] und die dort zitierte Literatur).

Bei der *Verifikation* wird die Frage nach der Korrektheit eines Arbeitsschrittes in Bezug auf seine Vorgaben beantwortet. Für die vorliegende Arbeit stellt die Verifikation die Überprüfung einer Identifikationsmethode mit Daten desselben Prozesses dar, welcher zur Erstellung der Identifikationsmethode verwendet wurde. Lediglich die auszuwertenden Parametersätze sind dabei bisher nicht verwendet worden.

Die *Validierung* ist eine übergeordnete Kontrolle bezüglich der Allgemeingültigkeit der Methode. Hier können zwei Fragestellungen betrachtet werden. Zum einen ist es von Interesse, inwieweit die Identifikationsmethode invariant gegenüber einer Änderung der verwendeten Lastgeschichte ist, z.B. Zyklisierung mit unterschiedlicher Dehnungsamplitude oder unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Zum anderen ist zu prüfen, inwieweit die ermittelten Materialparameter in der Lage sind, das Werkstoffverhalten für andere Lastgeschichten vorauszusagen.

## 2.2 Optimierungsverfahren

Mit der Verwendung von Optimierungsverfahren wird die Bestimmung des Parametersatzes  $\mathbf{q}$  durch Minimierung der Zielfunktion  $E(\mathbf{q})$  bei gegebenem  $R_0$  und  $\mathbf{P}(\tau)$

$$E(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \left\| \tilde{\mathcal{S}} - \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}) \right\|^2 \rightarrow \min \quad (2.5)$$

durchgeführt, wobei  $\tilde{\mathcal{S}}$  die experimentell gemessene und  $\hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q})$  die numerisch berechnete Systemantwort für den Prozeß  $\mathbf{P}(\tau)$  darstellt.

Die in der Literatur beschriebenen Verfahren können in deterministische und stochastische Verfahren unterschieden werden [97]. Im Fall deterministischer Verfahren wird der Gradient der Zielfunktion nach dem Parametervektor gebildet. Das Minimum ist erreicht, wenn es gelingt, den Parametervektor so zu wählen, daß der Gradient zu null wird (s. Abb. 2.1). Die deterministischen Verfahren weisen jedoch Nachteile auf. Liegt ein lokales Minimum vor, so kann ein deterministisches Verfahren darin gefangen bleiben (s. Abb. 2.2a).

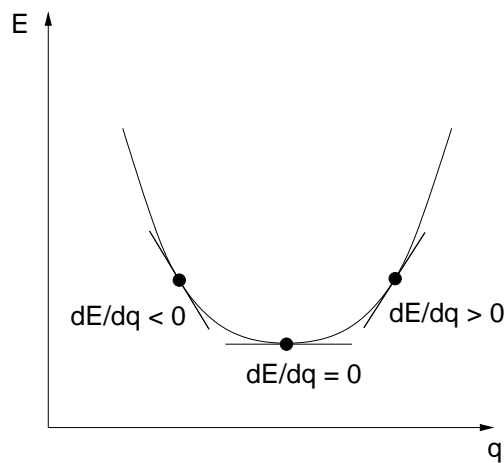


Abbildung 2.1: Auffinden des Minimums der Zielfunktion  $E$  anhand des Gradienten  $dE/dq$ .

Hier führen z.B. mehrere Optimierungsläufe von verschiedenen Startpunkten aus zu verschiedenen Minima. Es muß angenommen werden, daß der kleinste Wert der Zielfunktion tatsächlich dem globalen Minimum entspricht.

Die stochastischen Verfahren sind im Gegensatz zu den deterministischen Vorgehensweisen geeignet, aus lokalen Minima herauszuspringen und das globale Minimum zu finden. Zusätzlich beeinflusst Meßrauschen nicht den Lösungspunkt, sondern lediglich die Konvergenzgeschwindigkeit [97].



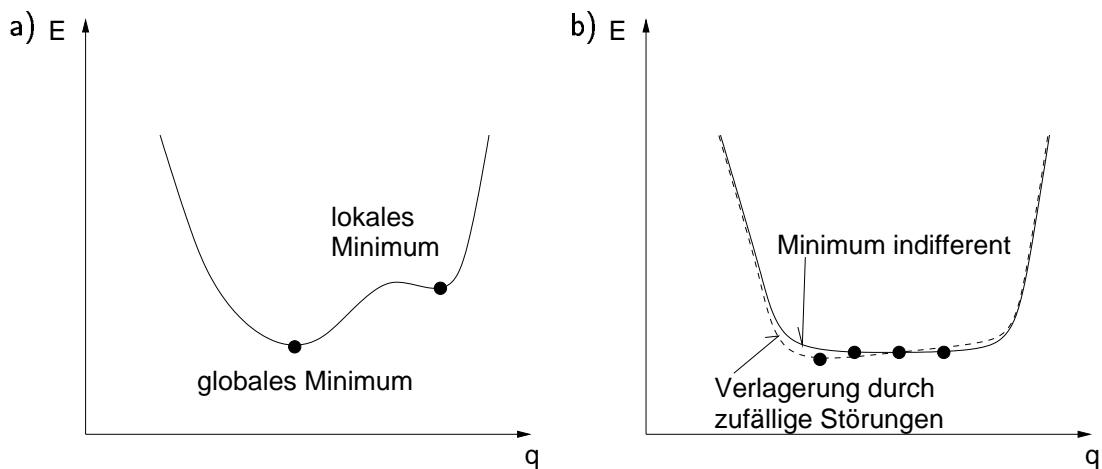


Abbildung 2.2: Für Optimierungsverfahren problematische Situationen: a) lokales Minimum; b) indifferentes Minimum.

Eine völlig andere Situation liegt bei einem indifferenten Minimum vor (s. Abb. 2.2b). Hier wird von verschiedenen Startpunkten der gleiche Minimalwert der Zielfunktion bei unterschiedlichen Werten von  $q$  festgestellt. Dies kann z.B. durch Unvollständigkeit der Daten oder durch Nichteindeutigkeit verursacht werden. Die Indifferenzen bereiten besonders dann Probleme, wenn experimentelle oder numerische Unsicherheiten die Werte von  $\tilde{S}$  beeinflussen. Dadurch wird die Indifferenz durch zufällige Ereignisse zu einem eindeutigen globalen Minimum, das sich meist am Rand des ursprünglich indifferenten Bereiches befindet (s. Abb. 2.2b).

Liegt Unvollständigkeit der Daten vor, so enthält die Zielfunktion keine Information, die zur Festlegung eines Parameters benötigt wird (siehe Abb. 2.3a). Zum Beispiel kann aufgrund eines Zugexperimentes die Querkontraktionszahl nur dann ermittelt werden, wenn zusätzlich zur Längsdehnung auch die Querdehnung gemessen wird. Dagegen kann bei Nichteindeutigkeit, wie z.B. in Abb. 2.3b dargestellt, eine Schar von Lösungen möglich sein, wobei jedoch eine Abhängigkeit von Parametern untereinander vorliegt, d.h. mindestens zwei Parameter verhalten sich indifferent.

Bei der Parameteridentifikation hat MAHNKEN [77, S. 23] mittels Sensitivitätsanalysen oder durch Aufbringen von künstlichem Rauschen auf die Meßwerte einen Einblick in die Robustheit des gefundenen Lösungspunktes gewonnen. Für die gezielte Herstellung der Eindeutigkeit und Vollständigkeit gibt es bislang jedoch kein Konzept.

In der Behandlung von Eindeutigkeits- und Vollständigkeitsproblemen wurde in dieser Arbeit eine systematische Vorgehensweise entwickelt, die sich an der Struktur der

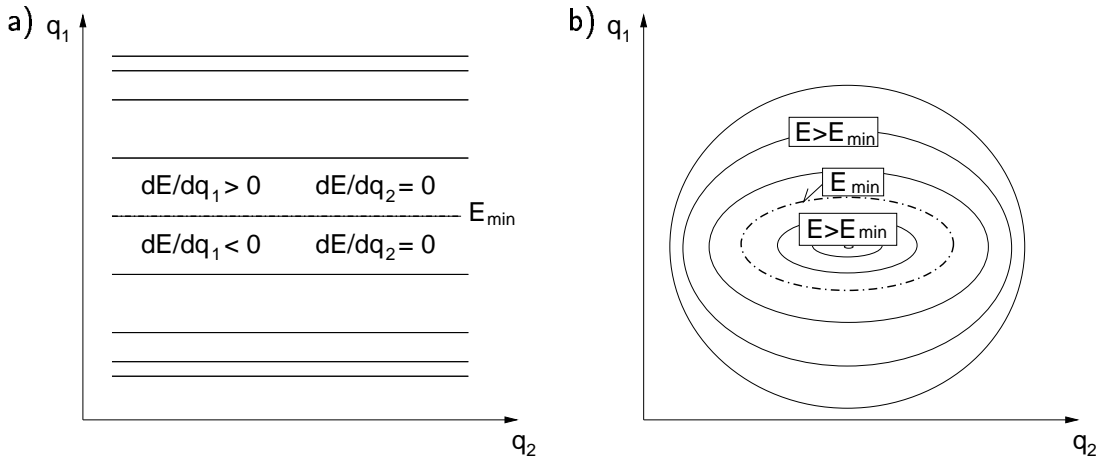


Abbildung 2.3: Mögliche Ursachen für Indifferenz: a) Unvollständigkeit; b) Nichteindeutigkeit.

Differentialgleichungen des konstitutiven Modells orientiert. Dabei werden sowohl der Prozeß  $\mathbf{P}(\tau)$  als auch die Auswahl der charakteristischen Daten  $\mathcal{S}$  gezielt vorgenommen, so daß sowohl die Eindeutigkeit als auch die Vollständigkeit des Problems, soweit möglich, von vornherein gewährleistet werden kann. Hierfür ist jedoch die Vertrautheit mit der Struktur des Materialmodells erforderlich.

### 2.2.1 Deterministische Optimierungsverfahren

Die deterministischen Verfahren sind dadurch gekennzeichnet, daß nach jeder Iteration der Gradient der Zielfunktion  $E$  nach dem Parametervektor  $\mathbf{q}$

$$\mathbf{g}(\mathbf{q}) := \text{grad}E(\mathbf{q}) \quad \text{oder} \quad g_j := \frac{\partial E}{\partial q_j} \quad (2.6)$$

gebildet werden muß. Aus (2.5) und (2.3) folgt direkt

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}} = \sum_{i=1}^{N_i} \left( \tilde{\mathcal{S}}_i - \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}, t_i) \right) \frac{\partial \hat{\mathcal{S}}(\mathbf{q}, t_i)}{\partial \mathbf{q}}, \quad (2.7)$$

d.h. neben der Abweichung zwischen den Meßdaten und der simulierten Systemantwort muß zusätzlich der Gradient der Systemantwort nach dem Parametervektor ermittelt werden.

Hierfür kommen drei Möglichkeiten in Betracht, die anhand eines einfachen Beispiels erläutert werden sollen. Die Systemantwort  $\mathcal{S} := y$  sei gegeben als Lösung der Differentialgleichung

$$\dot{y} = q_1 \dot{x} - q_2 \dot{x}y, \quad y(0) = 0. \quad (2.8)$$

### A) Analytische Bestimmung des Gradienten

Zur analytischen Ermittlung von

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{q}} = \sum_{i=1}^{N_t} (\tilde{y}_i - \hat{y}(\mathbf{q}, x_i)) \frac{\partial \hat{y}(\mathbf{q}, x_i)}{\partial \mathbf{q}} \quad (2.9)$$

wird sowohl die Lösung  $\hat{y}$  in den Punkten  $x_i$ , als auch der Gradient der Funktion  $\hat{y}$  im Punkt  $x_i$  nach dem Parametervektor  $\mathbf{q}$  benötigt. Durch Integration von (2.8) erhält man

$$y = \hat{y}(\mathbf{q}, x) = \frac{q_1}{q_2} (1 - e^{-q_2 x}) . \quad (2.10)$$

Der Gradient von  $y$  nach  $\mathbf{q}$  berechnet sich aus (2.10) zu

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{q_2} (1 - e^{-q_2 x}) \\ \frac{q_1}{q_2} x e^{-q_2 x} - \frac{q_1}{q_2^2} (1 - e^{-q_2 x}) \end{pmatrix} . \quad (2.11)$$

### B) Rekursive Ermittlung während der numerischen Integration

Ist eine analytische Integration nicht durchführbar, so muß die Differentialgleichung numerisch integriert werden. Auf die verschiedenen Integrationsverfahren soll hier nicht eingegangen werden, da sie sich lediglich durch die Wahl der Stützpunkte und der Gewichtung der dort ermittelten Ergebnisse unterscheiden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit soll das Problem (2.8) stellvertretend mittels finiten Vorwärtsdifferenzen integriert werden, womit die Iterationsvorschrift

$$\Delta y = q_1 \Delta x - q_2 \Delta x y_k , \quad y_0 = 0 , \quad \Delta y = y_{k+1} - y_k \quad (2.12)$$

beziehungsweise

$$y_{k+1} = y_k (1 - q_2 \Delta x) + q_1 \Delta x , \quad y_0 = 0 \quad (2.13)$$

folgt. Die rekursive Ermittlungsvorschrift für den Gradienten im Schritt  $k + 1$  ist somit gegeben mit

$$\frac{\partial y_{k+1}}{\partial \mathbf{q}} = \begin{pmatrix} (1 - q_2 \Delta x) \frac{\partial y_k}{\partial q_1} + \Delta x \\ (1 - q_2 \Delta x) \frac{\partial y_k}{\partial q_2} - \Delta x y_k \end{pmatrix} , \quad \frac{\partial y_0}{\partial \mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

unter Verwendung des Gradienten im Schritt  $k$ . Für eine formalisierte Vorgehensweise im Zusammenhang mit der Integration von konstitutiven Gleichungen unter Verwendung der Mittelpunktsregel sei auf die Arbeiten von MAHNKEN und MAHNKEN & STEIN verwiesen [75, 76].

Da die rekursive Ermittlung an die numerische Implementation des Integrationsalgorithmus gebunden ist, ist für deren Verwirklichung ein Eingriff in den betreffenden Quellcode notwendig. Im Fall von Finite Elemente Programmen sind hierfür umfassende Kenntnisse bezüglich Programmstruktur, Variablenmanagement und Implementation des Integrationsverfahrens notwendig. Besteht keine Möglichkeit, in den Integrationsalgorithmus einzugreifen, z.B. bei fest implementierten Standardroutinen, so muß der Gradient nach dem Parametervektor vollständig numerisch bestimmt werden.

Es ist anzumerken, daß die Vorgehensweise zur rekursiven Ermittlung des Gradienten nach den Materialparametern zu zusätzlichen Differentialgleichungen führt, welche das Differentialgleichungssystem unter Umständen sehr steif machen können und somit die Rechenzeit erheblich erhöhen können. Dies wurde z.B. von SCHWERTEL für das Chaboche-Modell bei kleinen Exponenten in den statischen Erholungstermen beobachtet, weswegen die Gradientenermittlung schließlich rein numerisch durchgeführt wurde [98, S. 78-81].

### C) Numerische Ermittlung

Für die vollständige numerische Ermittlung werden sukzessive die einzelnen Parameter um einen kleinen Wert  $d$  variiert und anhand der Veränderung der Systemantwort die Gradienteninformation gebildet. Dies bedeutet bei  $N_q$  Materialparametern, daß  $N_q + 1$  Simulationen benötigt werden, wenn der Gradient nach

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial q_j} \approx \frac{y(q_1, \dots, q_j + d, \dots, q_{N_q}) - y(q_1, \dots, q_j, \dots, q_{N_q})}{d} \quad (2.15)$$

berechnet wird. Der Fehler ist hierbei

$$\delta_j \approx \frac{d}{2} \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial q_j^2}. \quad (2.16)$$

Die Wahl von symmetrischen Stützpunkten um den Ausgangspunkt

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial q_j} \approx \frac{y(q_1, \dots, q_j + d, \dots, q_{N_q}) - y(q_1, \dots, q_j - d, \dots, q_{N_q})}{2d} \quad (2.17)$$

ergibt  $2N_q$  Simulationen, wobei der Fehler erst bei den Gliedern 3. Ordnung beginnt, da sich die Fehler 2. Ordnung aufheben. Für das obige Beispiel (2.8) zeigt ein Vergleich der drei Varianten in Abb. 2.4, daß die mit den in B) und C) beschriebenen Verfahren und die analytisch ermittelten Werte deckungsgleiche Ergebnisse liefern. Bei Betrachtung der verbrauchten Rechenzeit spiegelt sich jedoch der steigende Aufwand in den Verhältnissen

$$\frac{t_{n1}}{t_r} \approx N_q + 1, \quad \frac{t_{n2}}{t_r} \approx 2N_q \quad (2.18)$$

wieder (zu den Bezeichnungen siehe Abb. 2.4).

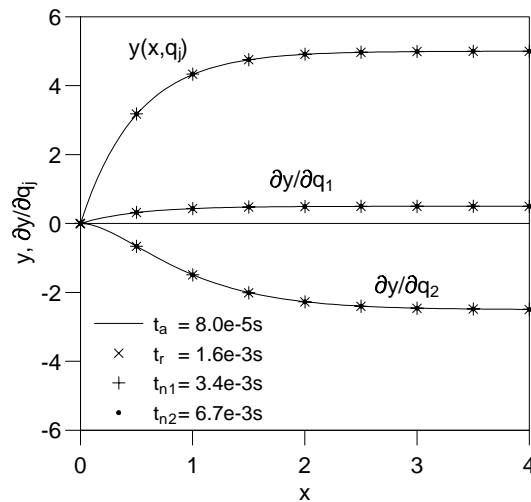


Abbildung 2.4: Vergleich der Methoden zur Bestimmung des Gradienten  $\partial y/\partial q_j$  für  $q_1 = 10$ ,  $q_2 = 2$  (a: analytisch, r: rekursiv, n1: numerisch mit  $(q_j + d, q_j)$ , n2: numerisch mit  $(q_j + d, q_j - d)$ ).

### Gradientenverfahren (GV)

Die einfachste Version der Gradientenverfahren wird auch als Methode des steilsten Abstieges bezeichnet. Mit Kenntnis des Gradienten  $\mathbf{g}$ , definiert in (2.6), wird  $E$  vom aktuellen Punkt  $\mathbf{q}$  ausgehend in entgegengesetzter Richtung des Gradienten (siehe Abbildungen 2.1, 2.5) nach der Vorschrift

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{q}_k - \alpha \mathbf{g}(\mathbf{q}_k) \quad (2.19)$$

verkleinert. Im allgemeinen Fall ist der Gradient entlang des Pfades ins Minimum nicht konstant, so daß viele kleine etwa senkrecht aufeinander stehende Schritte notwendig sind, um ins Minimum zu gelangen (s. auch [13]). Dadurch ist die Konvergenzgeschwindigkeit gering. Zur Abschwächung dieses Verhaltens kann eine Dämpfung in der Form

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{q}_k - \alpha \mathbf{g}(\mathbf{q}_k) + \beta(\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_{k-1}) \quad (2.20)$$

eingeführt werden. Die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  müssen empirisch festgelegt werden, wobei notwendig  $0 \leq \beta < 1$  sein muß, damit das Verfahren konvergieren kann. Für zu große Werte  $\alpha$ ,  $\beta$  können Oszillationen auftreten, während für zu kleine Werte die Konvergenzgeschwindigkeit unbefriedigend ist. Neben dieser einfachen Möglichkeit, eine Verbesserung des Gradientenverfahrens zu erreichen, gibt es noch eine Reihe weiterer Möglichkeiten, wie sie z.B. in [77, S. 20-21] dargestellt sind.

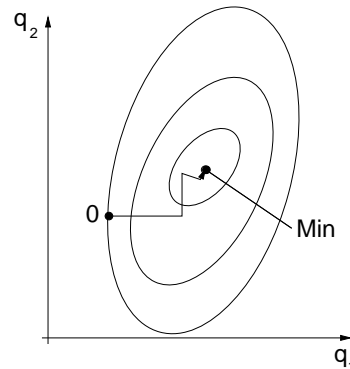


Abbildung 2.5: Skizze der Trajektorie des Gradientenverfahrens ohne Dämpfung im zweidimensionalen Fall.

### Methode der konjugierten Gradienten (CG)

Diese im Vergleich zu herkömmlichen Gradientenverfahren elegante Methode verwendet konjugierte Gradienten, die für eine Fehlerfläche quadratischer Form

$$E(\mathbf{q}) = E(\mathbf{0}) + \mathbf{g}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} + \frac{1}{2} \mathbf{q} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{0}) \mathbf{q} \quad (2.21)$$

exakt ins Minimum führen (s. z.B. [13, 101]). Es wird für die Herleitung ohne Einschränkung der Allgemeinheit angenommen, daß das Minimum sich im Punkt  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  befindet. Dies kann leicht durch eine geeignete Koordinatentransformation des Parameterraumes erreicht werden. Hierbei beschreibt

$$\mathbf{G} = \text{grad}^2 E(\mathbf{q}) = \textit{konst} \quad (2.22)$$

oder

$$G_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} = \textit{konst} \quad (2.23)$$

die Krümmung im Minimum und wird auch als Hesse-Matrix bezeichnet. Ferner gilt, daß  $\mathbf{g}(\mathbf{0})$  der Gradient in  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  ist. Der Begriff *konjugiert* kann unter Verwendung der Skizze in Abb. 2.6 folgendermaßen motiviert werden.

Entlang der Richtung  $\mathbf{d}_0$  ergibt sich ein Minimum für  $E$  im Punkt  $\mathbf{q}_1$ . Der Gradient  $\mathbf{g}_1$  im Punkt  $\mathbf{q}_1$

$$\mathbf{g}_1 := \mathbf{g}(\mathbf{q}_1) = \mathbf{g}(\mathbf{0}) + \mathbf{G}\mathbf{q}_1 \quad (2.24)$$

ist senkrecht zu  $\mathbf{d}_0$ , womit das Skalarprodukt verschwindet:

$$\mathbf{d}_0 \cdot (\mathbf{g}(\mathbf{0}) + \mathbf{G}\mathbf{q}_1) = 0. \quad (2.25)$$

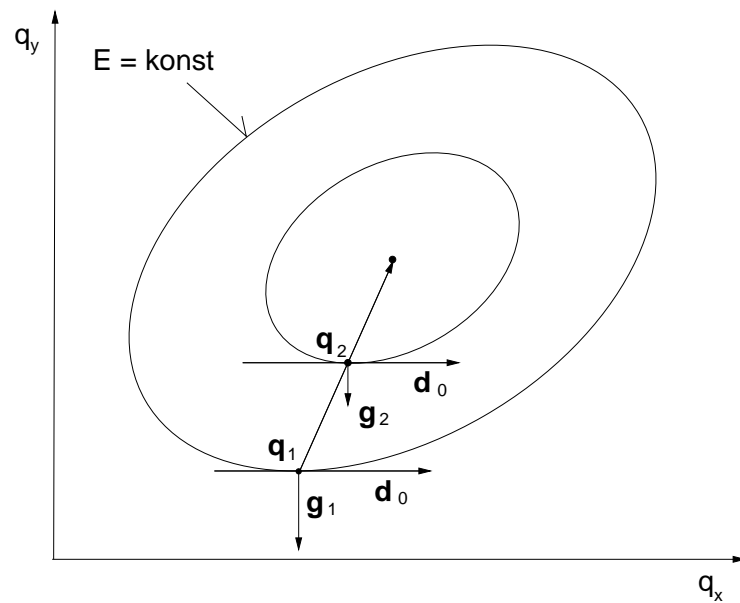


Abbildung 2.6: Skizze zur konjugierten Suchrichtung; die Komponenten von  $\mathbf{q}$  seien  $q_x$  und  $q_y$ .

Analog gilt für den Punkt  $\mathbf{q}_2$

$$\mathbf{d}_0 \cdot (\mathbf{g}(\mathbf{0}) + \mathbf{G}\mathbf{q}_2) = 0. \quad (2.26)$$

Die Subtraktion beider Gleichungen liefert

$$\mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{G}(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) = 0. \quad (2.27)$$

Die Richtung  $(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)$ , die direkt in das Minimum führt, wird als *konjugiert* zu der Richtung  $\mathbf{d}_0$  bezeichnet.

Für zwei Punkte  $\mathbf{q}_1$  und  $\mathbf{q}_2$  sowie die Gradienten in diesen Punkten können die Differenzen

$$\Delta\mathbf{q} = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1, \quad (2.28)$$

$$\Delta\mathbf{g} = \mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1 \quad (2.29)$$

angegeben werden. Für die quadratische Fehlerfläche folgt

$$\Delta\mathbf{g} = (\mathbf{g}(\mathbf{0}) + \mathbf{G}\mathbf{q}_2) - (\mathbf{g}(\mathbf{0}) + \mathbf{G}\mathbf{q}_1) = \mathbf{G}\Delta\mathbf{q}. \quad (2.30)$$

Ein Vektor  $\mathbf{d}_0$ , der senkrecht zu  $\Delta\mathbf{g}$  ist, wäre wegen (2.27) konjugiert zu  $\Delta\mathbf{q}$ , da aufgrund von (2.30)

$$\mathbf{d}_0 \cdot \Delta\mathbf{g} = \mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{G}\Delta\mathbf{q} = 0 \quad (2.31)$$

gilt. Gleichung (2.31) legt eine Methode zur Ermittlung konjugierter Richtungen ohne die Kenntnis von  $\mathbf{G}$  nahe, deren Schritte im folgenden beschrieben werden.

Mit der Methode der konjugierten Gradienten werden sukzessiv eindimensionale Minimierungen entlang einer konjugierten Richtung vorgenommen, wobei diese Richtung nach jeder Iteration neu bestimmt wird (siehe Abb. 2.7).

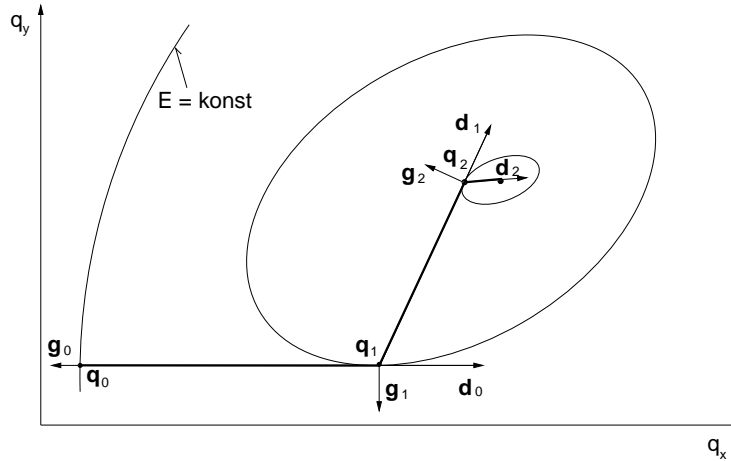


Abbildung 2.7: Skizze der ersten Iterationsschritte der Methode konjugierter Gradienten für eine nichtquadratische Fehlerfläche.

Die erste Richtung ist  $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$ , dem steilsten Abstiegvektor an der Stelle  $\mathbf{q}_0$ . Das Minimum entlang dieser Richtung sei an der Stelle  $\mathbf{q}_1$ , gegeben mit

$$\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 - \gamma_0 \mathbf{g}_0 = \mathbf{q}_0 + \gamma_0 \mathbf{d}_0 . \quad (2.32)$$

Der Gradient in  $\mathbf{q}_1$  sei  $\mathbf{g}_1$ . Die nächste Suchrichtung  $\mathbf{d}_1$  soll konjugiert zu  $\mathbf{d}_0$  sein, wobei diese gemäß den Abbildungen 2.6, 2.7 zwischen der alten Richtung  $\mathbf{d}_0$  und der Richtung des steilsten Abstiegs  $-\mathbf{g}_1$  im Punkt  $\mathbf{q}_1$  liegen muß. Sie kann daher als Linearkombination der bisher bekannten Richtungen angenommen werden:

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \alpha \mathbf{d}_0 . \quad (2.33)$$

Die Bedingung der Konjugiertheit (2.27) in Bezug auf (2.32) ist

$$\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{G} \mathbf{d}_0 = \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{G} (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0) = 0 . \quad (2.34)$$

Mit (2.33) folgt

$$(-\mathbf{g}_1 + \alpha \mathbf{d}_0) \cdot \mathbf{G} (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_0) = 0 \quad (2.35)$$



und unter Verwendung von (2.30) ergibt sich schließlich

$$(-\mathbf{g}_1 + \alpha \mathbf{d}_0) \cdot (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0) = 0. \quad (2.36)$$

Da  $\mathbf{q}_1$  das Minimum entlang  $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$  darstellt, ist die Richtung  $\mathbf{g}_0$  orthogonal zum Gradienten  $\mathbf{g}_1$  in  $\mathbf{q}_1$ , so daß die Skalarprodukte  $\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{g}_0$  und  $\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{d}_0$  verschwinden. Somit ergibt sich durch Auflösen nach  $\alpha$  die Beziehung

$$\alpha = \frac{\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{g}_1}{\mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{g}_0}. \quad (2.37)$$

Nach (2.33) und (2.37) folgt die neue konjugierte Richtung mit

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \frac{\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{g}_1}{\mathbf{g}_0 \cdot \mathbf{g}_0} \mathbf{d}_0. \quad (2.38)$$

Dies kann für alle folgenden Iterationen durch die Gleichung

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \frac{\mathbf{g}_k \cdot \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1} \cdot \mathbf{g}_{k-1}} \mathbf{d}_{k-1} \quad (2.39)$$

verallgemeinert werden. Ein Iterationsschritt entspricht somit der Suche des Minimums entlang dieser Richtung in Form eines geeigneten  $\gamma_k$ , so daß

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{q}_k + \gamma_k \mathbf{d}_k : E(\mathbf{q}_{k+1}(\gamma_k)) \rightarrow \min. \quad (2.40)$$

## 2.2.2 Stochastische Optimierungsverfahren

Bei stochastischen Optimierungsverfahren wird der Parameterraum in der Regel mit einer Menge von Parametervektoren nach der Lage des Minimums durchsucht, deren Komponenten sich nach statistischen Gesetzmäßigkeiten verändern können. Jeder einzelne Parametervektor wird hierbei als *Individuum* bezeichnet. Die Güte eines jeden Individuums wird mittels einer geeigneten Zielfunktion  $E$ , z.B. in der Form von (2.5), beurteilt. Eine *Population* wird somit als eine Menge  $\mathcal{P}$  von  $I_{\mathcal{P}}$  Parametervektoren  $\mathbf{q}_p$  definiert, wobei jeder Parametervektor  $\mathbf{q}_p$  ein Individuum dieser Population darstellt. Ähnlich wie bei den deterministischen Optimierungsverfahren bestehen auch hier große Freiheiten in der Gestaltung des Optimierungsalgorithmus, wodurch eine Fülle von Vorschlägen in der Literatur existieren. Stellvertretend werden im folgenden zwei ausgewählte Verfahren vorgestellt, die sich deutlich voneinander unterscheiden.

## Evolutionstrategie (ES)

Bei diesem auf SCHWEFEL [97] zurückgehenden Verfahren werden aus einer gegebenen Population neue Parametersätze ähnlich wie bei der biologischen Evolution nach den Regeln der Kreuzung und Mutation erzeugt. Zur Bildung der Startpopulation können die Komponenten aller Individuen zufällig im mutmaßlichen Bereich belegt werden. Es besteht aber auch die Möglichkeit, die Population ausgehend von einem sinnvollen Startparametersatz zu erzeugen, wobei z.B. um den Startpunkt komponentenweise normalverteilte Zufallszahlen verwendet werden. Es ist in diesem Fall zu beachten, daß die Wahl des Startpunktes bei nichteindeutigen Problemen das Endergebnis festlegen kann.

Jedem Individuum des aktuellen Iterationsschritts wird eine Überlebenswahrscheinlichkeit (für das folgende z.B.  $f(p) = 0.6^p$ ) zugeordnet, wobei die Überlebenswahrscheinlichkeit für das Individuum mit der größten Güte ( $p=1$ ) am höchsten ist. Um sich zur Auffindung des Minimums im Parameterraum zu bewegen, werden aus den Exemplaren höchster Überlebenswahrscheinlichkeit neue Individuen, sogenannte *Nachkommen*, erzeugt. Die Population wird erneuert, indem eine gewisse Anzahl  $I_N$  der Individuen geringer Überlebenswahrscheinlichkeit durch die Nachkommen derjenigen Individuen mit hoher Überlebenswahrscheinlichkeit (der *Eltern*) ersetzt wird. Auf diese Weise wird die Größe  $I_P$  der Population konstant gehalten.

Bei der Kreuzung wird aus zwei entsprechend den Überlebenswahrscheinlichkeiten zufällig ausgewählten Eltern

$$\mathbf{q}_a = (q_{a1}, q_{a2}, q_{a3}, q_{a4}, \dots), \quad (2.41)$$

$$\mathbf{q}_b = (q_{b1}, q_{b2}, q_{b3}, q_{b4}, \dots), \quad (2.42)$$

ein Nachkomme erzeugt. Der hierfür zu definierende *Kreuzungsoperator*  $\mathbf{X}[\mathbf{q}_a, \mathbf{q}_b]$  erzeugt einen neuen Nachkommen durch zufällige Wahl jeder Komponente aus den beiden Elternteilen  $\mathbf{q}_a$  und  $\mathbf{q}_b$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit, z.B.

$$\mathbf{q}_{ab,X} = \mathbf{X}[\mathbf{q}_a, \mathbf{q}_b] \stackrel{\text{z.B.}}{=} (q_{a1}, q_{b2}, q_{a3}, q_{a4}, q_{b5}, \dots). \quad (2.43)$$

Bei der Mutation wird aus einem einzigen Eltern-Parametersatz ein Nachkomme erzeugt, was einer ungeschlechtlichen Vermehrung (z.B. Zellteilung bei Bakterien) entspricht. Die Veränderung des Erbgutes in der Natur erfolgt dabei infolge zufälliger äußerer Einfüsse. Dies geschieht meist in einer chemisch aktiven Umgebung (kanzerogene Stoffe, Viren) oder durch Strahlung. Der zu definierende *Mutationsoperator* wird somit alleine auf ein

Individuum  $\mathbf{q}_a$  angewendet, wobei zufällig eine oder mehrere Komponenten verändert werden. Es wird unterschieden zwischen Addition einer Zufallszahl  $\mathbf{M}_+[\cdot]$

$$\mathbf{q}_{a,M_+} = \mathbf{M}_+[\mathbf{q}_a] \stackrel{\text{z.B.}}{=} (q_{a1}, q_{a2} + R_1, q_{a3}, q_{a4}, \dots) \quad (2.44)$$

und Ersetzen mit einer Zufallszahl  $\mathbf{M}_r[\cdot]$

$$\mathbf{q}_{a,M_r} = \mathbf{M}_r[\mathbf{q}_a] \stackrel{\text{z.B.}}{=} (q_{a1}, q_{a2}, q_{a3}, R_2, \dots), \quad (2.45)$$

wobei  $R_1$  und  $R_2$  Zufallszahlen der selben Verteilung sind.

Bei den im folgenden beschriebenen Beispielen wurde mit einer Population von  $I_P = 20$  Individuen gearbeitet, wobei  $I_N = 15$  neue Nachkommen gebildet wurden. Die fünf Eltern wurden nach der Bildung von 14 Nachkommen durch Kreuzung der Mutation unterzogen. Schließlich wurde in jedem Iterationsschritt zusätzlich ein Nachkomme völlig neu ohne Berücksichtigung der Eltern zufällig erzeugt, was es erleichtert, aus lokalen Minima herauszuspringen.

### Schwarmsuche (SS)

Wie die Evolutionsstrategie ist diese Methode der Natur nachempfunden (siehe [101]). Das Prinzip gleicht der Suche eines Bienenschwarms nach einer Wiese mit vielen Honigblüten. Dabei nutzen die Bienen den süßen Geruch als Maß für die Nähe zum Honig. Zunächst schwärmen alle Bienen in zufällige Richtungen aus. Nachdem sie eine gewisse Distanz geflogen sind, kehren sie zum Ausgangspunkt zurück. Der gesammelte Schwarm folgt der Biene, die dem Honig am nächsten gekommen ist, bis zu deren ursprünglichen Zielpunkt. Von dort aus schwärmen wiederum alle in zufällige Richtungen aus. Der Prozeß wiederholt sich, bis der Schwarm an der Honigwiese angekommen ist. Es ist zu beachten, daß die Flugweite mit der Anzahl der Iterationen abnehmen muß, damit die Bienen das Ziel mit einer möglichst geringen Iterationszahl finden können.

Für die numerische Realisierung wird von einer Anfangsdistanz  $l = l_0 < 1$  ausgegangen, wobei die Population durch Addition von Zufallsvektoren  $\mathbf{r}$ ,  $r_i \in [-l, l]$  zum Startpunkt gebildet wird:

$$\mathbf{q}_{(k+1)} = \mathbf{q}_{(k)} + \mathbf{r}. \quad (2.46)$$

Zu diesem Zweck müssen alle Komponenten  $q_i$  von ihrem mutmaßlichen Wertebereich auf einen Bereich zwischen -1 und 1 abgebildet werden. Für alle Individuen wird der Wert von  $E$  ermittelt. Ausgehend von demjenigen mit dem kleinsten Fehler werden

erneut alle anderen Mitglieder der Population nach obiger Vorschrift erzeugt. Hierbei wird die Intervallgröße der Zufallszahlen durch die rekursive Vorschrift

$$l_{(k+1)} = l_{(k)}^{k-1} \quad (2.47)$$

reduziert.

### 2.2.3 Vergleich der Optimierungsverfahren

Zum Vergleich der vorgestellten Optimierungsverfahren anhand eines konkreten Beispiels wird die Funktion

$$\mathcal{S}(\mathbf{q}, t) = e^{-q_1 t} + e^{-q_2 t} \quad (2.48)$$

betrachtet. Die gemessene Systemantwort sei  $\tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{q}, t)$  welcher ein Parametervektor  $\mathbf{q} = (0.4, 0.5)^T$  zugrundeliegt. Ausgehend von dem Startvektor  $\mathbf{q}_0 = (0.2, 0.6)^T$  soll der korrekte Parametervektor durch Anpassen des Kurvenverlaufs mit den Optimierungsverfahren bestimmt werden (s. Abb. 2.8a). Die mit Kreisen markierte Kurve in Abb. 2.8a zeigt den Verlauf, der dem Startvektor  $\mathbf{q}_0$  entspricht und von dem anzupassenden Verlauf, durch Quadrate markiert, abweicht.

Anhand des Vergleichs der verschiedenen Verfahren in Abb. 2.8 b wird deutlich, daß die Methode der konjugierten Gradienten (CG) und die Schwarmssuche (SS) nahezu direkt ins Minimum führen. Das Gradientenverfahren (GV) zeigt eine deutliche Abhängigkeit vom Dämpfungsparameter (vgl. Abb. 2.9), der jedoch empirisch zu wählen ist. Grundsätzlich zeigt das Gradientenverfahren eine geringere Geschwindigkeit, insbesondere bei Annäherung an das Minimum. Die Evolutionsstrategie (ES) zeigt bei dem betrachteten Beispiel die geringste Konvergenzgeschwindigkeit.

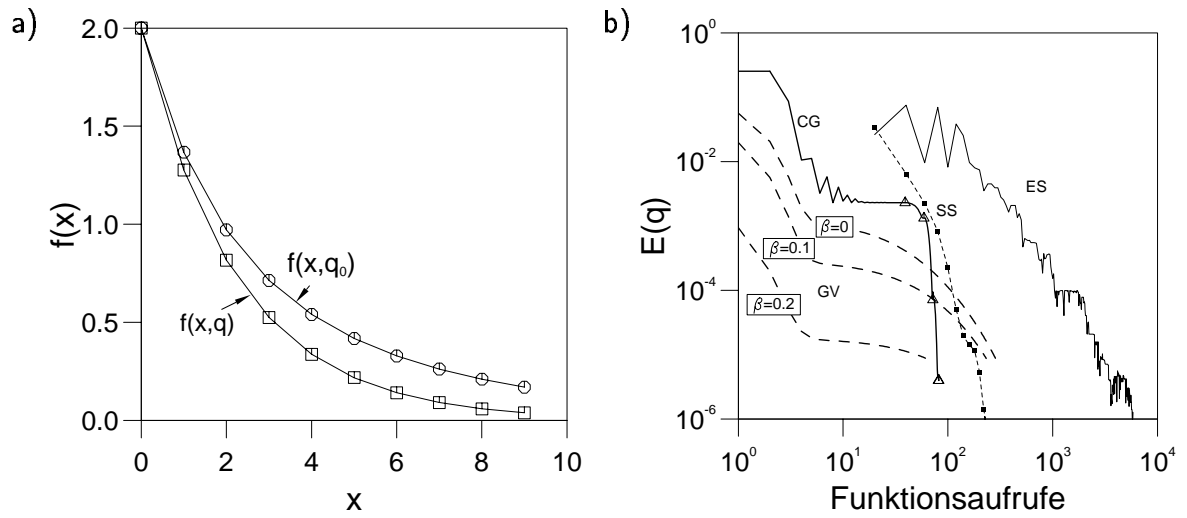


Abbildung 2.8: Vergleich der Optimierungsverfahren anhand der Funktion (2.48): a) Verlauf von  $S(q, t)$ ; b) Verlauf der Zielfunktion (2.5) über der Zahl der Funktionsaufrufe.

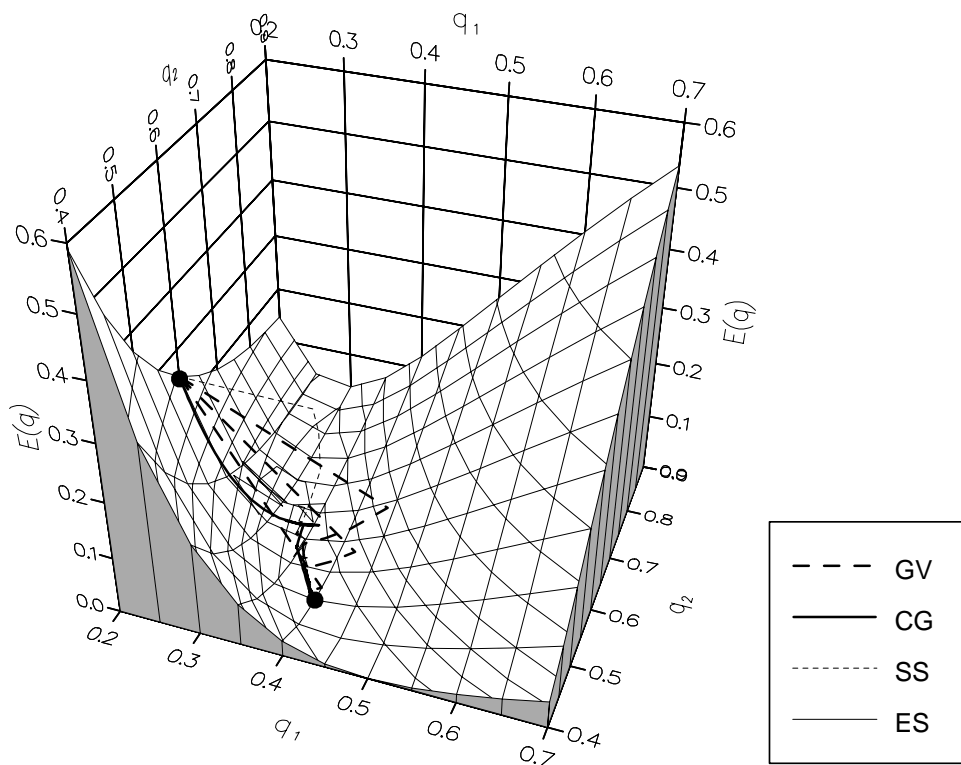


Abbildung 2.9: Trajektorie der verschiedenen Methoden im Parameterraum.

## 2.3 Neuronale Netze

Die künstlichen Neuronale Netze werden in der Literatur oft auch ANN (*Artificial Neural Networks*) genannt und sind aus den Beobachtungen der Vorgänge in und zwischen biologischen Nervenzellen (Neuronen) abgeleitet. Es existieren eine Vielzahl von verschiedenen Modellen für die verschiedensten Anwendungsgebiete.

Die ANN, die in der Regel zum Erlernen kontinuierlicher Zusammenhänge verwendet werden, heißen Feedforward-Netze und verwenden stetig differenzierbare Aktivierungsfunktionen. Auf deren Bedeutung wird im nächsten Abschnitt näher eingegangen. Im folgenden werden ausschließlich diese Art von Neuronale Netze verwendet.

Ein Neuronales Netz kann als ein flexibler Operator  $\mathcal{N}[\cdot]$  aufgefaßt werden, der einen Vektor  $\mathbf{x}$  der Dimension  $I$  auf einen Vektor  $\mathbf{y}$  der Dimension  $L$  abbildet. Die Festlegung der Abbildungsvorschrift erfolgt durch die Anpassung der im Neuronale Netz enthaltenen Parameter an eine endliche Zahl von Beispielen mittels eines Optimierungsverfahrens. Diesen Vorgang nennt man *Lernprozeß* oder auch das *Training* des Neuronale Netzes. Es ist zu berücksichtigen, daß das so definierte Neuronale Netz nur innerhalb des durch die Beispiele gegebenen Raumes gültig ist und sich für eine Extrapolation über dieses Gebiet hinaus nicht unbedingt eignet.

### 2.3.1 Mathematische Formulierung

Abbildung 2.10 zeigt das mathematische Modell eines Neurons, angelehnt an die Abläufe in einer Nervenzelle (siehe z.B. [39, S. 1 ff.]).

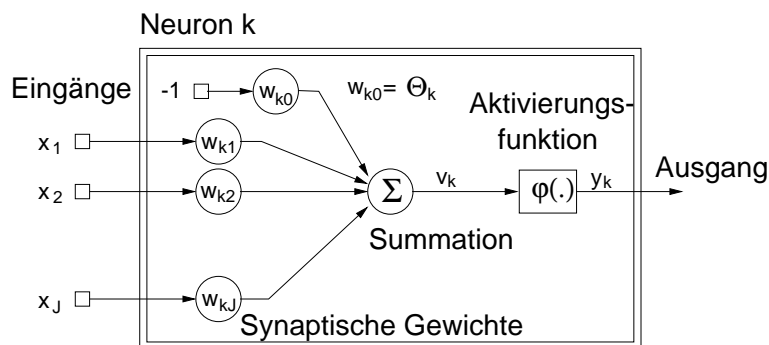


Abbildung 2.10: Skizze des Modellneurons.

Die Informationen  $x_j$ , die dem betrachteten Neuron von vorgelagerten Neuronen über Synapsen zugeführt werden, werden über *synaptische Gewichte*  $w_{kj}$  multipliziert und intern in der *Aktivierung*  $v_k$  aufsummiert. So können Informationen hemmend ( $w_{kj} < 0$ )

oder anregend ( $w_{kj} > 0$ ) auf das Verhalten des Neurons wirken. Die Aktivierung des Neurons wird über die nichtlineare *Aktivierungsfunktion*  $\varphi(\cdot)$  auf den Ausgang des Neurons  $y_k$  abgebildet. Ein Schwellwert  $\Theta_k$ , der ebenfalls intern in jedem Neuron vorhanden ist, entscheidet, ob die eingegangene Aktivierung ausreichend ist, um am Ausgang einen Wert  $y_k > 0$  an die nachfolgenden Neuronen abzugeben. In der Biologie spricht man in diesem Zusammenhang vom *Feuern* des Neurons, das nur dann erfolgt, wenn das angesammelte Potential aus den Dendriten einen Schwellwert überschreitet. Bei der Programmierung wird der Schwellwert  $\Theta_k$  oft wie ein synaptisches Gewicht  $w_{k0}$  mit einem fiktiven, fest zugeordneten Eingabewert  $x_0 := -1$  behandelt, was eine elegantere Formulierung des Trainingsalgorithmus erlaubt.

Für das Neuron  $k$  gelten somit die Gleichungen:

$$w_{k0} := \Theta_k, \quad x_0 := -1, \quad (2.49)$$

$$v_k = \sum_{j=0}^J w_{kj} x_j, \quad (2.50)$$

$$y_k = \varphi(v_k). \quad (2.51)$$

Einige Beispiele möglicher Aktivierungsfunktionen zeigt Abb. 2.11.

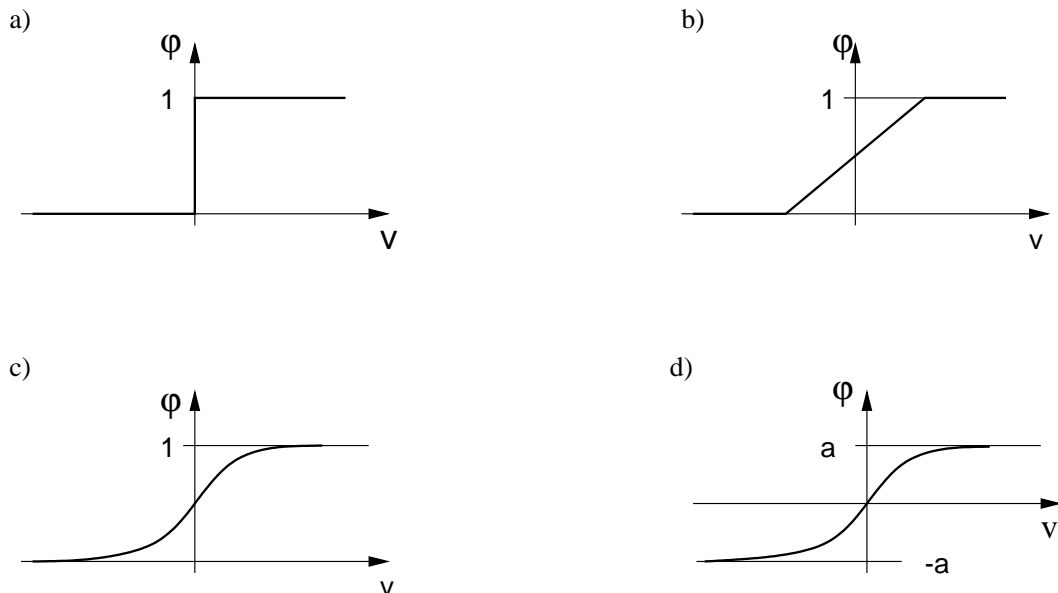


Abbildung 2.11: Beispiele gebräuchlicher Aktivierungsfunktionen: a) Sprungfunktion; b) Rampenfunktion; c) Sigmoidalfunktion; d) Tangenshyperbolikus.

Die Neuronen lassen sich in beliebig vielen *Schichten* (Layer) mit einer frei wählbaren Neuronenzahl je Schicht in einem Neuronales Netz kombinieren. Grundsätzlich besteht ein solches Neuronales Netz jedoch aus einer *Eingabeschicht* (Input-Layer) und einer *Ausgabeschicht* (Output-Layer). Dazwischen können zusätzlich *verdeckte Schichten* (Hidden-Layer) angeordnet sein. Die *Eingabeneuronen* (Input-Neuronen) haben die Aufgabe, die Eingangsdaten auf die Neuronen der zweiten Schicht zu verteilen. Die *Ausgabeneuronen* (Output-Neuronen) liefern das Ergebnis in Form der Ausgabedaten. In Abb. 2.12 ist ein Neuronales Netz mit vier Schichten dargestellt.

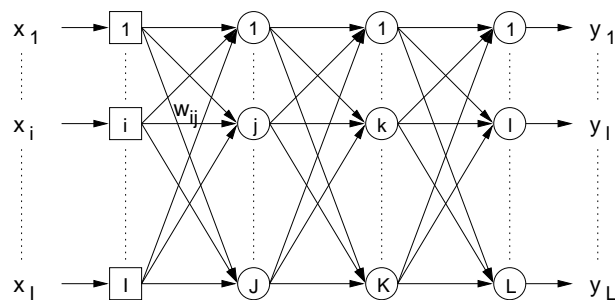


Abbildung 2.12: Darstellung eines Feedforward-Netztes am Beispiel von 4 Schichten.

Die Berechnung des Ergebnisses wird in diesem Zusammenhang als *Feedforward*-Schritt bezeichnet, da die Information von links nach rechts durch die Schichten wandert. Für ein solches Neuronales Netz ergeben sich die Gleichungen

$$y_i^{(0)} = x_i, \quad (2.52)$$

$$\left. \begin{aligned} v_k^{(n)} &= \sum_{j=0}^J w_{kj}^{(n)} y_j^{(n-1)} \\ y_k^{(n)} &= \varphi(v_k^{(n)}) \end{aligned} \right\} n = 1..N, \quad N = \text{Anzahl der Schichten} \quad (2.53)$$

zur Berechnung des *Feedforward*-Schritts. Dabei bezeichnet  $(\cdot)^{(n)}$  die Nummer der Schicht. Die Komplexität der darstellbaren Funktion ist abhängig von der Zahl der Neuronen und Schichten, die bei Identifikationsaufgaben grundsätzlich klein gehalten werden sollte, um glatte und oszillationsfreie Verläufe zu erzielen.

### 2.3.2 Trainingsalgorithmen

Die synaptischen Gewichte  $w_{kj}$  bilden die Freiheitsgrade, mit denen das Neuronale Netz an einen Zusammenhang  $\mathbf{y}(\mathbf{x})$  angepaßt werden kann. Die Angaben über den vorliegenden Zusammenhang werden dabei in Form von Mustern geliefert. Ein *Muster* ist ein



Paar von Vektoren, bestehend aus dem Eingabevektor  $\mathbf{x}$  und dem zugehörigen korrekten Ausgabevektor  $\mathbf{d}$ , der als bekannt vorausgesetzt wird.

Der Lernprozeß besteht in der geeigneten Veränderung der zu Anfang zufällig belegten synaptischen Gewichte, so daß der Unterschied des vom Neuronalen Netz bestimmten Ausgabevektors  $\mathbf{y}^{(N)}$  bezüglich des gewünschten Ausgabevektors  $\mathbf{d}$  möglichst klein wird. Zur Minimierung von  $\|\mathbf{d} - \mathbf{y}^{(N)}\|$  kann prinzipiell jedes in Abschnitt 2.2 beschriebene Optimierungsverfahren verwendet werden. Für die Neuronalen Netze wurden jedoch wegen der großen Anzahl zu optimierender Parameter von oft mehreren hundert synaptischen Gewichten speziell angepaßte Optimierungsmethoden entwickelt. Zwei dieser Verfahren sollen im folgenden erläutert werden, wobei das zweite vorgestellte Verfahren mit der Bezeichnung *Rprop* für das Training der Neuronalen Netze in dieser Arbeit verwendet wurde.

### Standard Backpropagation

Das Standard Backpropagation Verfahren orientiert sich am konventionellen Gradientenverfahren, wobei jedoch der Gradient im Fall einer stetig differenzierbaren Aktivierungsfunktion analytisch zu berechnen ist. Für die Ermittlung des Gradienten bezüglich der synaptischen Gewichte der Ausgabeschicht gelten die Zusammenhänge

$$E = \frac{1}{2} \sum_i e_i^2, \quad (2.54)$$

$$e_i = d_i - y_i^{(N)}, \quad (2.55)$$

$$y_i^{(N)} = \varphi(v_i^{(N)}), \quad (2.56)$$

$$v_i^{(N)} = \sum_k w_{ik}^{(N)} y_k^{(N-1)}. \quad (2.57)$$

Diese Gleichungen bilden eine verschachtelte Funktion, die sich unter Verwendung der Einsteinschen Summationskonvention in der Form

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \left( d_i - y_i^{(N)} \left( w_{ik}^{(N)} y_k^{(N-1)} \left( w_{kj}^{(N-1)} y_j^{(N-2)} (\dots) \right) \right) \right)^2 \quad (2.58)$$

darstellen läßt. Somit gilt für den Gradienten nach einem synaptischen Gewicht in der Ausgabeschicht

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{ik}^{(N)}} &= \frac{\partial E}{\partial e_i} \frac{\partial e_i}{\partial y_i^{(N)}} \frac{\partial y_i^{(N)}}{\partial v_i^{(N)}} \frac{\partial v_i^{(N)}}{\partial w_{ik}^{(N)}} \\ &= e_i \cdot (-1) \cdot \varphi'(v_i^{(N)}) \cdot y_k^{(N-1)} \\ &= \delta_i^{(N)} y_k^{(N-1)}, \end{aligned}$$

mit

$$\delta_l^{(N)} := \frac{\partial E}{\partial v_l^{(N)}} = -e_l \varphi' (v_l^{(N)}) . \quad (2.59)$$

Die Größe  $\delta_l^{(N)}$  wird als *lokaler Gradient* des Neurons  $l$  in der Schicht  $N$  bezeichnet.

Für die davorliegende verdeckte Schicht gelten zusätzlich:

$$y_k^{(N-1)} = \varphi(v_k^{(N-1)}) , \quad (2.60)$$

$$v_k^{(N-1)} = \sum_j w_{kj}^{(N-1)} y_j^{(N-2)} . \quad (2.61)$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{kj}^{(N-1)}} &= \sum_l e_l \frac{\partial e_l}{\partial y_l^{(N)}} \frac{\partial y_l^{(N)}}{\partial v_l^{(N)}} \frac{\partial v_l^{(N)}}{\partial y_k^{(N-1)}} \frac{\partial y_k^{(N-1)}}{\partial v_k^{(N-1)}} \frac{\partial v_k^{(N-1)}}{\partial w_{kj}^{(N-1)}} \\ &= \sum_l e_l \cdot (-1) \cdot \varphi' (v_l^{(N)}) \cdot w_{lk}^{(N)} \cdot \varphi' (v_k^{(N-1)}) \cdot y_j^{(N-2)} \\ &= \delta_k^{(N-1)} y_j^{(N-2)} \end{aligned}$$

mit

$$\delta_k^{(N-1)} := \frac{\partial E}{\partial v_k^{(N-1)}} = \varphi' (v_k^{(N-1)}) \sum_l \delta_l^{(N)} w_{lk}^{(N)} . \quad (2.62)$$

Es kann gezeigt werden, daß für alle der Ausgangsschicht vorgelagerten Schichten

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(n)}} = \delta_j^{(n)} y_i^{(n-1)} \quad (2.63)$$

mit  $n < N$  und

$$\delta_j^{(n)} := \frac{\partial E}{\partial v_j^{(n)}} = \varphi' (v_j^{(n)}) \sum_k \delta_k^{(n+1)} w_{kj}^{(n+1)} \quad (2.64)$$

gilt.

Für den Spezialfall einer sigmoidalen Aktivierungsfunktion

$$y = \varphi(v) = \frac{1}{1 + e^{-v}} , \quad -\infty < v < \infty \quad (2.65)$$

folgt für die Ableitung  $\varphi'(v)$  wegen

$$1 + e^{-v} = \frac{1}{y} , \quad e^{-v} = \frac{1-y}{y} \quad (2.66)$$

die Beziehung der Ableitung zu dem Funktionswert selbst:

$$\begin{aligned}\varphi'(v) &= \frac{dy}{dv} = \frac{e^{-v}}{(1 + e^{-v})^2} = \frac{1-y}{y} \\ &= y(1-y).\end{aligned}$$

Eingesetzt in (2.63) und (2.64) ergibt sich für die sigmoidale Aktivierungsfunktion der Gradient des Fehlers nach den synaptischen Gewichten zu

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{(n)}} = \delta_j^{(n)} y_i^{(n-1)} \quad (2.67)$$

mit

$$\delta_j^{(n)} := \frac{\partial E}{\partial v_j^{(n)}} = y_j^{(n)} (1 - y_j^{(n)}) \sum_k \delta_k^{(n+1)} w_{kj}^{(n+1)}. \quad (2.68)$$

Zur Ermittlung des Gradienten werden somit lediglich die aktuellen Ausgabegrößen aller Neuronen benötigt. Auf diese Weise wird der Rechenaufwand für einen Backpropagation-Schritt auf einen Feedforward-Schritt reduziert.

Die Veränderung der Gewichte im Iterationsschritt  $t$  erfolgt analog zum Gradientenverfahren nach

$${}^{(t+1)}w_{ji}^{(n)} = {}^t w_{ji}^{(n)} + {}^t \Delta w_{ji}^{(n)} \quad (2.69)$$

mit

$${}^t \Delta w_{ji}^{(n)} = -\alpha {}^t \delta_j^{(n)} {}^t y_i^{(n-1)} + \beta {}^{(t-1)} \Delta w_{ji}^{(n)}. \quad (2.70)$$

Hierbei bezeichnen die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  die Lernrate bzw. die Dämpfung ( $0 < \beta < 1$ ). Dieses *Pattern by Pattern*-Verfahren erfolgt nach der Auswertung jedes einzelnen Musters, weswegen die Veränderung  ${}^t \Delta w_{ji}^{(n)}$  nur gering sein darf ( $\alpha$  muß klein sein). Ansonsten würde die bereits in den Gewichten gespeicherte Information der vorangegangenen Muster zerstört. Um das Auftreten von periodischem Erlernen und Vergessen zu vermeiden, müssen zusätzlich nach jeder Epoche die Muster zufällig neu angeordnet werden. Die Dauer einer *Epoche* definiert die Anzahl an Feedforward-Schritten, bei der alle verfügbaren Muster einmal verwendet wurden.

## Lernratenadaption

Zur Erhöhung der Lerngeschwindigkeit ist es sinnvoll, jedem synaptischen Gewicht seine individuelle Lernrate zuzuweisen, die während des Lernprozesses automatisch angepaßt werden kann. Das bedeutet, daß anstelle einer globalen Lernrate  $\alpha$  eine dem synaptischen Gewicht  $w_{kj}^{(n)}$  zugeordnete Lernrate  $\alpha_{kj}^{(n)}$  tritt, welche in jedem Iterationsschritt unabhängig von den Lernraten der anderen Gewichte vergrößert oder verkleinert werden kann. Zu diesem Zweck muß der Gradient des Fehlers bezüglich jeder Lernrate bestimmt werden.

Für das Folgende wird von einem ungedämpften Gradientenverfahren ausgegangen ( $\beta = 0$ ), womit der Fehler im Iterationsschritt  $t$  gemäß (2.58) mit

$${}^t E = \frac{1}{2} \sum_l \left( d_l - {}^t y_l^{(N)} \left( {}^t w_{lk}^{(N)} {}^t y_k^{(N-1)} \left( {}^t w_{kj}^{(N-1)} {}^t y_j^{(N-2)} (\dots) \right) \right) \right)^2 \quad (2.71)$$

und die darin vorkommenden synaptischen Gewichte durch

$${}^t w_{kj}^{(n)}(t) = {}^{(t-1)} w_{kj}^{(n)} - {}^t \alpha_{kj}^{(n)} \frac{\partial {}^{(t-1)} E}{\partial {}^{(t-1)} w_{kj}^{(n)}} \quad (2.72)$$

gegeben sind. Der Gradient nach der Lernrate ergibt sich durch Anwenden der Kettenregel

$$\frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t \alpha_{kj}^{(n)}} = \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{kj}^{(n)}} \frac{\partial {}^t w_{kj}^{(n)}}{\partial {}^t \alpha_{kj}^{(n)}}. \quad (2.73)$$

Daraus folgt direkt der Gradient nach der Lernrate

$$\frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t \alpha_{kj}^{(n)}} = - \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{kj}^{(n)}} \frac{\partial {}^{(t-1)} E}{\partial {}^{(t-1)} w_{kj}^{(n)}}, \quad (2.74)$$

der für alle Schichten gültig ist. Würde nun analog zum Gradientenverfahren die Lernrate nach

$$\begin{aligned} {}^{(t+1)} \alpha_{kj}^{(n)} &= {}^t \alpha_{kj}^{(n)} + {}^t \Delta \alpha_{kj}^{(n)}, \\ {}^t \Delta \alpha_{kj}^{(n)} &= -\kappa \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t \alpha_{kj}^{(n)}} = \kappa \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{kj}^{(n)}} \frac{\partial {}^{(t-1)} E}{\partial {}^{(t-1)} w_{kj}^{(n)}} \end{aligned}$$

verbessert werden, ergibt sich folgende Problematik. Oszilliert das Verfahren um das Minimum, d.h.  $[\partial {}^t E]/[\partial {}^t w_{kj}^{(n)}]$  bzw.  $[\partial {}^{(t-1)} E]/[\partial {}^{(t-1)} w_{kj}^{(n)}]$  haben unterschiedliches Vorzeichen, so müßte  $\kappa$  klein sein, um ins Minimum zu gelangen. Bei gleichem Vorzeichen aber kleinen Beträgen (sich dem Minimum langsam nähernd) müßte  $\kappa$  groß sein, um bei

immer schwächer werdender Steigung in endlicher Zeit ins Minimum zu gelangen. Die Adaption der Lernrate muß also entsprechend des jeweiligen Falls geeignet vorgenommen werden. Dafür hat z.B. JACOBS drei weitere empirisch zu wählende Lernparameter eingeführt (siehe [39, S. 192–201]).

### Rprop-Verfahren

Zur Vermeidung einer empirischen Anpassung der Lernrate durch den Benutzer wurde das nahezu autark und sehr stabil arbeitende Rprop-Verfahren entwickelt. Dieser Algorithmus ist im Programm SNNS (Stuttgart Neural Network Simulator <sup>1</sup>) enthalten, welches für das Training der Neuronalen Netze dieser Arbeit verwendet wurde. Das Rprop-Verfahren berücksichtigt die folgende Eigenschaft Neuronaler Netze: für beliebig große Gewichte werden die Aktivierungsfunktionen in die Sättigung getrieben (das Neuron schaltet), so daß einzelne Beispiele zwar nahezu exakt wiedergegeben werden können, eine kontinuierliche Aussage für Zwischenwerte aber nicht mehr möglich ist. Dieser Effekt wird auch als *Overlearning* bezeichnet, da die Generalisierungsfähigkeit des Neuronalen Netzes zu Beginn des Trainings zunimmt, bei Spezialisierung auf die Trainingsmuster die Generalisierungsfähigkeit aber wieder verloren geht.

Das Rprop-Verfahren ist besonders zum Erlernen kontinuierlicher Zusammenhänge geeignet, wie es z.B. bei der Lösung von direkten oder inversen Problemen wünschenswert ist. Dies wird durch zwei Veränderungen der Zielfunktion gegenüber dem Standard Backpropagation-Verfahren erreicht: zum einen wird der Fehler für alle  $P$  Muster gebildet und aufsummiert und zum anderen wird diesem Fehler zusätzlich die Summe aller Gewichtsquadrate mit einem Faktor versehen hinzuaddiert, womit

$$E = \sum_{p=1}^P \left( \sum_{l=1}^L (d_l - y_l^{(N)})^2 \right) + 10^{-\kappa} \sum w_{ji}^2. \quad (2.75)$$

Somit wird der Fehler für alle Muster gleichzeitig minimiert, was als *Batch-Verfahren* bezeichnet wird. Der zweite Summand bewirkt, daß die Werte der Gewichte nicht größer als notwendig werden, womit die Glattheit der im Neuronalen Netz gebildeten Funktion gewahrt wird. Diese Eigenschaft kann mit dem frei wählbaren Parameter  $\kappa > 0$  in seiner Stärke gesteuert werden.

---

<sup>1</sup><http://www.informatik.uni-stuttgart.de/ipvr/bv/projekte/snns/snns.html>

Die Bestimmung von  ${}^t\Delta w_{ji}$  wird durch zwei Fallunterscheidungen vorgenommen. Mit

$${}^t\Delta w_{ji} = \begin{cases} -{}^t\Delta_{ji} & \text{für } \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{ji}} > 0 \\ +{}^t\Delta_{ji} & \text{für } \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{ji}} < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.76)$$

wird die Richtung mit Hilfe der Gradienteninformation festgelegt. Der Betrag der Anpassung  ${}^t\Delta_{ji}$  wird anhand des Vorzeichens von (2.74) angepaßt. Bei Annähern an das Minimum (positiv) wird dieser sukzessive erhöht, während er für eine Oszillation um das Minimum (negativ) ständig verringert wird

$${}^t\Delta_{ji} = \begin{cases} \eta^+ \cdot ({}^{t-1})\Delta_{ji} & \text{für } \frac{\partial ({}^{t-1})E}{\partial ({}^{t-1})w_{ji}} \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{ji}} > 0 \\ \eta^- \cdot ({}^{t-1})\Delta_{ji} & \text{für } \frac{\partial ({}^{t-1})E}{\partial ({}^{t-1})w_{ji}} \frac{\partial {}^t E}{\partial {}^t w_{ji}} < 0 \\ ({}^{t-1})\Delta_{ji} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.77)$$

Die beim Rprop-Verfahren eingearbeiteten Lernparameter  $0 < \eta^- < 1 < \eta^+$  sind in SNNS fest vorgegeben und vom Benutzer nicht zu beeinflussen. Es können lediglich ein Startwert  ${}^0\Delta_{ji}$ , eine obere Schranke  ${}^t\Delta_{ji} < \Delta_{ji}$  sowie die Potenz  $\kappa$  vorgegeben werden, welche üblicherweise im Bereich  $3 \leq \kappa \leq 6$  gewählt wird. Aufgrund der automatischen Adaption ist die Übernahme der Default-Werte für den Startwert ( ${}^0\Delta_{ji} = 0.2$ ) und die obere Schranke ( $\Delta_{ji} = 50$ ) völlig ausreichend. Lediglich beim Hinzutrainieren neuer Trainingsmuster zu einem bereits trainierten Netz sollte aus eigener Erfahrung der Startwert etwa auf ein hundertstel des Default-Wertes gewählt werden, um in der ersten Epoche die zuvor sorgfältig trainierten Gewichte nicht zu zerstören. Die Wahl des Parameters  $\kappa$  ist entscheidend dafür, ob das Netz eher klassifizieren oder eher interpolieren soll. Im ersten Fall ist  $\kappa > 6$  zu wählen, womit die synaptischen Gewichte groß werden können und so die Neuronen in der Lage sind, die Werte Null oder Eins zu schalten (ja oder nein). Im letzteren hängt die Wahl von der Gutmütigkeit des zu erlernenden Zusammenhangs ab. Ist das Problem gut gestellt und sind die Eingabedaten vollständig sowie der Wertebereich der Ausgabedaten klein, kann  $5 \leq \kappa \leq 6$  gewählt werden. Andernfalls ist meist ein Wert zwischen  $3 \leq \kappa \leq 5$  hilfreich, um Overlearning zu unterdrücken. Es ist anzumerken, daß der optimale Wert von  $\kappa$  wegen der Summation über die Gewichtsquadrate in (2.75) von der Anzahl der synaptischen Verbindungen abhängt.

### 2.3.3 Aufbereitung der Daten

Aufgrund des Wertebereiches der Sigmoidalfunktion von  $0 < \varphi < 1$  müssen die Werte der Ausgabevektoren auf ein Intervall innerhalb  $(0, 1)$  abgebildet werden. Für die in

dieser Arbeit betrachteten kontinuierlichen Probleme wird eine möglichst glatte und oszillationsfreie Approximation angestrebt. Daher sollten die Ausgabeneuronen möglichst in der Mitte des Übergangsbereichs der Aktivierungsfunktion betrieben werden, weshalb ein deutlicher Abstand von den Sättigungswerten gewahrt werden muß. Analog hierzu ist es sinnvoll, die Eingabewerte ebenfalls innerhalb eines geeigneten Intervalls zu wählen, so daß die Ausgabewerte der ersten Schicht für alle Muster innerhalb des Übergangsbereichs der Neuronen liegen. Die Anpassung der Eingabe- und der Ausgabedaten an die durch die Aktivierungsfunktion vorgegebenen Intervalle wird durch eine geeignete Transformation erreicht, wobei im einfachsten Fall eine lineare Skalierung vorgenommen wird.

### Lineare Skalierung

Die Skalierung der Daten erfolgt anhand der Extremwerte aus den Trainingsmustern, die für jedes Neuron unterschiedlich sein können. Für ein Eingabeneuron  $i$  gilt

$$x_i^{(LIN)} = x_a \frac{x_i - x_{i,min}}{x_{i,max} - x_{i,min}} + x_u, \quad (2.78)$$

wobei  $x_{i,min}$  und  $x_{i,max}$  den kleinsten bzw. größten vorkommenden Wert des Eingabeneurons  $i$ ,  $x_i$  den aktuellen Wert und  $x_i^{(LIN)}$  den linear skalierten Wert bezeichnen. Analog gilt für ein Ausgabeneuron  $l$

$$y_l^{(LIN)} = y_a \frac{y_l - y_{l,min}}{y_{l,max} - y_{l,min}} + y_u, \quad (2.79)$$

wobei  $y_{l,min}$  und  $y_{l,max}$  den kleinsten bzw. größten vorkommenden Wert des Ausgabeneurons  $l$ ,  $y_l$  den aktuellen Wert und  $y_l^{(LIN)}$  den linear skalierten Wert bezeichnen. Für diese Arbeit wurden die Skalierungsparameter in Tabelle 2.1 verwendet, womit die Daten im Übergangsbereich der sigmoidalen Aktivierungsfunktion liegen (s. Abb. 2.11c).

$x_u$	$x_o$	$x_a := x_o - x_u$
-0.25	0.25	0.5
$y_u$	$y_o$	$y_a := y_o - y_u$
0.25	0.75	0.5

Tabelle 2.1: Parameter für die lineare Skalierung der Daten.

Die Rückskalierung der Ausgabedaten erfolgt durch Auflösen von (2.79) nach  $y_l$ :

$$y_l = \frac{1}{y_a} (y_l^{(LIN)} - y_u) (y_{l,max} - y_{l,min}) + y_{l,min} . \quad (2.80)$$

### GSL-Transformation

Diese von YOSHIMURA ET AL. [119] vorgeschlagene GSL-Transformation (GSL = General Space Lattice) entspricht einer Regularisierung der Eingabe- und Ausgabedaten ausschließlich auf der Basis der vorhandenen Muster, d.h. es wird keine Erfahrung bezüglich Korrelationen oder geschlossenen Lösungen vorausgesetzt.

Bei vielen Problemen ist der Zusammenhang zwischen Eingangs- und Ausgangsgrößen stark nichtlinear. Für das Problem der Parameteridentifikation ist dies in Abb. 2.13 schematisch dargestellt. Werden die Eingangsgrößen des direkten Problems äquidistant variiert, spiegelt sich die Nichtlinearität in einer entsprechend nichtlinearen Verteilung der Systemantwort wieder.

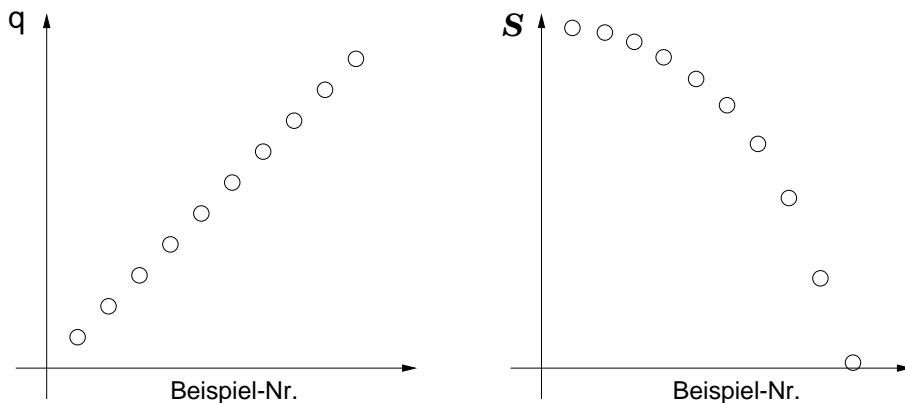


Abbildung 2.13: Fiktives Beispiel einer vom Parameter  $q$  nichtlinear abhängigen Systemantwort  $\mathcal{S}$ .

Zur Verbesserung der Auflösung in den Bereichen, in denen sich die Werte der Systemantwort  $\mathcal{S}$  häufen, werden diese, beginnend vom kleinsten Wert, in aufsteigender Reihenfolge sortiert und mit einer Ordnungsnummer  $n$  ( $1 \leq n \leq N$ ) versehen. Die Auftragung von  $n$  über  $\mathcal{S}$  ergibt eine Art Verteilungsfunktion (s. Abb. 2.14).

Bei der GSL-Transformation wird als Eingabe- bzw. Ausgabewert statt des Wertes von  $\mathcal{S}$  der zugeordnete Wert von  $n$  verwendet. Dadurch ergibt sich eine Streckung der Bereiche, in der die Werte gehäuft vorkommen, während Bereiche, in denen die Werte große Abstände aufweisen, komprimiert werden.



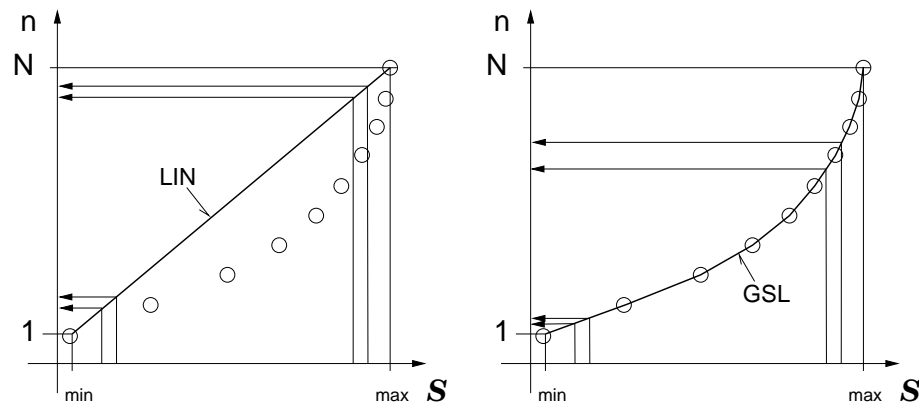


Abbildung 2.14: Skizze der Regularisierung mittels der GSL-Transformation.

Es gilt:

$$x_i^{(GSL)} = x_a \frac{n_i - 1}{N - 1} + x_u, \quad (2.81)$$

$$y_l^{(GSL)} = y_a \frac{n_l - 1}{N - 1} + y_u, \quad (2.82)$$

$$n_l = \frac{1}{y_a} (y_l^{(GSL)} - y_u) (N - 1) + 1. \quad (2.83)$$

Die Werte von  $n$  werden für andere Muster als die Trainingsmuster reelle Zahlen annehmen, die durch lineare Interpolation aus den Trainingsmustern hervorgehen. Die Punkte der Trainingsmuster liegen für eine vernünftige Arbeitsweise der GSL-Transformationsfunktion so dicht, daß andere Interpolationsfunktionen keinen Vorteil bringen. Ist die Dichte der Daten zu gering, wird der Verlauf der Transformationsfunktion zu einer Folge von Sekanten, was die Generalisierungseigenschaften des Neuronalen Netzes verschlechtert.

### 2.3.4 Trainings- und Verifikationsmuster

Zur Kontrolle des Lernfortschritts stellt das Programm SNNS verschiedene Fehlermaße zur Verfügung. Der *SSE-Wert* enthält die Summe aller Fehlerbeträge für alle Muster  $P$  und alle Ausgabeneuronen  $L$ :

$$SSE := \sum_{p=1}^P \sum_{l=1}^L (d_l - y_l^{(N)})^2. \quad (2.84)$$

Der *MSE-Wert* entspricht dem mittleren auf die Anzahl aller Muster und Ausgabeneuronen bezogenen Fehler

$$MSE := \frac{1}{PL} \sum_{p=1}^P \sum_{l=1}^L (d_l - y_l^{(N)})^2, \quad (2.85)$$

welcher zum Vergleich verschiedener Neuronaler Netze und unterschiedlicher Zahl von Mustern geeignet ist.

Während des Trainings können nach einer festgelegten Zahl von Epochen regelmäßig Verifikationsmuster ausgewertet werden, die nicht zum Training des Netzes herangezogen werden. Der resultierende Verifikationsfehler kann simultan mit dem Trainingsfehler in einem Graphen dargestellt werden. Dies ermöglicht insbesondere bei Verwendung von MSE-Werten den direkten Vergleich der Fehler von Trainings- und Verifikationsmustern und gibt bereits während des Trainings Hinweise über Eindeutigkeit, Vollständigkeit und Generalisierung.

### **Eindeutigkeit, Vollständigkeit und Generalisierung**

Der Trainingsfehler nimmt durch die Optimierung immer über der Epochenzahl ab. Sind die Daten nicht eindeutig oder nicht vollständig, wird das Neuronale Netz versuchen, die Ausgabewerte anhand der Konstellation der Eingabedaten zuzuordnen. Dies entspricht einer Mustererkennung, was folglich nachteilig für die Generalisierungseigenschaften ist. In diesem Fall kann das Neuronale Netz aber nur die erlernten Muster wiedergeben, während andere Muster falsche Ergebnisse liefern. Damit wird der Verifikationsfehler mit dem Lernfortschritt erheblich ansteigen. Nimmt der Verifikationsfehler kontinuierlich ab, erlernt das Netz den kontinuierlichen Zusammenhang zwischen Eingabe- und Ausgabedaten, was nur dann möglich ist, wenn das Problem *eindeutig* und *vollständig* formuliert ist. Ist zusätzlich der Verifikationsfehler und der Trainingsfehler sehr klein, kann davon ausgegangen werden, daß eine gute Generalisierung erreicht wurde. Unter *Generalisierung* (Verallgemeinerung) versteht man dabei die Fähigkeit, von Lösungen bekannter Beispiele auf das Ergebnis bislang nicht gelöster Beispiele schließen zu können. Durch die simultane Betrachtung des Trainings- und Verifikationsfehlers erhält man somit bereits während des Lernprozesses einen Eindruck darüber, ob das Problem gut oder schlecht formuliert ist.

Dieses Verhalten kann an einem einfachen Beispiel verdeutlicht werden. Ein Zusammenhang sei beschreibbar durch die unbekannte aber punktweise auswertbare Gleichung

$$y = \hat{y}(C, \xi, \eta, r) = Cr + 0.1Cr^2 + 0.5C^2\xi + 0.5C^2\eta, \quad (2.86)$$

wobei die nicht explizit bekannte Abhängigkeit zwischen  $r$ ,  $\xi$  und  $\eta$  der Form

$$r := \sqrt{\xi^2 + \eta^2} \quad (2.87)$$

existiert. Nun können drei Szenarien definiert werden. Im ersten Fall wird angenommen, daß die Werte von  $C$ ,  $r$ ,  $\xi$  und  $\eta$  gemessen werden können, wodurch die Eingabedefinition

$$ID1 : \quad x_1 \dots x_4 := \{C, \xi, \eta, r\} \quad (2.88)$$

resultiert. Im zweiten Fall wird angenommen, daß die Werte von  $C$ ,  $\xi$  und nur das Vorzeichen von  $\eta$  gemessen werden können, wodurch die Eingabedefinition aus den verfügbaren Daten

$$ID2 : \quad x_1 \dots x_4 := \left\{ C, \xi, \frac{\eta}{|\eta|}, r \right\} \quad (2.89)$$

resultiert. Es ist anzumerken, daß mit der Kenntnis von  $r$  und  $\xi$  sowie des Vorzeichens von  $\eta$  der zugehörige Wert wegen (2.87) von dem Neuronalen Netz intern eindeutig ermittelt werden kann. Im dritten Fall wird angenommen, daß nur die Vorzeichen von  $\xi$  und  $\eta$  gemessen werden können, wodurch die Eingabedefinition aus den verfügbaren Daten

$$ID3 : \quad x_1 \dots x_4 := \left\{ C, \frac{\xi}{|\xi|}, \frac{\eta}{|\eta|}, r \right\} \quad (2.90)$$

resultiert. Hier besteht keine Möglichkeit mehr, den Radius  $r$  eindeutig in  $\xi$  und  $\eta$  aufzuspalten.

Der Lernfortschritt eines Neuronalen Netzes für die drei Eingabedefinitionen ID1–ID3 zur Ermittlung des Wertes von  $y$  ist in Abb. 2.15 dargestellt. Abbildung 2.15a zeigt den Verlauf des MSE-Wertes für die Trainingsmuster und Abb. 2.15b den Verlauf des MSE-Wertes der Verifikationsmuster. Anhand der Verläufe des Trainingsfehlers ist von ID1 nach ID3 eine Zunahme des Fehlers festzustellen, wodurch auf eine zunehmende Schwierigkeit des Erlernens geschlossen werden kann. Der Verlauf für die Verifikationsmuster gibt Hinweise bezüglich der Eindeutigkeit des Problems. Während für die eindeutig formulierten Definitionen ID1 und ID2 der Verifikationsfehler in gleicher Weise wie der Trainingsfehler kontinuierlich abnimmt, steigt der Verifikationsfehler für ID3 ab einem gewissen Zeitpunkt in dem Maße, wie der zugehörige Trainingsfehler abnimmt. Dieses Verhalten ist typisch für nicht eindeutige Problemstellungen. In diesem Fall geht das Erlernen der Trainingsmuster auf Kosten der Generalisierungsfähigkeit.

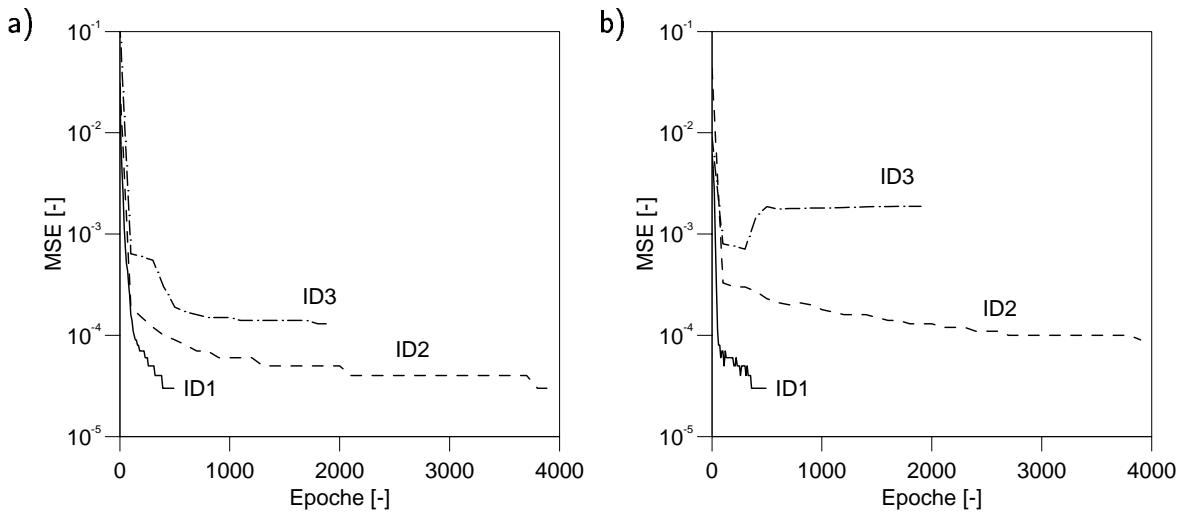


Abbildung 2.15: Verlauf des MSE-Wertes für zwei gut gestellte Probleme (ID1, ID2) sowie ein schlecht gestelltes Problem (ID3): a) Trainingsmuster; b) Verifikationsmuster.

## Overlearning

Liegt ein eindeutiger Zusammenhang vor, kann dennoch nach einer längeren Trainingsdauer ein Wiederanstiegen des Verifikationsfehlers auftreten. Dieser sogenannte *Overlearning*-Effekt beruht darauf, daß das Neuronale Netz für geringfügige Verbesserung des Trainingsfehlers die Oszillationsfreiheit des Zusammenhangs allmählich aufgibt. Dies ist dadurch bedingt, daß das Netz gezwungen wird, mit der verfügbaren Aktivierungsfunktion einer anders gearteten Funktion in den Trainingspunkten genau zu entsprechen. Diese Problematik ist auch in Verbindung mit der Interpolation durch Polynome bekannt. Die resultierenden Wellenbildungen in der Abbildungsvorschrift des Neuronalen Netzes erhöhen den Fehler für die Verifikationsmuster. Es ist zu beachten, daß dieser Effekt auch durch fehlerbehaftete Daten (numerische Fehler, experimentelle Streuung) hervorgerufen werden kann. In diesem Fall wird das Netz durch zu intensives Training gezwungen, von einem die Fehler ausgleichenden approximativen Zusammenhang abzuweichen und auch den Fehler wiederzugeben. Der wesentliche Unterschied zu dem Verhalten bei Nichteindeutigkeit liegt in der wesentlich höheren Lerndauer bei Eintreten des Effekts sowie dem sanften Durchlaufen des Minimums des Verifikationsfehlers. Für die in den folgenden Kapiteln gezeigten Beispiele wird die Eindeutigkeit durch entsprechende Vorarbeiten sichergestellt, womit der Verifikationsfehler über der Dauer des Trainings bis zum Eintreten von Overlearning monoton abnimmt. Damit ist es bei der Darstellung der Ergebnisse ausreichend, den resultierenden MSE-Wert für Trainings- und Verifikationsmuster anzugeben.

### 2.3.5 Einbringen von Vorwissen

Bei komplexen Problemen sowie bei der Formulierung von Neuronalen Netzen mit Anspruch an große Gültigkeitsbereiche ist das Einbringen von Vorwissen von entscheidender Bedeutung für die erfolgreiche Problemlösung. In der Literatur finden sich nur wenige Anwendungen, bei denen gezielt Vorwissen eingearbeitet wurde. Diese beschränken sich auf Klassifikationsprobleme, insbesondere in der Mustererkennung, für welche die Berücksichtigung von Invarianzen bezüglich Skalierung, Rotation und Verschiebung das Neuronale Netz erheblich entlasten. Die von ABU-MOSTAFA und AL-MASHOUQ & REED vorgeschlagenen Methoden zur Einbringung von Vorwissen bezüglich Invarianzen erfordern einen speziell an das Problem angepaßten Trainingsalgorithmus [1, 3]. Von ZHANG & ELMASRY wurden mikroelektronische Komponenten (ROM, VLSI) bei der Herstellung von ANN-Chips kombiniert und die Verbindungen in der Netzstruktur am Problem ausgerichtet [121].

Im Gegensatz zu diesen Lösungen, die einen Eingriff in die Soft- oder Hardware der Trainingsalgorithmen und Neuronalen Netze erforderlich machen, soll in dieser Arbeit eine Vorgehensweise vorgestellt werden, welche zusammen mit konventionellen Simulationsprogrammen verwendet werden kann. Damit beschränken sich die Möglichkeiten der Einflußnahme im wesentlichen auf die Aufbereitung der Eingabe- und Ausgabedaten. Wie jedoch Vorwissen mit der Aufbereitung der Daten in ein Neuronales Netz eingearbeitet werden kann, ist bislang nicht untersucht worden. Nach den Kenntnissen des Autors wird in dieser Arbeit zum ersten mal eine systematisierte Formulierung der Eingabe- und Ausgabedefinition unter der Ausnutzung von Vorwissen für die Lösung der verschiedensten Probleme angewendet.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann von einem Neuronalen Netz ausgegangen werden, das einen dimensionsbehafteten Eingabevektor  $\mathbf{x}$  der Größe  $I$  und eine skalare dimensionsbehaftete Ausgabegröße  $y$  besitzt. Ein völlig ohne Vorwissen definiertes Neuronales Netz stellt also eine dimensionsbehaftete Vektorfunktion

$$y = \mathcal{N}[\mathbf{x}] \tag{2.91}$$

dar. Die Komponenten  $x_i$  sind hierbei die physikalischen Einflußgrößen des Problems, während  $y$  die davon abhängige Größe ist.

Im folgenden bezeichnen  $y$  exakte Werte,  $\tilde{y}$  mit Vorwissen versehene aber bezüglich  $y$  approximative Werte und  $y^*$  dimensionslose Ausgabewerte, die gegenüber  $y$  um das Vorwissen reduziert sind. Sinn und Zweck der dargestellten Methoden ist es, den Wertebereich der Ausgabedaten in eine Umgebung um den Wert eins zu transformieren und

zu komprimieren, wodurch die Generalisierung und die Genauigkeit gesteigert werden kann.

Dies soll an einem einfachen Zahlenbeispiel erläutert werden. Nehmen wir an, ein zu ermittelnder Parameter  $y$  nimmt Werte zwischen  $1 \leq y \leq 1000$  an. Würde dieser Wert in absoluter Form am Ausgang trainiert, so lernt das Neuronale Netz zuerst die Parameter in der Größenordnung von  $y = 1000$ , welche den größten Fehler hervorrufen. Wenn die Genauigkeit in dieser Größenordnung 10% erreicht, beginnt das Netz die Parameter in der Größenordnung von  $y = 100$  zu lernen, usw. Selbst wenn das Neuronale Netz in der Lage wäre, eine Genauigkeit von 1% des Wertebereiches zu erzielen, bedeutet dies, daß der absolute Fehler noch etwa 10 beträgt. Somit kann der zu ermittelnde Parameter vom Wert  $y = 10$  im Intervall  $[0, 20]$  oder der Parameter vom Wert  $y = 1$  im Intervall  $[-9, 11]$  liegen, was physikalisch unsinnig wäre.

Nehmen wir nun an, eine aus den zur Verfügung stehenden Eingabedaten leicht (explizit) zu bildende Größe  $\tilde{y}$  schätze den exakten Wert  $y$  auf 50% genau. Wird das Neuronale Netz mit einem Ausgabewert  $y^* := y/\tilde{y}$  trainiert, so ist der resultierende Wertebereich  $0.5 \leq y^* \leq 1.5$ . Bei einer Genauigkeit von 10% des Neuronalen Netzes bezüglich des Wertebereichs von  $y^*$  ergibt sich ein maximaler Fehler von 0.1. Der ermittelte Wert des Parameters  $y = 1$  liegt im Intervall  $[0.9, 1.1]$ , der des Parameters vom Wert  $y = 1000$  im Intervall  $[900, 1100]$ . Mit anderen Worten, der relative Fehler kann auf diese Weise auf 10% über den gesamten Wertebereich des Parameters  $y$  reduziert werden.

Aufgrund des großen Vorteils ist es legitim, für die Einbringung von Vorwissen alle denkbaren Informationsquellen zu nutzen. Die im folgenden dargestellte Sammlung beinhaltet physikalisch, mathematisch und ingenieurmäßig begründete Möglichkeiten zur Ermittlung eines geeigneten Schätzwertes  $\tilde{y}$ . Deren konkrete Umsetzung wird in den Kapiteln 4–7 anhand vieler Beispiele demonstriert.

## Dimensionsanalyse

Durch Anwenden des PI-Theorems kann die Zahl der Einflußgrößen um den Rang  $r$  der Dimensionsmatrix aller Komponenten  $x_i$  und  $y$  reduziert werden (siehe z.B. [46, 122]), womit die dimensionslose Kenngröße  $y^*$  von  $I - r$  dimensionslosen linear unabhängigen Kenngrößen  $x_i^*$  abhängt. Neben der Verringerung der Größe des Eingabevektors hat dies weitere entscheidende Vorteile.

- Das Neuronale Netz wird unabhängig von absoluten Werten und somit in einem größeren Bereich gültig, als dies z.B. die absoluten Wertebereiche der Trainingsmuster implizieren.

- Das Training des Neuronalen Netzes wird vereinfacht, da wesentliche physikalische Gesetzmäßigkeiten bereits in den Entdimensionierungen enthalten sind.

### Näherungslösungen

Resultieren die Trainingsdaten aus der Lösung von Differentialgleichungssystemen, wie es z.B. bei nichtlinearen Materialmodellen mit inneren Variablen der Fall ist, können durch gezielte Vereinfachung der Differentialgleichungen Näherungen erzielt werden, die einen Großteil der Information enthalten. Wird die zu identifizierende Größe auf diese Näherung bezogen, hat das Neuronale Netz lediglich die Korrektur bezüglich des exakten Wertes zu ermitteln, welche einen Zahlenwert von ungefähr 1 darstellt. Einige Beispiele für solche Näherungen sind:

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} \quad \Rightarrow \quad \dot{\tilde{y}} := \frac{\Delta y}{\Delta t} \quad (2.92)$$

$$\dot{y} = \dot{y}_1 + \dot{y}_2, \quad \dot{y}_1 \gg \dot{y}_2 \quad \Rightarrow \quad \dot{\tilde{y}} := \dot{y}_1 \quad (2.93)$$

$$y = \hat{y}(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + \dots, \quad x \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{y} := f_0 + f_1 x. \quad (2.94)$$

### Idealisiertes Modell

Für physikalische Probleme existieren in vielen Fällen Modelle, die auf Annahmen beruhen. Jede Annahme zieht Abweichungen zum realen Verhalten nach sich, die unter Umständen beträchtlich sein können. Bei mechanischen Problemen sind diese Annahmen meist von der Art kleiner Deformationen, Elastizität, Linearität, Homogenität, Isotropie, keine Größeneffekte, keine Kopplung mit anderen physikalischen Effekten (Thermomechanik, Elektromechanik) usw.

Ist jedoch eine genauere Vorhersage oder Identifikation des realen Wertes  $y$  gewünscht, als es mit einem solchen Modell möglich ist, kann dieses als Schätzer  $\tilde{y}$  verwendet werden. Das Neuronale Netz kann verwendet werden, um die übrigen Einflüsse korrekt zu berücksichtigen.

### Korrelationen

Eine weitere Möglichkeit zur Gewinnung von Schätzwerten  $\tilde{y}$  bilden Korrelationen. In vielen Fällen finden sich in der Literatur empirische Relationen  $\tilde{y}(\tilde{\mathbf{x}})$ , die auf einem großen Erfahrungsschatz basieren und die wesentlichen Gesetzmäßigkeiten gut beschreiben. Dabei ist  $\tilde{\mathbf{x}}$  möglicherweise eine Funktion des Eingabevektors  $\mathbf{x}$ .

### Anmerkung

Für die obigen Vorgehensweisen des Einbringens von Vorwissen gibt es eine Einschränkung. Hat die Näherungslösung, das Modell oder die Korrelation im fraglichen Bereich einen Nulldurchgang oder kann aufgrund von Meßrauschen oder numerischer Fehler ein Nulldurchgang entstehen, so ist von einer Division mit dem Schätzwert abzu-  
sehen. In diesem Fall würden physikalisch unsinnige Entdimensionierungen resultieren. Eine Möglichkeit dieses Problem zu umgehen, ist z.B. die Wahl einer Ausgabedefinition der Form

$$y^* := y - \tilde{y} , \quad (2.95)$$

bei der das Neuronale Netz die Abweichung zu ermitteln hat.

### 2.3.6 Hinweise zur Darstellung

Die Darstellung des Lösungsweges bei der Anwendung Neuronaler Netze ist mit einer großen Menge an Information verbunden. Um den Stoff übersichtlich zu präsentieren, wird in der vorliegenden Arbeit jedes Beispiel nach einem einheitlichen System erläutert. Die Punkte *Problemstellung*, *Formulierung von Vorwissen*, *Wahl des Simulationsbereichs*, *Simulationen*, *Eingabedefinition*, *Ausgabedefinition* und *Training und Verifikation* werden hierbei abgearbeitet. In den vorigen Abschnitten wurde gezeigt, daß die Aufbereitung der Daten, die Eingabedefinition und die Ausgabedefinition von zentraler Bedeutung sind. Diese Definitionen vereinigen das gesamte Wissen, das zur Problemlösung eingebracht wird, und es ist unumgänglich, jeden einzelnen dieser Bereiche zu dokumentieren.

Bei der Herleitung der Beziehungen für die *Näherungen*  $\tilde{y}$  ist in vielen Fällen nicht möglich, eine durchgehende Unterscheidung der Variablen  $y$  und  $\tilde{y}$  beizubehalten, da mit jeder Annahme oder Vereinfachung eine neue Bezeichnung eingeführt werden müßte. Aus diesem Grund wird die Bezeichnung der exakten Lösung  $y$  unter der Voraussetzung, die Annahmen seien gerechtfertigt, für die daraus entwickelten Näherungen übernommen. Um schließlich wieder eine allgemeingültige Lösungen zu erhalten, ist eine *Korrektur* der Näherung erforderlich, welche durch ein Neuronales Netz vorgenommen wird.

Da der absolute Fehler  $e_l$  nach (2.55) insbesondere bei Überschreitung von mehreren Größenordnungen des Ausgabewertebereichs keine objektive Beurteilung der Identifikationsqualität erlaubt, wird der relative Fehlerbetrag, definiert durch

$$err_l := \left| \frac{e_l}{d_l} \right| = \left| \frac{d_l - y_l^{(N)}}{d_l} \right| \quad (2.96)$$



eingeführt. Dieses Fehlermaß wird im folgenden für die Auftragung in Diagrammen verwendet, um alle Muster für alle Ausgabeneuronen vergleichen zu können. Werden alle Beispiele nach dem relativen Fehlerbetrag sortiert, kann ein Fehlerbetrag abgelesen werden, den z.B. 90% aller Beispiele nicht überschreiten. In Anlehnung an die Statistik wird dieser Wert als 90%-Konfidenzintervall bezeichnet.

### 2.3.7 Anwendung Neuronaler Netze am Beispiel des Hyperboloids

Ein einschaliges Hyperboloid ist gegeben durch die Gleichung

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad (2.97)$$

während ein zweischaliges Hyperboloid durch

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2} = -1 \quad (2.98)$$

beschrieben wird (siehe [11], S.234). Ein verallgemeinertes Hyperboloid, welches (2.97) und (2.98) als Sonderfälle beinhaltet, stellt die Gleichung

$$x^{*2} + y^{*2} - z^{*2} = C \quad (2.99)$$

dar, wobei gleichzeitig die Definitionen

$$x^* := \frac{x}{a}, \quad y^* := \frac{y}{b}, \quad z^* := \frac{z}{c} \quad (2.100)$$

gelten. Es soll nun angenommen werden, daß im folgenden (2.99) als unbekannter Zusammenhang in einer Funktion

$$C = \hat{C}(x^*, y^*, z^*) \quad (2.101)$$

verborgen sein soll, welche nur punktweise, aber für beliebige  $x^*$ ,  $y^*$  und  $z^*$  ausgewertet werden kann. Eine explizite Umformung von (2.99) in eine inverse Funktion

$$z^* = \hat{z}^*(x^*, y^*, C) = \sqrt{x^{*2} + y^{*2} - C} \quad (2.102)$$

zur Bestimmung der Kontur des Hyperboloids sei somit nicht möglich.

Diese Aufgabe soll mit Hilfe eines Neuronalen Netzes gelöst werden. Zur Herstellung der Eindeutigkeit seien nur Lösungen  $z^* \geq 0$  von Interesse. Der Trainingsraum wird festgelegt durch die Wertebereiche

$$x^* \in [-2, 2], \quad y^* \in [-2, 2], \quad z^* \in [0, 4]. \quad (2.103)$$

Für die Erzeugung der Muster werden entlang jeder Achse jeweils fünf Stützpunkte in gleichen Abständen angeordnet, wodurch die in Abb. 2.16 durch Punkte markierten 125 Trainingsmuster entstehen.

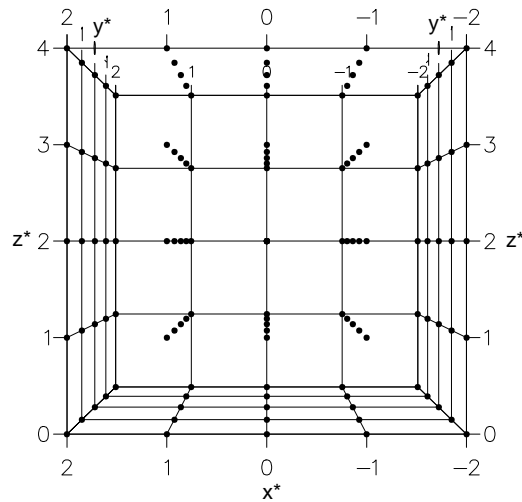


Abbildung 2.16: Anordnung der Trainingsmuster entlang kartesischer Koordinaten.

### A) Formulierung ohne Vorwissen

An jedem dieser so festgelegten Punkte wird die Konstante  $C$  in Abhängigkeit von den Koordinaten  $x^*$ ,  $y^*$  und  $z^*$  mit Hilfe des Zusammenhangs (2.101) ermittelt. Somit besteht jedes Muster aus vier zusammengehörenden Zahlenwerten  $(x^*, y^*, z^*, C)$ . Die Zuordnung dieser Zahlenwerte zu den Eingabe- und Ausgabeneuronen kann nun beliebig vorgenommen werden, solange der Zusammenhang eindeutig bleibt. Um ein Neuronales Netz zur Approximation von (2.102) zu trainieren, wird der Eingabevektor definiert mit

$$x_1 := x^*, \quad x_2 := y^*, \quad x_3 := C. \quad (2.104)$$

Entsprechend (2.102) ist der Wert am Ausgabeneuron definiert durch

$$y_1 := z^*. \quad (2.105)$$

Die Struktur des Neuronalen Netzes ist in Abb. 2.17 dargestellt. Das Netz besitzt drei Eingabeneuronen, ein Ausgabeneuron sowie fünf bzw. drei Neuronen in der ersten bzw. der zweiten verdeckten Schicht. Das Training für dieses einfache Problem dauert lediglich 80 Epochen und führt zu einem MSE-Wert von 0.00008. Das trainierte Neuronale Netz kann nun wie (2.102) ausgewertet werden. Indem die Koordinaten  $x^*$  und  $y^*$  in Abhängigkeit von Polarkoordinaten  $r = const$  bzw.  $\varphi = const$  berechnet werden, ist es möglich, für ein beliebiges aber festes  $C$  die Fläche des Hyperboloids durch die aus dem Neuronalen Netz resultierende  $z^*$ -Koordinate graphisch darzustellen. Den Darstellungen in Abb. 2.18 ist zu entnehmen, daß das Neuronale Netz die Konturen des einschaligen und zweischaligen Hyperboloids gut wiedergibt. Dabei ist zu berücksichtigen, daß

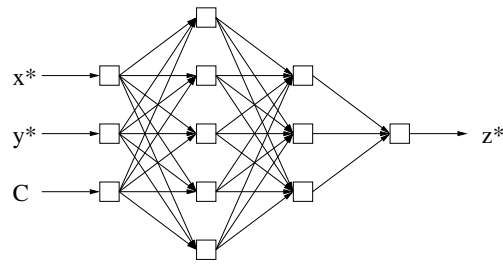


Abbildung 2.17: Aufbau des Neuronales Netzes

bei der Positionierung der Trainingsmuster keinerlei Bezug zur Rotationssymmetrie bestand. Aus diesem Grund ist die Qualität des Neuronales Netzes in den  $45^\circ$ -Richtungen etwas schlechter, wodurch die Wellen in den  $r = \text{const}$ -Verläufen entstehen. Das Minimum des zweischaliges Hyperboloids in Abb. 2.18b wird sehr genau wiedergegeben, die Krümmung der  $\varphi = \text{const}$ -Verläufe ist jedoch nicht korrekt.

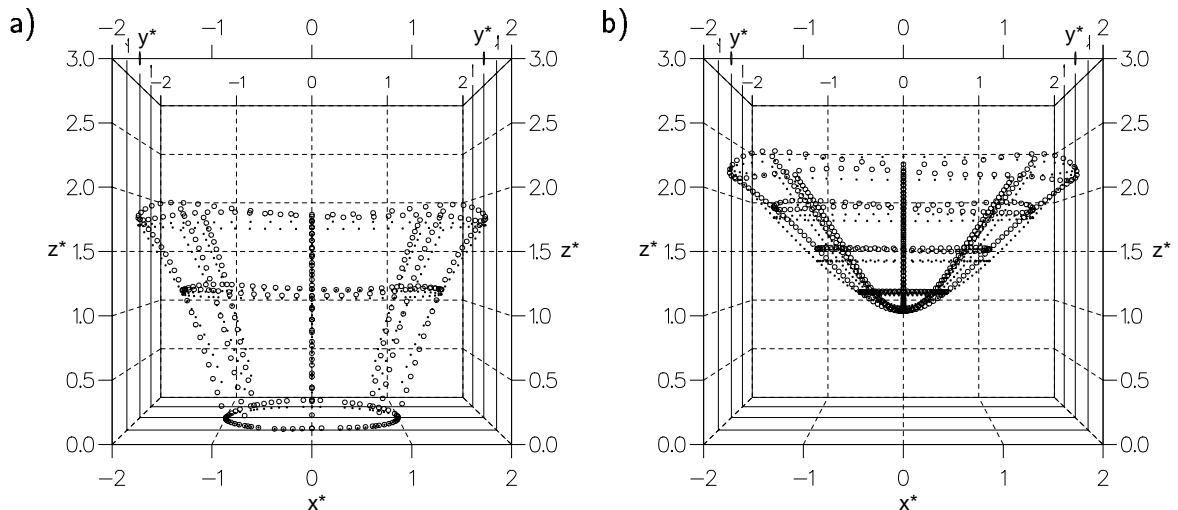


Abbildung 2.18: Lösung des inversen Problems (2.102): ( $\cdot$ ) exakte Lösung; ( $\circ$ ) Neuronales Netz: a) einschaliges Hyperboloid ( $C = 1$ ); b) zweischaliges Hyperboloid ( $C = -1$ ).

## B) Einbringen der Rotationssymmetrie

Ist bekannt, daß (2.102) rotationssymmetrisch bezüglich der  $z^*$ -Achse ist, so kann dieses Wissen bei der Formulierung des Neuronales Netzes ausgenutzt werden. In diesem Fall ist die Lösung unabhängig vom Winkel  $\varphi$  nur eine Funktion vom Radius  $r = \sqrt{x^{*2} + y^{*2}}$ . Damit reduziert sich der Eingabevektor zu

$$x_1 := \sqrt{x^{*2} + y^{*2}}, \quad x_2 := C, \quad (2.106)$$

während der Ausgabewert weiterhin gegeben ist durch

$$y_1 := z^* . \quad (2.107)$$

Die Struktur der verdeckten Schichten wird beibehalten. Das Training dauert für die modifizierten Daten 4000 Epochen und resultiert in einem MSE-Wert von 0.00002. Das einschalige und das zweischalige Hyperboloid in Abb. 2.19 zeigen nun keinen Einfluß des Winkels  $\varphi$  mehr und die Genauigkeit für den maximalen Radius ist verbessert. Allerdings ist die Lage des Minimums des einschaligen Hyperboloids in Abb. 2.19b etwas zu tief. Der Grund hierfür ist, daß die Daten in Radial-Richtung im Vergleich zu A) die doppelte Dichte haben und der Punkt  $r = 0$ , der nun einen Randwert darstellt, beim Training weniger stark berücksichtigt wird (vgl. später Abb. 2.22). Ebenfalls ist für das zweischalige Hyperboloid die Krümmung entlang  $\varphi = const$  nach wie vor nicht korrekt.

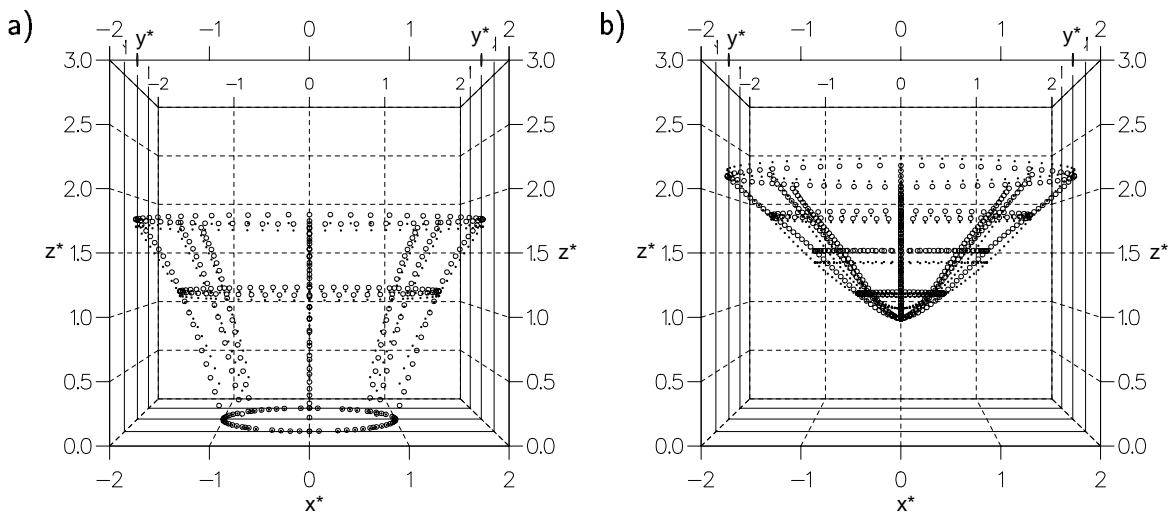


Abbildung 2.19: Lösung des inversen Problems (2.102): ( $\cdot$ ) exakte Lösung; ( $\circ$ ) Neuronales Netz: a) einschaliges Hyperboloid ( $C = 1$ ); b) zweischaliges Hyperboloid ( $C = -1$ ).

### C) Einbringen des Asymptotenkegels

Gleichung (2.99) enthält für  $C = 0$  den Sonderfall eines Kegels, dessen Achse mit der  $z^*$ -Achse zusammenfällt und dessen Spitze sich im Punkt  $x^* = y^* = 0$  befindet. Im Unendlichen nähern sich das einschalige und das zweischalige Hyperboloid von beiden Seiten dem Asymptotenkegel unbegrenzt. Sei nun bekannt, daß der Asymptotenkegel die Lösung

$$z_0^* = \sqrt{x^{*2} + y^{*2}} \quad (2.108)$$

besitzt, so kann dieser Spezialfall als Vorwissen genutzt werden. Neben der Eingabedefinition

$$x_1 := \sqrt{x^{*2} + y^{*2}}, \quad x_2 := C, \quad (2.109)$$

die aus dem vorigen Beispiel übernommen wird, soll das Neuronale Netz am Ausgang nun den Wert

$$y_1 := z^* - z_0^* \quad (2.110)$$

ermitteln. Eine Division mit  $z_0^*$  kommt hier nicht in Betracht, da der Asymptotenkegel den Wert Null enthält. Mit der Formulierung nach (2.110) muß das Neuronale Netz nun lediglich feststellen, wie weit das Hyperboloid vom Asymptotenkegel für gegebenen Radius  $r$  und Konstante  $C$  nach oben oder unten abweicht. Diese Abweichung geht mit zunehmendem Radius gegen null, womit sich die eigentliche Aufgabe des Neuronalen Netzes auf das Gebiet um den Ursprung konzentriert.

Es resultiert eine etwas höhere Trainingsdauer von 7000 Epochen mit einem abschließenden MSE-Wert von 0.00001. Die Graphiken der Hyperboloide in Abb. 2.20 zeigen fast völlige Übereinstimmung zwischen der exakten und der vom Neuronalen Netz ermittelten Lösung. Neben der hohen Genauigkeit für den maximalen Radius ist die Lage des Minimums für den zweischaligen Hyperboloid sehr genau und die Krümmung entlang  $\varphi = konst$  ist ebenfalls nun korrekt.

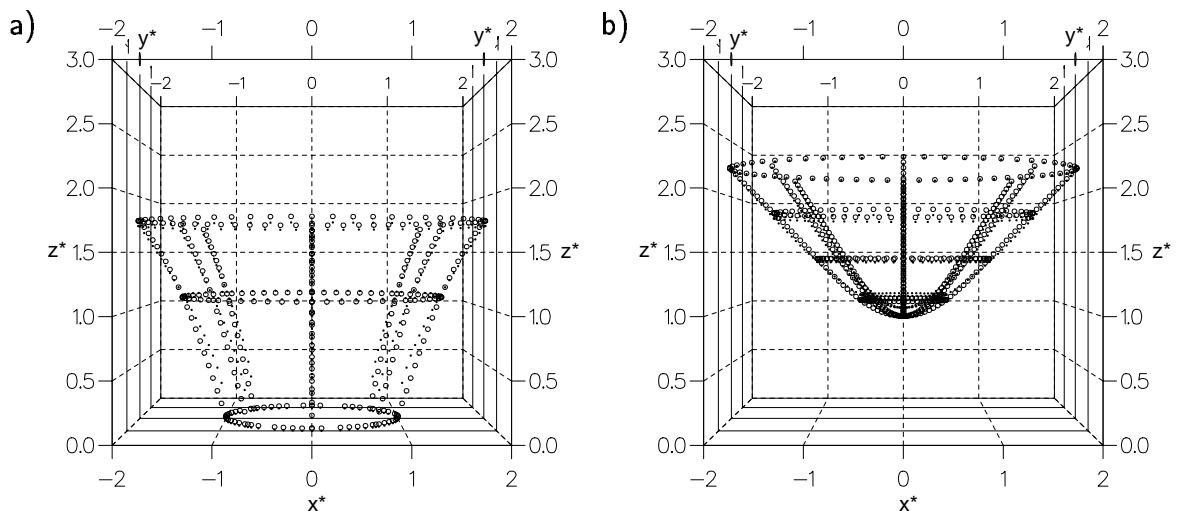


Abbildung 2.20: Lösung des inversen Problems (2.102): (·) exakte Lösung; (○) Neuronales Netz: a) einschaliges Hyperboloid ( $C = 1$ ); b) zweischaliges Hyperboloid ( $C = -1$ ).

## 2.4 Gegenüberstellung Neuronaler Netze und Optimierungsverfahren

Obwohl mit Optimierungsverfahren und Neuronalen Netzen gleichartige Aufgaben gelöst werden können, ist es schwierig, die beiden Methoden einem objektiven Vergleich zu unterziehen. Dies liegt in der unterschiedlichen Natur der Methoden. Optimierungsverfahren sind darauf spezialisiert, für ein einziges Beispiel die Parameter eines vorgegebenen Zusammenhangs so gut wie möglich anzupassen. Neuronale Netze hingegen versuchen durch die Anpassung eines flexiblen Operators an viele Beispiele den zugrundeliegenden Zusammenhang zu approximieren.

### 2.4.1 Zahl der Simulationen

Für die Summe von Exponentialfunktionen

$$x = f(\xi, \mathbf{q}) = e^{-q_1 \xi} + e^{-q_2 \xi} \quad (2.111)$$

soll ein Neuronales Netz zur Lösung des inversen Problems

$$\mathbf{y} = \mathcal{N}[\mathbf{x}] \quad (2.112)$$

entwickelt werden. Der Eingabevektor soll 9 Werte

$$x_i := f(\xi_i, \mathbf{q}), \quad \xi_i = i, \quad i = 1..9 \quad (2.113)$$

beinhalten, während der Ausgabevektor durch den Parametervektor

$$y_i := q_i, \quad i = 1..2 \quad (2.114)$$

definiert ist (s. Abb. 2.21a). Der in Frage kommende Raum für den Parametervektor wird auf  $0 \leq q_i \leq 1$  beschränkt. Analog der Skizze in Abb. 2.21b werden die Trainingsmuster in regelmäßigen Abständen erzeugt, wobei zur Herstellung der Eindeutigkeit  $q_1 \leq q_2$  gelten soll. Somit ergeben sich für z.B. 3 Stützpunkte je Komponente  $q_i$  insgesamt 6 Trainingsmuster.

Da ein Neuronales Netz eine Funktion darstellt, die Approximationscharakter besitzt, kann ein Vergleich mit Optimierungsverfahren nur schwer hergestellt werden. Interessant ist jedoch, wieviele Trainingsmuster notwendig sind, um eine akzeptable Identifikation zu erzielen. Ausgehend von 3 Stützpunkten je Komponente  $q_i$  wurde deren Zahl bis auf 7 erhöht und jeweils das gleiche Netz mit unveränderten Lernparametern trainiert.

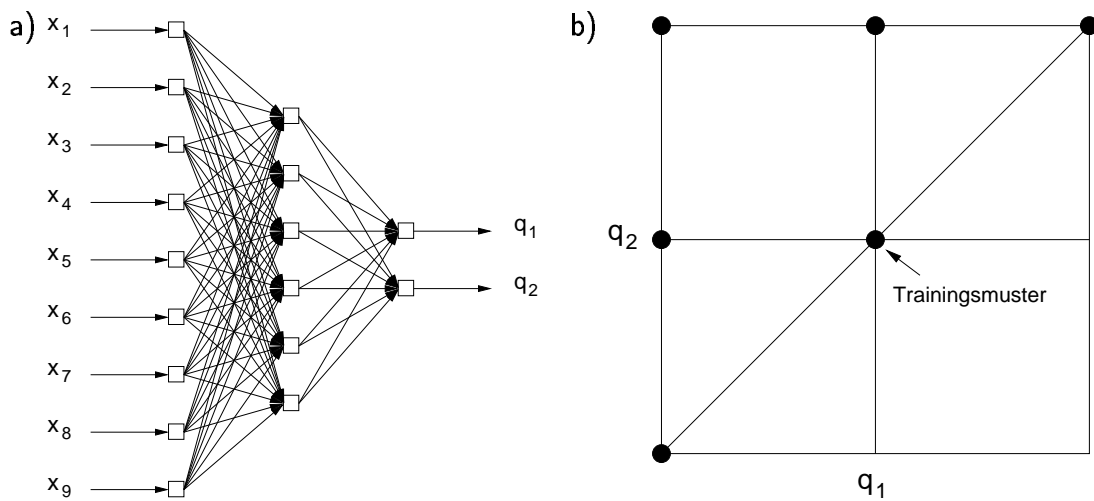


Abbildung 2.21: Zweidimensionales Identifikationsproblem: a) Neuronales Netz; b) Anordnung der Trainingsmuster.

Für einen repräsentativen Vergleich wurden 10 Kurven  $f(\xi, \mathbf{q})$  für zufällig gewählte Parametersätze erzeugt und deren Parameter reidentifiziert.

Es zeigt sich, daß bereits bei einem 4x4-Gitter ein optimales Ergebnis erzielt wird. Die Fehler der Verifikationsmuster in Abbildung 2.22a verdeutlichen, daß eine Erhöhung der Auflösung die Werte im Inneren verbessert, aber die Muster am Rand, insbesondere nahe dem Eckpunkt (0,1), verschlechtert. Die Verdichtung der Muster im Inneren bewirkt also, daß Fehler der Randmuster einen immer kleiner werdenden Beitrag zum Gesamtfehler liefern und deren korrekte Wiedergabe durch das Neuronale Netz beeinträchtigt wird. Selbst eine Mehrfachgewichtung der Eckpunkte bringt nur eine unwesentliche Verbesserung (vgl. Abb. 2.22b).

## 2.4.2 Simulationsaufwand in Abhängigkeit der Dimension

Die Funktion (2.111) wird für eine Betrachtung des Sachverhalts bei höherdimensionalen Problemen verallgemeinert in der Form

$$x = f(\xi, \mathbf{q}) = \sum_{d=1}^D e^{-q_d \xi}, \quad q_d < q_{d+1}. \quad (2.115)$$

Um einen objektiven Vergleich zwischen Neuronalen Netzen und Optimierungsverfahren zu ermöglichen, werden im folgenden zunächst die Neuronalen Netze trainiert und für 40 zufällig gewählte Verifikationsmuster ausgewertet. Wird der relative Fehler  $err_l$  ( $l = d$ )

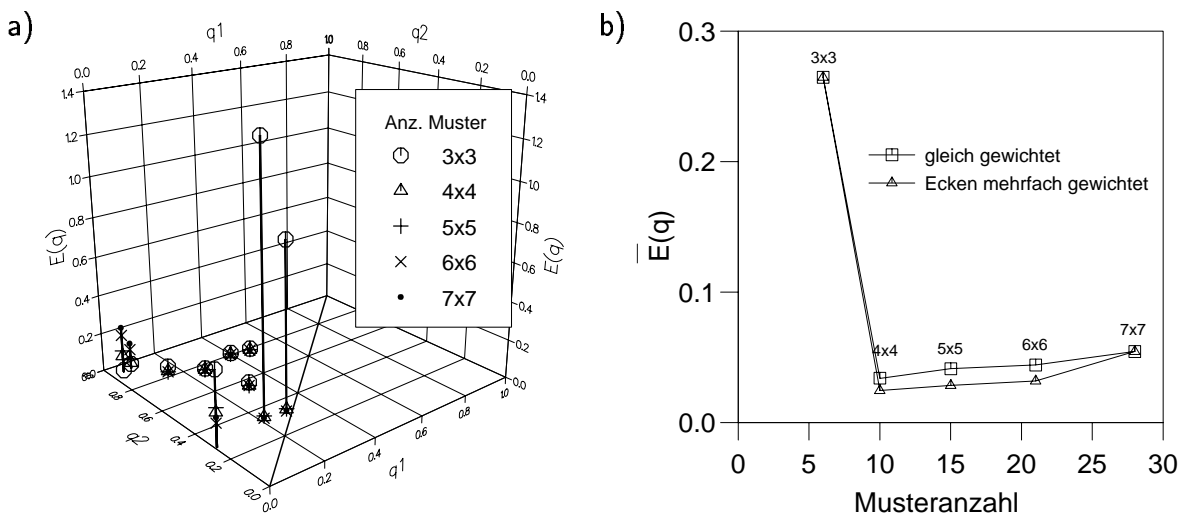


Abbildung 2.22: Variation der Dichte der Trainingsmuster: a) Abhängigkeit der Identifikationsqualität im Parameterraum; b) mittlerer Fehler der Verifikationsmuster.

nach (2.96) für alle Verifikationsbeispiele ermittelt und der Größe nach sortiert aufgetragen, so ergibt sich eine Fehlerverteilung, die Aufschluß über die Güte der Identifikation liefert.

Das Abbruchkriterium für die zum Vergleich herangezogenen Optimierungsverfahren wird so gewählt, daß die Identifikationsqualität derjenigen der Neuronalen Netze gleicht. Somit kann die Zahl der notwendigen Simulationsaufrufe als Maß für den Aufwand zum Vergleich herangezogen werden. Für die Neuronalen Netze bleibt der Aufwand nach dem Training konstant, d.h. die Simulationszahl ist unabhängig von der Zahl der Identifikationen. Bei den Optimierungsverfahren ist die Anzahl der Simulationsaufrufe von Fall zu Fall unterschiedlich und der Aufwand steigt mit jeder Identifikation. Die Frage ist, nach wievielen Identifikationen  $n$  ein Neuronales Netz weniger Simulationsaufwand gegenüber einem Optimierungsverfahren bedarf.

Werden die ausgewerteten Beispiele, angefangen von denjenigen mit den wenigsten Simulationen, sortiert angeordnet und die benötigte Simulationszahl summiert, ergibt sich der aus Sicht der Neuronalen Netze ungünstigste Fall. Die Diagramme in Abb. 2.23 zeigen, daß erst bei einer Dimension von  $D = 6$  die Methode der konjugierten Gradienten (CG) weniger Simulationen erfordert als das Neuronale Netz (NN), sofern nicht mehr als 4 Identifikationen vorgenommen werden. Die Schwarmssuche (SS), als schnellster Vertreter der betrachteten stochastischen Optimierungsverfahren, verzeichnet im Gegensatz zu der Methode der konjugierten Gradienten einen Zuwachs des Simulationsaufwands bei ansteigendem  $D$ , zu erkennen am Simulationsaufwand bei  $n = 40$  (s. Abb. 2.24).



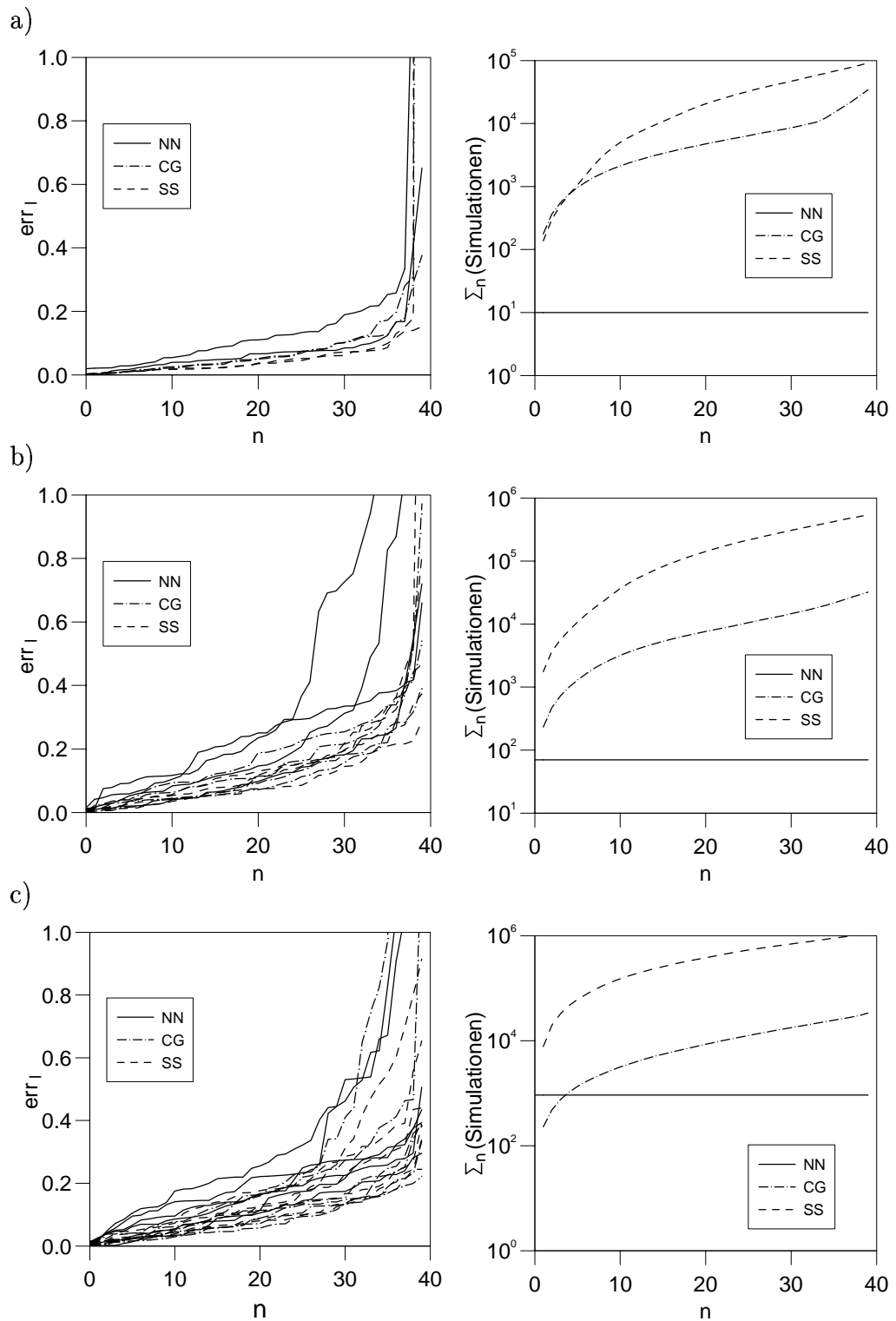


Abbildung 2.23: Fehlerverteilungen (links) und Anzahl der notwendigen Simulationen in Abhängigkeit von der Anzahl der Identifikationen (rechts): a)  $D = 2$ ; b)  $D = 4$ ; c)  $D = 6$ .

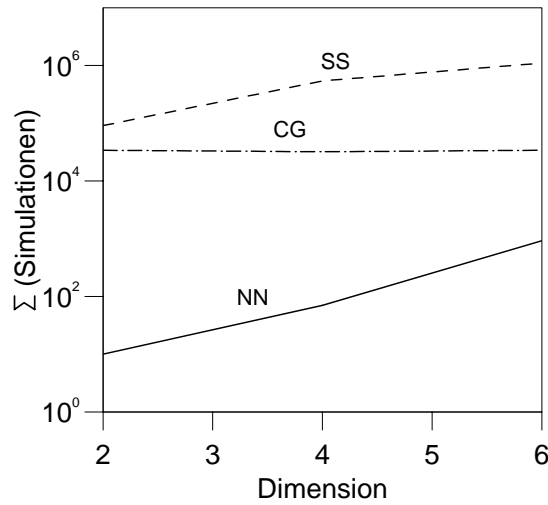


Abbildung 2.24: Vergleich der Anzahl an Simulationen für 40 Identifikationen in Abhängigkeit von der Dimension.

### 2.4.3 Vergleich für Daten mit Rauschen

Zur Betrachtung eines realistischeren Problems wird die Funktion

$$x = f(\xi, \mathbf{q}) = \sum_{d=1}^D e^{-q_d \xi} + r, \quad q_d < q_{d+1}, \quad D = 6 \quad (2.116)$$

betrachtet, wobei die Daten mit einer Zufallszahl  $r$  ( $-r_0 \leq r \leq r_0$ ) mit Rauschen beaufschlagt werden. Der Vergleich der Kurven  $x(\xi)$  für die identifizierten Parameter in Abb. 2.25 links zeigt bis  $r_0 = 0.3$  keine nennenswerten Unterschiede bezüglich der verwendeten Verfahren. Bei  $r_0 = 0.6$  fällt jedoch auf, daß die Kurve des Neuronalen Netzes sich deutlich von denen der Optimierungsverfahren (CG, SS) unterscheidet.

Werden die identifizierten Parameter über die exakten Parameter  $q_d$  (ohne Rauschen) aufgetragen (s. Abb. 2.25 rechts), so zeigt sich bei den Optimierungsverfahren mit wachsendem  $r_0$  eine Plateaubildung für  $q_1 \dots q_5$  während  $q_6$  immer mehr wächst. Das heißt, die Optimierungsverfahren unterscheiden immer weniger Parameter, da es an exakter Information mangelt.

Im Gegensatz dazu zeigen die Neuronalen Netze eine etwa gleichbleibende Identifikationsqualität für alle Parameter. Dies zeigt, daß in den Neuronalen Netzen die Erfahrung über den möglichen Verlauf von  $f(\xi, \mathbf{q})$  aus den Trainingsmustern gespeichert ist und zur Interpretation ungenauer Daten zur Verfügung steht. Aufgrund dieser Eigenschaft können Neuronale Netze auch zur Rekonstruktion unvollständiger Daten benutzt werden (s. z.B. [28]).

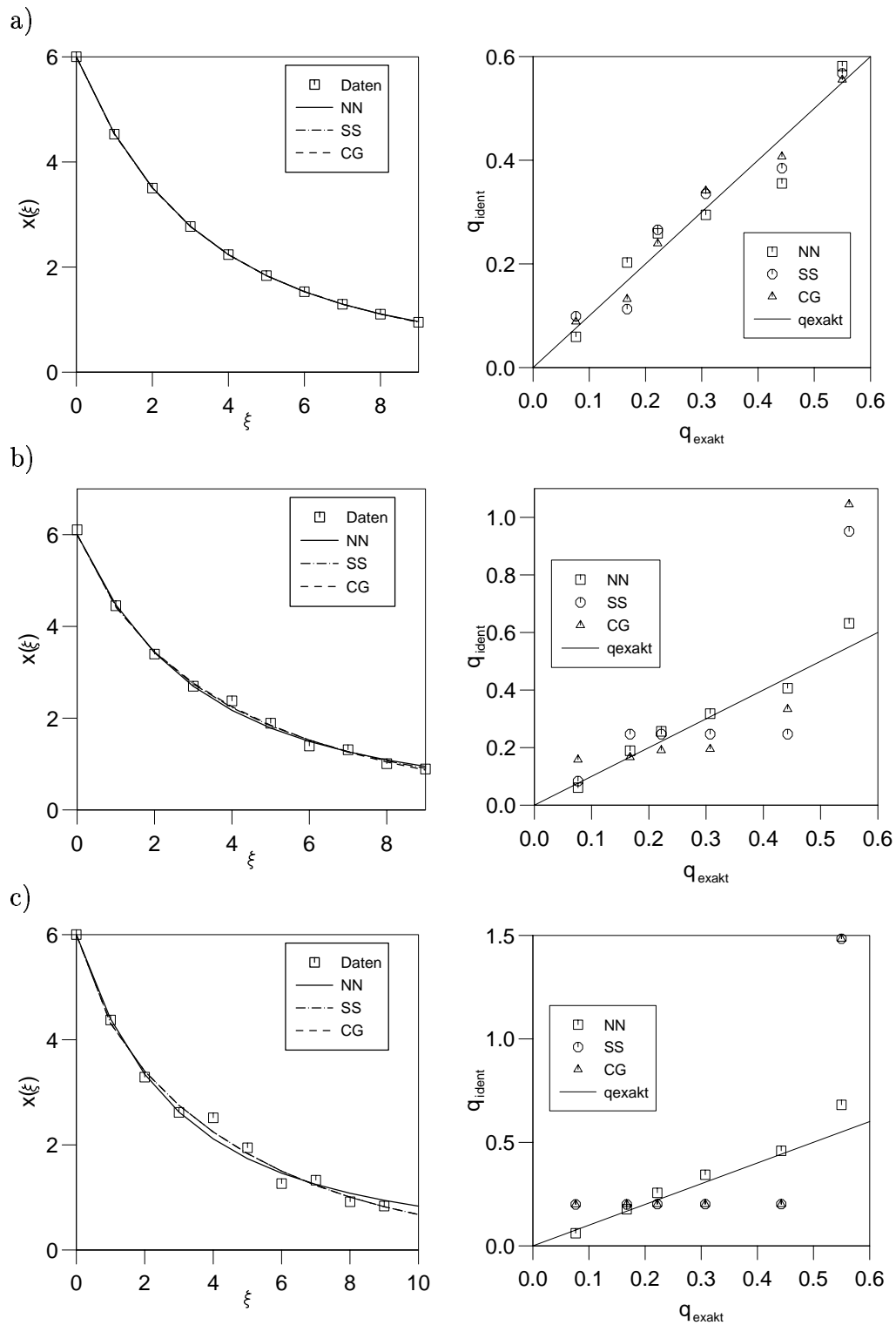


Abbildung 2.25: Verhalten von Optimierungsverfahren und Neuronalen Netzen bei zunehmend verrauschten Daten: Verlauf der Funktion  $x(\xi)$  (links); identifizierte Parameter (rechts); a)  $r_0 = 0$ ; b)  $r_0 = 0.3$ ; c)  $r_0 = 0.6$ .

# 3 Identifikation von Materialparametern der Viskoelastizität für mikrostrukturiertes Polyimid

Das in diesem Kapitel behandelte Identifikationsproblem macht wegen der Kleinheit des zu untersuchenden Bauteils die Anwendung besonders angepaßter Experimente notwendig. Bevor das konkrete Problem erläutert wird, soll daher ein kurzer Überblick über die verfügbaren Methoden der mechanischen Mikroprüftechnik gegeben werden.

## 3.1 Methoden der mechanischen Mikroprüftechnik

Mit der Miniaturisierung von Bauteilen oder ganzen Systemen wird in ein Gebiet vorgedrungen, in dem das mechanische Verhalten der Werkstoffe mit herkömmlichen Methoden nicht mehr zu ermitteln ist. Typische Geometrien sind dünne Schichten oder dreidimensionale Strukturen, bei denen eine (Waben, Federn) oder beide laterale Abmessungen (Stengel) sehr klein sind (siehe z.B. [20]).

Die Werkstoffe sind wegen der Größeneffekte [60, S. 91] und der Abhängigkeit von Herstellungsparametern [60, S. 60, S.108] in genau den Abmessungen auf ihre Eigenschaften zu untersuchen, in welchen sie zum Einsatz kommen. Für die mechanische Werkstoffprüfung bei solchen Abmessungen sind in den letzten Jahrzehnten spezielle Methoden entwickelt worden, wie z.B. der *Bulge-Test* für Folien [6], das *Nanoindentation-Experiment* für Schichten und kleine Volumina [71] oder auch Prüfgeräte, die aus dem zu prüfenden Material in der gleichen Abmessung aufgebaut sind (für *Mikrobiegung* siehe z.B. [96]). Bei diesen Meßverfahren werden die gesuchten Materialeigenschaften in unterschiedlicher Form in der Systemantwort abgebildet.

### Bulge-Test

Beim Bulge-Test wird die Membran (Folie) im Zentrum durch einen äquibiaxialen Spannungszustand ( $\sigma_r = \sigma_\varphi$ ) belastet. Es besteht der Zusammenhang [6]

$$\Delta p = \frac{4t\sigma_0}{r^2}h + \frac{8t}{3r^4} \frac{E}{1-\nu^2} h^3 \quad (3.1)$$

zwischen dem angelegten Differenzdruck  $\Delta p$ , der herstellungsbedingten Vorspannung in der Membran  $\sigma_0$ , der Membrandicke  $t$ , dem Radius der Membran  $r$  sowie dem reduzierten Modul  $E/(1 - \nu^2)$  in Abhängigkeit von der Membranauslenkung  $h$  im Zentrum. Dies gilt allerdings nur, solange die Deformation elastisch ist. Die Vorspannung  $\sigma_0$  muß durch ein anderes Experiment, z.B. dem Substrat-Curvature-Test [104] bestimmt werden.

### Mikrobiegung

Für den als schubstarr angenommenen einseitig eingespannten Biegebalken ergibt sich die Durchbiegung (siehe z.B. [61])

$$w = \frac{P}{E} \frac{4l^3}{bh^3}, \quad (3.2)$$

wobei  $P$  die Kraft,  $l$  die Hebellänge,  $h$  die Höhe in Biegerichtung und  $b$  die Breite des Balkens bezeichnen. Hier entstehen inhomogene Zug- und Schubbelastungen. Aus den Gleichungen (3.2) und (3.1) ist ersichtlich, daß zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls ein Biegeexperiment ausreichend ist, während die Querkontraktionszahl nur indirekt aus den beiden Experimenten Biegung und Bulge-Test ermittelt werden kann. Da hierfür aber unterschiedliche Experimente an unterschiedlichen Probengeometrien notwendig sind, ist das Ergebnis allerdings unsicher.

### Nanoindentation-Experiment

Die am universellsten einzusetzende, aber auch am kompliziertesten auszuwertende Methode ist das Nanoindentation-Experiment, bei dem eine kleine Diamantspitze in das zu untersuchende Material gedrückt wird. Mit einer solchen Versuchseinrichtung können Eigenschaften dünner Schichten gemessen werden [17]. Das Verfahren eignet sich aber auch zur Untersuchung einzelner Phasen eines Werkstoffs [18], zum Biegen von Mikrobalken [66] oder zur Verformung von Membranen. Dabei wird in der Regel die Kraft  $P$  vorgegeben und die Verschiebung der Prüfspitze  $h$  kontinuierlich gemessen (siehe z.B. [90, 12]). Anhand der globalen Größen  $P$  und  $h$  können Rückschlüsse auf das zugrundeliegende Materialverhalten gezogen werden.

Während das Identifikationsproblem für homogene Materialien sowie für Schichten Gegenstand der Kapitel 5 und 7 sein wird, soll in diesem Kapitel ein gemischtes Problem aus Eindruck und Membrandurchbiegung betrachtet werden. Es handelt sich hierbei konkret um die Identifikation der mechanischen Eigenschaften einer Platte aus Polyimid, die Bestandteil eines Mikrodrucksensors ist. Deren Eigenschaften werden benötigt, um den

Sensor bezüglich seines Meßeffektes zu bewerten [43]. Der Aufbau des Mikrodrucksensors ist in Abb. 3.1 skizziert.

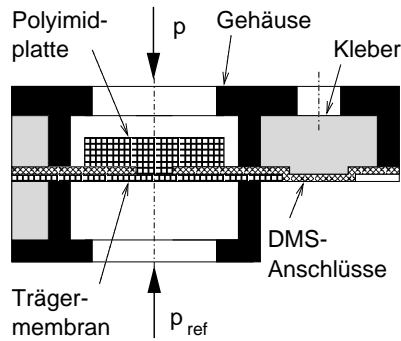


Abbildung 3.1: Skizze des Mikrodrucksensors.

### 3.2 Funktionsweise des Mikrodrucksensors

Der sich am Institut für Mikrostrukturtechnik (IMT) des Forschungszentrums Karlsruhe in Entwicklung befindliche Mikrodrucksensor mit Außenabmessungen von etwa  $5 \times 7 \text{ mm}^2$  soll Druckdifferenzen bis zu einem Bar messen. Der Meßeffekt wird durch die Durchbiegung einer Platte aus Polyimid erzielt. Diese Platte befindet sich auf einer im Gehäuse eingespannten Trägermembran (ebenfalls aus Polyimid), die durch einen Druckunterschied  $p - p_{ref}$  verformt wird. Der Spannungszustand in der Trägermembran bei dieser Belastung kommt dem äquibiaxialen, ebenen Zugspannungszustand beim Bulge-Test sehr nahe.

Zwischen der Platte und der Membran befinden sich Dehnungsmeßstreifen aus Gold, die entsprechend der Dehnung in der Randfaser der Platte ihren Widerstand ändern. Für die Platte und die Membran wurde ein Polymerwerkstoff ausgewählt, um eine leichte Deformierbarkeit und damit einen möglichst großen Meßeffekt zu erzielen. Das verwendete Polyimid hat in diesem Zusammenhang besondere optische Eigenschaften, die sich bei dem Herstellungsverfahren von Mikrostrukturen ausnutzen lassen [45]. Zusätzlich ist die elektrisch isolierende Eigenschaft zwingend, damit die Dehnungsmeßstreifen nicht kurzgeschlossen werden.

Von Polymeren ist jedoch bekannt, daß sie viskoelastisches Verhalten besitzen, welches z.B. mit rheologischen Modellen beschrieben werden kann (siehe z.B. [21]). Insgesamt besteht grundlegendes Interesse, die Materialparameter zur Charakterisierung solcher Polymere zu kennen.

### 3.3 Das verwendete Materialmodell

Bei viskoelastischem Materialverhalten liegt die Beziehung zwischen Spannung und Dehnung in geschwindigkeitsabhängiger Form vor. Die Modellantwort zeigt daher eine geschwindigkeitsabhängige Dehnungs-Spannungs-Hysterese, die bei beliebig kleiner Belastungsgeschwindigkeit verschwindet. Für grundlegende Informationen zum Verhalten von linear viskoelastischen Systemen sei auf [27] und [32] verwiesen.

#### 3.3.1 Das Drei-Parameter-Modell

Das viskoelastische Verhalten kann mit dem Drei-Parameter-Modell, das in Abb. 3.2 dargestellt ist, erläutert werden. An dieser Stelle sei angemerkt, daß im Fall kleiner Deformationen das Drei-Parameter-Modell wahlweise wie in Abb. 3.2 mit einem *Kelvin-Element* (Feder und Dämpfer parallel geschaltet) in Reihe mit einer Feder oder aber mit einem *Maxwell-Element* (Feder und Dämpfer in Reihe geschaltet) parallel mit einer Feder diskutiert werden kann. Im Fall großer Deformationen ergeben sich jedoch signifikante Unterschiede sowohl bei den Effekten erster als auch zweiter Ordnung (siehe [56, 57]).

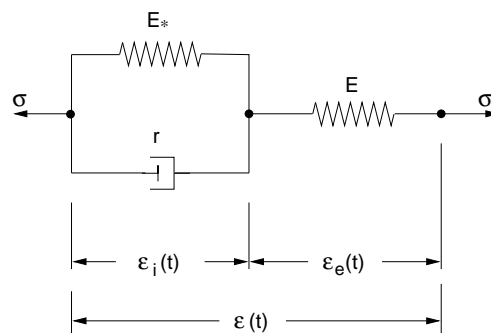


Abbildung 3.2: Das Drei-Parameter-Modell hier als Kelvin-Element in Reihe mit einer Feder.

Für das Drei-Parameter-Modell gemäß Abb. 3.2 gilt unter der Annahme linearer Federn mit den Parametern  $E$  und  $E_*$  und einem linearen Dämpfer mit dem Parameter  $r$ :

$$\dot{\sigma} + \frac{E + E_*}{r} \sigma = \frac{EE_*}{r} \varepsilon + E \dot{\varepsilon}. \quad (3.3)$$

Mit der Definition des Parameters

$$\eta := \frac{E + E_*}{r} \quad (3.4)$$

und dem Gleichgewichtsmodul

$$E^{(G)} := \frac{EE_*}{E + E_*} \quad (3.5)$$

folgt aus Gl. (3.3)

$$\dot{\sigma} + \eta\sigma = \eta E^{(G)}\varepsilon + E\dot{\varepsilon}. \quad (3.6)$$

Aus der Integration von (3.6) mit einer konstanten Dehnungsgeschwindigkeit  $\dot{\varepsilon} > 0$  und der Anfangsbedingung  $\sigma(\varepsilon = 0) = 0$  ergibt sich die Spannungsantwort

$$\sigma = E^{(G)}\varepsilon + (E - E^{(G)}) \left[ \frac{\dot{\varepsilon}}{\eta} \left( 1 - e^{-\frac{\eta}{\dot{\varepsilon}}\varepsilon} \right) \right]. \quad (3.7)$$

Bei unendlich schneller Belastung ( $\dot{\varepsilon} \rightarrow \infty$ ), verhält sich der Dämpfer starr und es resultiert das spontane Elastizitätsgesetz

$$\lim_{\dot{\varepsilon} \rightarrow \infty} \sigma = \sigma^\infty = E\varepsilon. \quad (3.8)$$

Bei sehr langsamer Belastung ( $\dot{\varepsilon} \rightarrow 0$ ) leistet der Dämpfer keinen Widerstand und es ergibt sich

$$\lim_{\dot{\varepsilon} \rightarrow 0} \sigma = \sigma^{(G)} = E^{(G)}\varepsilon. \quad (3.9)$$

In Abb. 3.3 ist die Spannungsantwort bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten  $\dot{\varepsilon}$  skizziert.

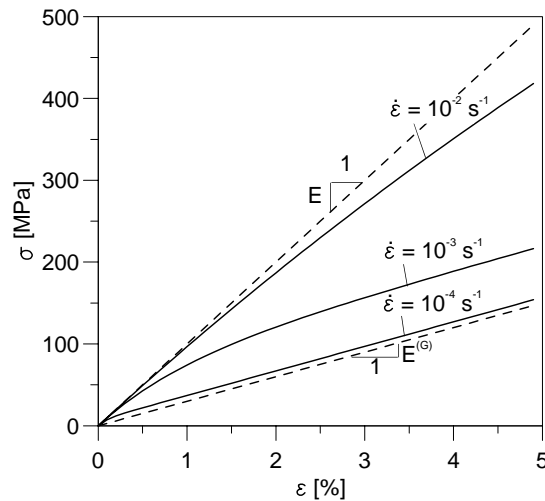


Abbildung 3.3: Spannungsantwort bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten  $\dot{\varepsilon}$  ( $E = 10 \text{ GPa}$ ,  $E^{(G)} = 3 \text{ GPa}$ ,  $\eta = 0.1 \text{ s}^{-1}$ ).

Ein dehnungsgesteuerter Belastungsprozeß mit  $\varepsilon = \varepsilon_0 = \textit{konst}$  heißt Relaxationsprozeß (s. Abb. 3.4) und besitzt die Lösung

$$\sigma(t - t_0) = E^{(G)}\varepsilon_0 + (\sigma_0 - E^{(G)}\varepsilon_0)e^{-\eta t}, \quad (3.10)$$



wobei  $t_0$  den Zeitpunkt zu Beginn der Relaxation bezeichnet. Dabei ist  $\sigma_0$  die Spannung zu Beginn der Relaxation  $\sigma_0 = \sigma(t_0)$ . Die Spannung  $\sigma$  nähert sich asymptotisch dem Punkt  $(\varepsilon_0, E^{(G)}\varepsilon_0)$  auf der Gleichgewichtsgeraden (s. Abb. 3.5a).

Wird dagegen nach der Belastungsphase die Spannung  $\sigma = \sigma_0 = konst$  konstant gehalten, resultiert ein Kriechprozeß, wobei die Dehnung weiter nach

$$\varepsilon(t - t_0) = \frac{\sigma_0}{E^{(G)}} + \left(\varepsilon_0 - \frac{\sigma_0}{E^{(G)}}\right) e^{-\frac{E^{(G)}}{E}\eta t} \quad (3.11)$$

zunimmt. Die Dehnung nähert sich somit asymptotisch dem Punkt  $(\sigma_0/E^{(G)}, \sigma_0)$  auf der Gleichgewichtsgeraden (s. Abb. 3.5b).

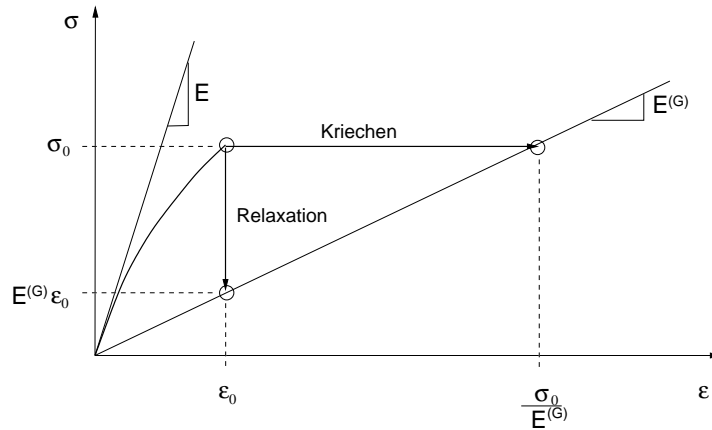


Abbildung 3.4: Relaxations- und Kriechprozeß.

### 3.3.2 Verallgemeinerung des Drei-Parameter-Modells

Für  $\varepsilon(t=0) = \sigma(t=0) = 0$  folgt durch Einführen eines integrierenden Faktors aus (3.6)

$$\sigma e^{\eta t} = \int_0^t \left[ \eta E^{(G)} e^{\eta \tau} \varepsilon(\tau) + E \dot{\varepsilon}(\tau) e^{\eta \tau} \right] d\tau . \quad (3.12)$$

Mit der partiellen Integration

$$\int_0^t \eta E^{(G)} e^{\eta \tau} \varepsilon(\tau) d\tau = E^{(G)} [e^{\eta \tau} \varepsilon(\tau)]_0^t - \int_0^t E^{(G)} e^{\eta \tau} \dot{\varepsilon}(\tau) d\tau \quad (3.13)$$

erhält man nach wenigen Schritten

$$\sigma(t) = \int_0^t \left[ E^{(G)} + (E - E^{(G)}) e^{-\eta(t-\tau)} \right] \dot{\varepsilon}(\tau) d\tau \quad (3.14)$$

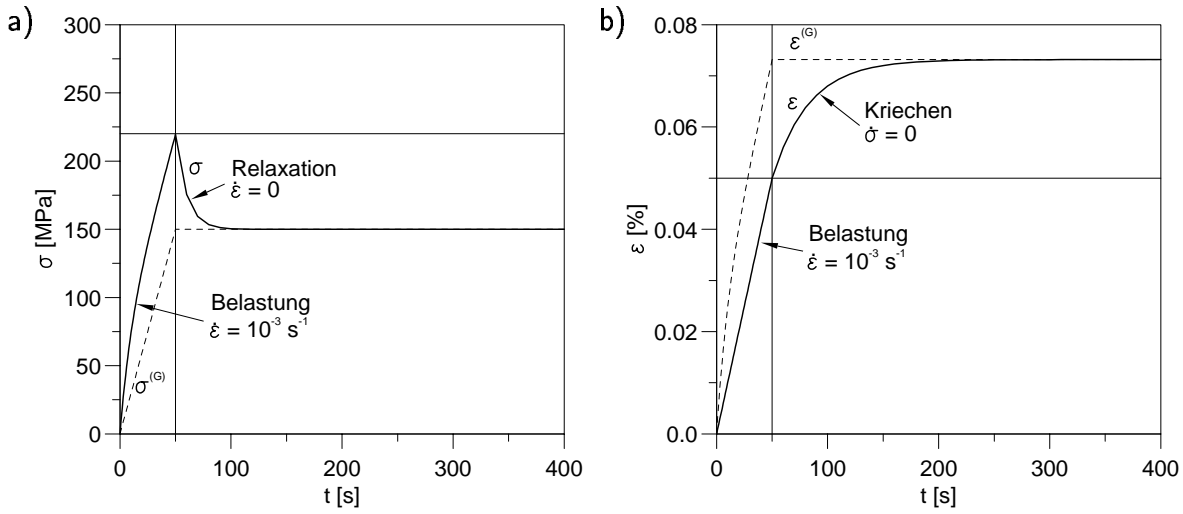


Abbildung 3.5: Zeitlicher Verlauf a) eines Relaxationsprozesses; b) eines Kriechprozesses nach vorangegangener Belastung mit endlicher Geschwindigkeit.

bzw.

$$\sigma(t) = \int_0^t \phi(t - \tau) \dot{\varepsilon}(\tau) d\tau, \quad (3.15)$$

wobei

$$\phi(t) := E^{(G)} + (E - E^{(G)})e^{-\eta t}. \quad (3.16)$$

Die Funktion  $\phi(t)$  heißt Relaxationsfunktion des Drei-Parameter-Modells. Unter Verwendung der Definition (3.5) folgt

$$\phi(t) = E \left( 1 - \frac{E^{(G)}}{E_*} (1 - e^{-\eta t}) \right) \quad (3.17)$$

oder

$$\phi(t) = \phi_0 \left( 1 - \varphi_1 \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_1}} \right) \right), \quad (3.18)$$

mit

$$\phi_0 := E, \quad (3.19)$$

$$\varphi_1 := \frac{E^{(G)}}{E_*} = \frac{E}{E + E_*}, \quad 0 < \varphi_1 < 1, \quad (3.20)$$

$$\tau_1 := \frac{1}{\eta} = \frac{r}{E + E_*}. \quad (3.21)$$

Für die Extremfälle  $\varphi_1 = 0$  bzw.  $\varphi_1 = 1$  degradiert das Drei-Parameter-Modell zu einem linear elastischen Körper bzw. zu einem Maxwell-Element (vikoelastisches Fluid). Die formale Verallgemeinerung von (3.18) durch Einführung der Summe von  $n$  Gliedern

$$\phi(t) = \phi_0 \left( 1 - \sum_{i=1}^n \varphi_i \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_i}} \right) \right), \quad 0 < \sum \varphi_i < 1 \quad (3.22)$$

entspricht dem Hinzufügen von  $n - 1$  weiteren Kelvin-Elementen zum Drei-Parameter-Modell, wie es in Abb. 3.6 dargestellt ist.

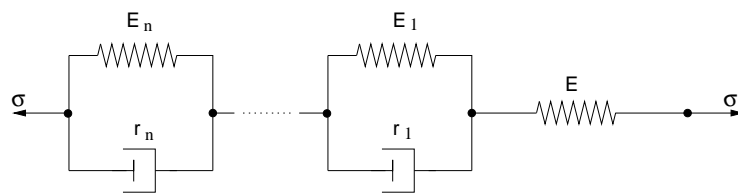


Abbildung 3.6: Verallgemeinertes Drei-Parameter-Modell.

### 3.3.3 Dreidimensionale Formulierung

Es bezeichnen  $\mathbf{T}$  den Cauchy'schen Spannungstensor und  $\mathbf{E}$  den linearisierten Green'schen Verzerrungstensor. Zur Beschreibung des viskoelastischen Verhaltens bei mehrachsiger Belastung werden Spannungstensor und Verzerrungstensor in einen deviatorischen Anteil und einen Spur-Anteil gemäß

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^D + \frac{1}{3} (Sp\mathbf{T}) \mathbf{1} \quad (3.23)$$

und

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^D + \frac{1}{3} (Sp\mathbf{E}) \mathbf{1} \quad (3.24)$$

zerlegt, wobei  $\mathbf{1}$  den Einheitstensor 2. Stufe bezeichnet. Die entsprechende Zerlegung des Elastizitätsgesetzes

$$\mathbf{T} = 2\mu\mathbf{E} + \lambda (Sp\mathbf{E}) \mathbf{1} \quad (3.25)$$

mit den Lamé'schen Konstanten  $\mu$  und  $\lambda$  in einen deviatorischen Anteil ergibt

$$\mathbf{T}^D = 2\mu\mathbf{E}^D \quad (3.26)$$

sowie einen Spur-Anteil

$$(Sp\mathbf{T}) = K (Sp\mathbf{E}), \quad (3.27)$$

mit dem Schubmodul  $\mu$  und dem Kompressionsmodul

$$K := \frac{2\mu + 3\lambda}{3}. \quad (3.28)$$

In Analogie zur eindimensionalen Darstellung (3.15) wird die allgemeine Stoffgleichung der linearen isotropen Viskoelastizität durch

$$\mathbf{T}(t) = \int_0^t 2\mu(t - \tau) \dot{\mathbf{E}}^D(\tau) d\tau + \int_0^t K(t - \tau) (Sp \dot{\mathbf{E}}(\tau) \mathbf{1}) d\tau \quad (3.29)$$

definiert. In dieser Beziehung wird das Relaxationsverhalten durch den zeitabhängigen Schubmodul  $\mu$  und den zeitabhängigen Kompressionsmodul  $K$  beschrieben. Die beiden Relaxationsfunktionen  $\mu(t)$  und  $K(t)$  lassen sich durch

$$\mu(t) = \mu_0 \left( 1 - \sum_{i=1}^{n_\mu} \mu_i \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_i^\mu}} \right) \right) \quad (3.30)$$

und

$$K(t) = K_0 \left( 1 - \sum_{i=1}^{n_k} k_i \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau_i^k}} \right) \right) \quad (3.31)$$

darstellen. Das Viskoelastizitätsgesetz (3.29)-(3.31) ist in dem Finite Elemente Programm ABAQUS [41, S. 10.6.1-1 – 10.6.1-8] standardmäßig implementiert, wobei jedoch  $\tau_i^\mu = \tau_i^k = \tau_i$  angenommen wird.

Der spontane Schubmodul  $\mu_0$  und der spontane Kompressionsmodul  $K_0$  werden aus dem spontanen Elastizitätsgesetz gemäß

$$\mu_0 = \frac{E_0}{2(1 + \nu_0)} \quad (3.32)$$

und

$$K_0 = \frac{E_0}{3(1 - 2\nu_0)} \quad (3.33)$$

berechnet. Zur Definition eines viskoelastischen Materials müssen in ABAQUS die Materialparameter  $E_0$ ,  $\nu_0$ ,  $\mu_i$ ,  $k_i$  und  $\tau_i$  angegeben werden.

Der Grenzübergang  $t \rightarrow \infty$  für die Gleichungen (3.30) und (3.31) liefert

$$\mu^{(G)} = \frac{E^{(G)}}{2(1 + \nu^{(G)})} = \mu_0 \left( 1 - \sum_{i=1}^{n_\mu} \mu_i \right), \quad (3.34)$$

$$K^{(G)} = \frac{E^{(G)}}{3(1 - 2\nu^{(G)})} = K_0 \left( 1 - \sum_{i=1}^{n_k} k_i \right), \quad (3.35)$$

woraus sich der Gleichgewichtsmodul  $E^{(G)}$  sowie die Gleichgewichts-Querkontraktionszahl  $\nu^{(G)}$  anhand der Gleichungen

$$E = \frac{9K\mu}{\mu + 3K}, \quad (3.36)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \frac{3K - 2\mu}{3K + \mu} \quad (3.37)$$

berechnen lassen.

## 3.4 Identifikation der Materialparameter

Ein Nanoindenter kann auf zwei Weisen eingesetzt werden, um die Polyimidplatte mit einer mechanischen Belastung zu beaufschlagen. Die erste Möglichkeit besteht darin, einen Eindruck in die aus dem Sensor herausgelöste und fest unterlegte Platte durchzuführen. Dadurch entstehen Kompressionsbelastungen unter dem Prüfkörper, aber auch Scherungen im Bereich des Kontaktrandes. Mit diesem Experiment sollten sowohl die Parameter in (3.31) als auch in (3.30) zu ermitteln sein. Die identifizierten Werte beziehen sich jedoch wegen der lokalen Deformation ausschließlich auf Eigenschaften der dicken Platte, und es bildet sich kein äquibiaxialer Zugspannungszustand aus, wie es für den Betrieb des Sensors charakteristisch ist. Alternativ hierzu ist ein Auslenken der Platte im Sensorgehäuse durch einen zentrischen Eindruck auf der Oberseite möglich, wodurch sich ein äquibiaxialer ebener Zugspannungszustand ähnlich dem im Betrieb des Sensors ausbildet.

### 3.4.1 Experimentelle Ermittlung der Systemantwort

Das Experiment wurde mit einem registrierenden Härtemeßgerät (UMIS 2000) durchgeführt. Um große Deformationen zu vermeiden, wurde ein Prüfkörper mit kugelförmiger Diamantspitze und einem Radius  $R = 15\mu\text{m}$  verwendet. Dieser Radius entspricht in etwa der Dicke der Polyimidplatte. Die Versuchsanordnung ist in Abb. 3.7a skizziert. Zur Vermeidung einer Verschmutzung oder Beschädigung der Polyimidplatte wurde darauf verzichtet, die Oberseite des Sensorgehäuses zu entfernen. Mit Hilfe eines schlanken 90°-Prüfkörpers konnte durch die Druckeinlaßöffnung des Gehäuses auf die Platte gedrückt werden. Der nach dem Experiment zurückbleibende Abdruck auf der Platte wurde mit einem Mikroskop vermessen. Der Aufsetzpunkt war mit guter Genauigkeit zentriert. Die

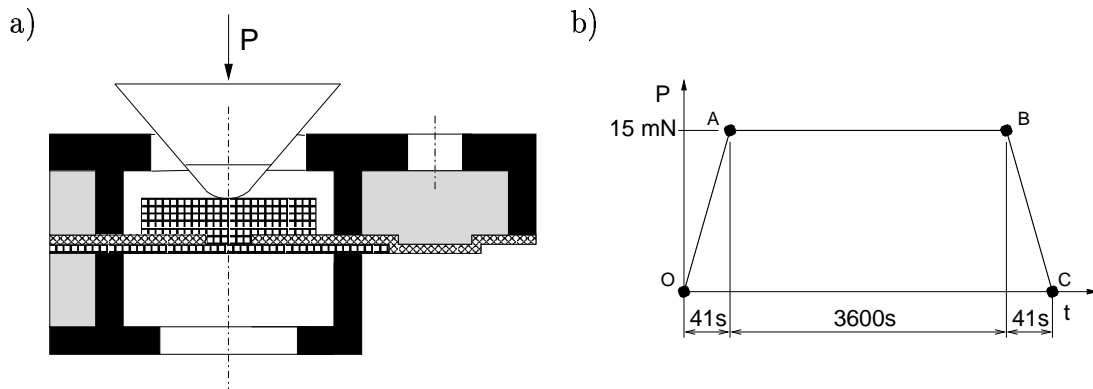


Abbildung 3.7: Experimentelle Realisierung: a) Skizze des Experiments; b) Prozeßführung.

Größe des Abdrucks mit einem Durchmesser von  $65 \mu\text{m}$  wurde bei der Modellierung der Randbedingung in der Finite Elemente Simulation berücksichtigt.

Die Prozeßführung des Experiments ist in Abb. 3.7b skizziert und besteht aus einer Belastungsphase (O–A), einer Haltephase (A–B) mit  $P = \text{konst}$  sowie einer Entlastungsphase (B–C). Dabei entspricht die Kraft  $P(t)$  der unabhängigen Prozeßgröße und die Verschiebung  $h(t)$  an der Prüfspitze der Systemantwort. Während die Belastungsphase O–A schnell durchgeführt wird, um dem spontanen Verhalten nahezukommen, liefert die Haltephase die Effekte der Kelvin-Elemente. Die Systemantwort nähert sich schließlich mit zunehmender Zeit asymptotisch dem Gleichgewichtszustand. Somit sind im Verlauf der Verschiebung  $h(t)$  während der Haltephase A–B die Effekte aller Materialparameter enthalten, die für das betrachtete Problem relevant sind.

Die experimentell gemessene Verschiebungs-Kraft-Trajektorie ist in Abb. 3.8a dargestellt. Es zeigt sich, daß die Verschiebung in der Haltephase weiter zunimmt. Der Verlauf der Verschiebung über der Zeit in Abb. 3.8b deutet auf die Existenz eines oberen Grenzwertes hin. Da dieses Verhalten in Analogie zu einem Kriechprozeß, wie in Abb. 3.5b dargestellt, gesehen werden kann, soll die entsprechende Bezeichnungsweise im folgenden für die Haltephase A–B übernommen werden. Somit liegen deutliche Hinweise darauf vor, daß das Materialverhalten mit einem Materialmodell der Viskoelastizität hinreichend gut beschrieben werden kann.

### 3.4.2 Finite Elemente Simulationen

Für die Simulation des Experimentes wurde die Geometrie der Platte und der Trägermembran realitätsgetreu modelliert (s. Abb. 3.9, [43]). Die Abmessungen von Platte und

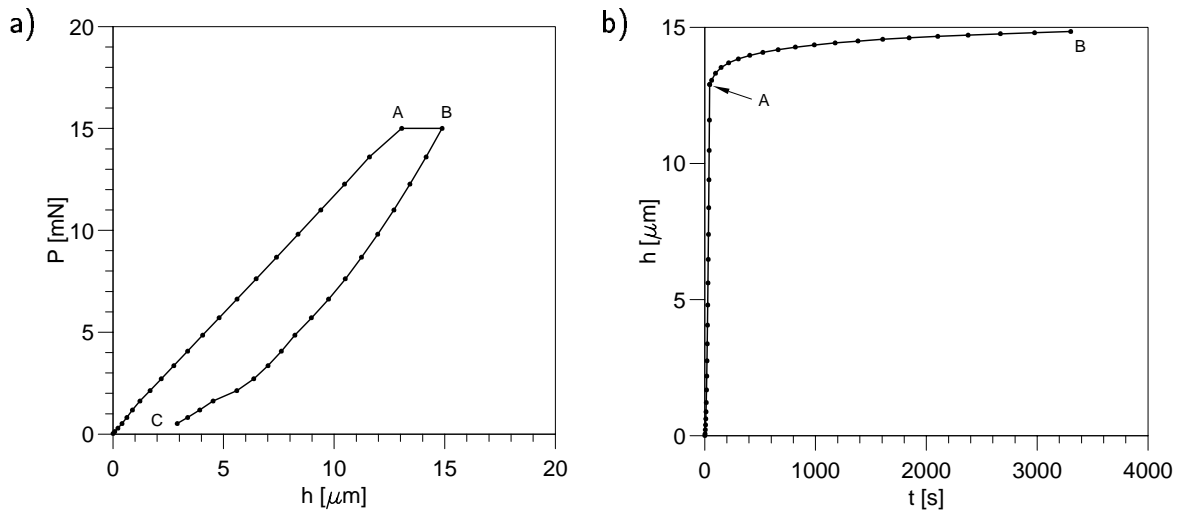


Abbildung 3.8: Gemessene Systemantwort für den Prozeß aus Abb. 3.7b: a) Verschiebungskraft-Trajektorie; b) Kriechverhalten.

Trägermembran betragen  $d = 21.6 \mu\text{m}$  und  $r = 440 \mu\text{m}$  bzw.  $d = 1.5 \mu\text{m}$  und  $r = 560 \mu\text{m}$  in der Dicke und im Radius. Die im Experiment inhomogene Druckverteilung im Kontaktgebiet wird im Finite Elemente Modell durch einen gleichmäßigen Druck  $p$  approximiert, der auf eine kreisförmige Fläche wirkt. Der Radius dieser Fläche ist im Modell  $33.6 \mu\text{m}$  und entspricht den ersten acht Elementen.

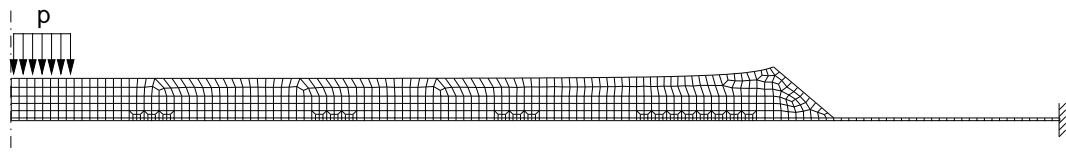


Abbildung 3.9: Finite Elemente Modell für die numerische Simulation

Die Finite Elemente Simulation wurde zunächst mit den vom Hersteller angegebenen makroskopischen Materialparametern ( $E = 3 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.31$ , linear elastisches Materialverhalten [87]) durchgeführt. Zur Lastaufbringung wurde der zeitliche Verlauf  $P(t)$  aus dem Experiment verwendet, womit die Belastungsgeschwindigkeit in jedem Belastungsschritt korrekt vorgegeben wird. Die berechnete Verschiebung ist in Abb. 3.10 dargestellt. Bei einer linear elastischen Finite Elemente Simulation ist natürlich kein Kriechen zu beobachten. Bemerkenswert ist jedoch die deutliche Diskrepanz zwischen den Verschiebungsbeträgen der Kurven. Die Verschiebung ist bei der Finite Elemente Rechnung wesentlich größer als beim Experiment, d.h. in der Simulation werden Platte und Membran zu nachgiebig modelliert.

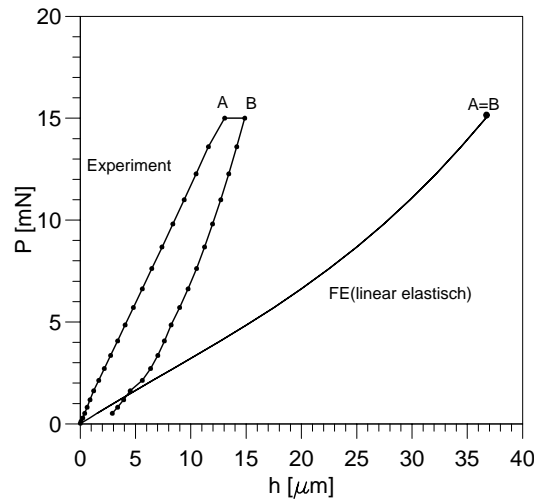


Abbildung 3.10: Gemessene Verschiebungs-Kraft-Trajektorie sowie Lösung der Finite Elemente Rechnung für linear elastisches Materialverhalten mit Literaturdaten.

### 3.4.3 Anwendung Neuronaler Netze

Da es sich bei der vorliegenden Identifikation um ein sehr spezielles Problem handelt, wäre es nicht sinnvoll, viele Muster über einen großen Wertebereich der Materialparameter zu erzeugen. Vielmehr werden zunächst die Parameter für  $n = n_\mu = n_k = 1$ , d.h. für ein Drei-Parameter-Modell, empirisch grob justiert. Hierbei wird der Literaturwert  $\nu = 0.31$  übernommen. Bereits nach wenigen Simulationen ist ein bestmöglicher Verlauf erzielt und es ist folgendes festzustellen (siehe Abb. 3.11a):

1. Parameter  $k_1$  zeigt deutlichen Effekt.
2. Parameter  $\mu_1$  zeigt vernachlässigbaren Effekt.
3. Mit den Parametern  $E_0$ ,  $\nu_0$  und  $k_1$  kann die Kriechkurve entweder nur für  $t \rightarrow t_A$  oder nur für  $t \rightarrow t_B$  gut wiedergegeben werden.

Wegen der Unvollständigkeit der Systemantwort bezüglich des Schubmoduls wird die Identifikation im folgenden auf den Kompressionsmodul beschränkt. Die bisher berechneten Kurvenverläufe zeigen, daß das Drei-Parametermodell nicht ausreicht, um den gesamten Verlauf der Kriechkurve zu beschreiben. Somit wird für die weiteren Simulationen  $n = 2$  und mangels Schubeffekte  $\mu_1 = \mu_2 = 0$  angenommen, womit das Verhalten ausschließlich durch Volumenkriechen modelliert wird.

Eine empirische Wahl der entsprechenden Materialparameter führte zu den in Tab. 3.1 angegebenen Werten. Parametersatz Kr1 entspricht dabei dem „optimalen“ Parame-



tersatz für das Drei-Parameter-Modell (s. Abb. 3.11a). Bis auf eine Ausnahme (Kr2) wurden die Materialparameter  $E_0$ ,  $\nu_0$ ,  $\mu_1 = 0$  und  $\mu_2 = 0$  für alle folgenden Simulationen konstant gehalten, da durch deren Veränderung keine Verbesserung erzielt wurde. Die berechneten Kriechkurven sind in Abb. 3.11b dargestellt.

Parametersatz	$E_0$ [GPa]	$\nu_0$	$k_1$	$\tau_1$ [s]	$k_2$	$\tau_2$ [s]
Kr1	25.5	0.31	0.47	255.	0.	0.
Kr2	26.0	0.31	0.235	200.	0.235	350.
Kr3	25.5	0.31	0.19	180.	0.28	650.
Kr4	25.5	0.31	0.19	120.	0.28	1300.
Kr5	25.5	0.31	0.19	50.	0.28	1400.
Kr6	25.5	0.31	0.19	50.	0.28	1200.
Kr7	25.5	0.31	0.20	50.	0.27	1250.
Kr8	25.5	0.31	0.22	50.	0.25	1250.
Kr9	25.5	0.31	0.22	50.	0.23	1250.

Tabelle 3.1: Materialparametersätze, die durch manuelle Anpassung an den experimentellen Verlauf entstanden sind.

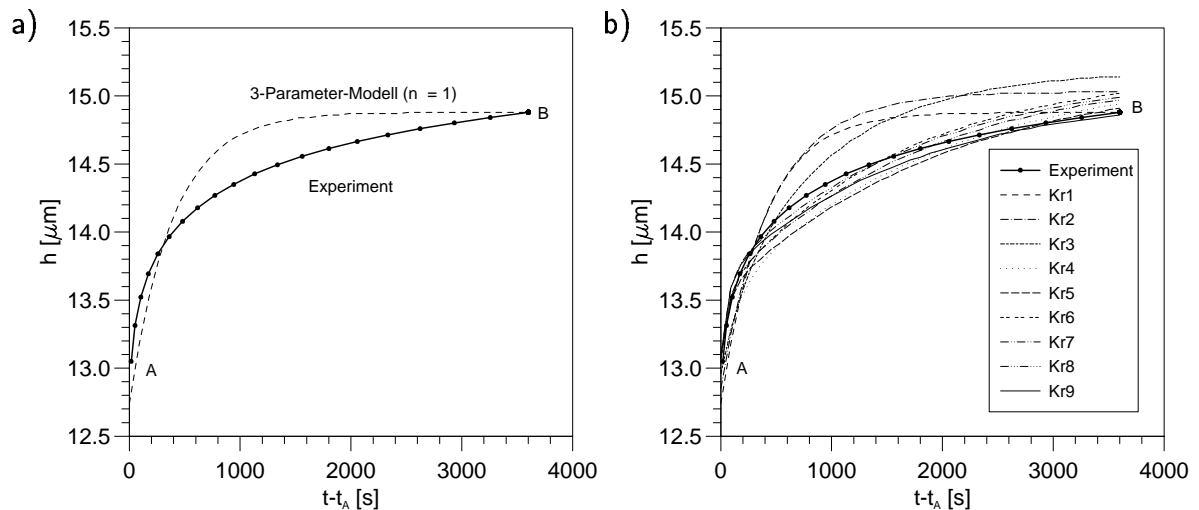


Abbildung 3.11: Experimentell gemessene und mit empirisch gewählten Materialparametern berechnete Kriechkurven: a) Drei-Parameter-Modell ( $n = 1$ ); b) verallgemeinertes Drei-Parameter-Modell ( $n = 2$ ).

Mit den so entstandenen Materialparametersätzen kann die experimentell gemessene Kriechkurve im Vergleich zu dem Drei-Parameter-Modell gut, nicht aber in der Gesamt-

heit zufriedenstellend wiedergegeben werden. Die manuelle Variation der Materialparameter bringt jedoch ab diesem Punkt keine Verbesserung mehr, da man durch Probieren an einem Punkt etwas Verbesserung erzielen kann, aber gleichzeitig an einem anderen Punkt das Ergebnis schlechter wird. Aus diesem Grund wird nun dazu übergegangen, ein Neuronales Netz mit der gewonnenen Erfahrung in Form der bis jetzt produzierten Muster zu trainieren und damit die Materialparameter genauer zu bestimmen.

### Eingabedefinition

Als Eingabedaten dienen die Verschiebungswerte

$$x_i := h(t_i), \quad i = 1 \dots 20, \quad (3.38)$$

wobei die Zeiten  $t_i$  den in Tabelle 3.2 angegebenen Werten entsprechen und welche gleichermaßen bei der Abtastung der Verschiebung im Experiment zugrunde lagen. Da das zu trainierende Neuronale Netz keinerlei Anspruch auf Allgemeingültigkeit haben soll, besteht keine Notwendigkeit, die Eingabedaten in dimensionsloser Form anzugeben.

$i$	1	2	3	4	5
$t_i$ [s]	17.14	51.43	102.86	171.43	257.14
$i$	6	7	8	9	10
$t_i$ [s]	360.00	480.00	617.14	771.43	942.86
$i$	11	12	13	14	15
$t_i$ [s]	1131.43	1337.14	1560.00	1800.00	2057.14
$i$	16	17	18	19	20
$t_i$ [s]	2331.43	2622.86	2931.43	3257.14	3600.00

Tabelle 3.2: Zeitpunkte der Abtastung der Verschiebung im Experiment.

### Ausgabedefinition

Die Materialparameter

$$(y_1, y_2, y_3, y_4) := (k_1, \tau_1, k_2, \tau_2) \quad (3.39)$$

definieren den Ausgabevektor. Auch hier stellen die Konstanten  $\tau_1$  und  $\tau_2$  dimensionsbehaftete Größen dar, was bei der sehr speziellen Identifikationsaufgabe keine Einschränkung darstellt. Die übrigen Materialparameter  $E_0$ ,  $\nu_0$ ,  $\mu_1$  und  $\mu_2$  werden von dem

Neuronalen Netz nicht bestimmt. Sie stellen für die betrachteten Trainingsmuster Kr3 bis Kr9 konstante Zahlen dar und sind als solche in der Abbildungsvorschrift des Neuronalen Netzes nach dem Training enthalten.

### Training und Verifikation

Für das Training des Netzes wurden die Simulationsdaten aus den Materialparametersätzen Kr3 bis Kr9, also insgesamt nur 7 Muster, verwendet.

Da wegen der geringen Zahl an Mustern keine Verifikationsmuster zur Verfügung gestellt werden können, werden drei Trainingsläufe durchgeführt und die jeweiligen Netze gespeichert. Aus dem Vergleich der Ergebnisse dieser drei Netze kann somit Aufschluß über die Eindeutigkeit der Identifikation gewonnen werden.

Die drei Netze sind bezüglich der Anordnung der Neuronen identisch aufgebaut und bestehen jeweils aus drei Schichten, einer Eingabeschicht, einer verdeckten Schicht sowie einer Ausgabeschicht. Die Anzahl der Neuronen beträgt 20 in der Eingabeschicht, sechs in der verdeckten Schicht und vier in der Ausgabeschicht.

In Tab. 3.3 sind die Ergebnisse, die von den drei Neuronalen Netzen für die Materialparameter geliefert wurden, angegeben. Die unterschiedlichen Ergebnisse resultieren aus den zu Beginn des Trainingsprozesses zufällig gewählten synaptischen Gewichten. Die Streuung ist jedoch so gering, daß die Identifikation als eindeutig betrachtet werden kann. Mit den Mittelwerten der von den drei Neuronalen Netzen bestimmten Materialparametern (s. Tab. 3.3) und den festgelegten Materialparametern  $E_0 = 25.5$  GPa,  $\nu_0 = 0.31$  und  $\mu_1 = \mu_2 = 0$  wurde das Experiment nochmals simuliert. Der gesamte Prozeß, bestehend aus Belastung, Kriechphase und Entlastung, ist in den Abbildungen 3.12a zu sehen. Der Verlauf der Kriechkurve ist in 3.12b dargestellt.

Es ist zu erkennen, daß das Kriechverhalten mit den identifizierten Materialparametern

$E_0 = 25.5$ GPa	$k_1$	$\tau_1$	$k_2$	$\tau_2$	$E^{(G)}$	$\nu^{(G)}$
$\nu_0 = 0.31$	[-]	[s]	[-]	[s]	[GPa]	[-]
NN1	0.231	89.19	0.219	1046.78	23.10	0.187
NN2	0.228	75.27	0.222	1139.03	23.10	0.187
NN3	0.227	76.21	0.225	1089.57	23.08	0.186
Mittelwert	0.229	80.2	0.222	1092.	23.09	0.187

Tabelle 3.3: Die von drei verschiedenen Neuronalen Netzen gelieferten Materialparameter.

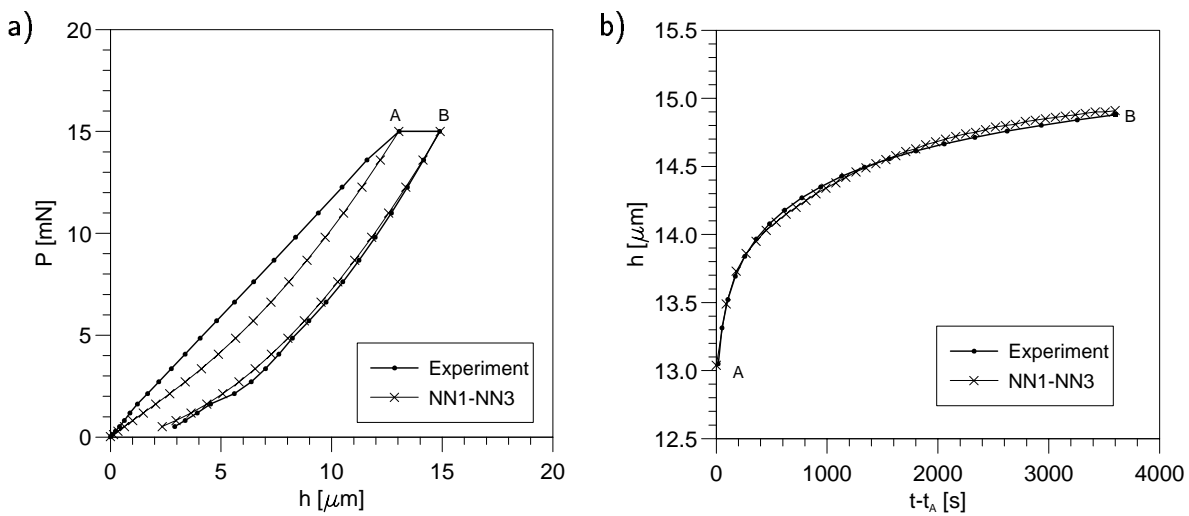


Abbildung 3.12: Experimentell bestimmte und mit viskoelastischem Materialverhalten berechnete Kriechkurve.

sehr gut wiedergegeben wird. Die hierfür äußerst geringe Anzahl von insgesamt neun Finite Elemente Simulationen ist wahrscheinlich nicht mit einem Optimierungsverfahren zu unterbieten. Das bedeutet, daß selbst im Fall einer einmalig vorzunehmenden Identifikation der Einsatz von Neuronalen Netzen von Vorteil sein kann (vgl. Abschnitt 2.4.2).

Wird mit den identifizierten Materialparametern die gesamte Lastgeschichte simuliert und der resultierende Verlauf mit dem Experiment verglichen, zeigen sich qualitative Unterschiede im Kurvenverlauf des Belastungsvorgangs. Während die Finite Elemente Simulation eine monoton zunehmende Steigung aufweist, stellt sich im Experiment nach einer anfänglich deutlich größeren Steigung eine Steifigkeitsabnahme ein. Diese ist vermutlich auf eine mikrostrukturelle Schädigung zurückzuführen. Bestätigt wird diese Vermutung durch die Abweichungen zwischen Simulation und Experiment im unteren Teil der Entlastungskurve, welche auf eine bleibende Deformation beim Experiment hindeuten. Mit dem hier verwendeten Materialmodell können jedoch solche Schädigungseffekte nicht beschrieben werden, woraus sich die während der Belastung beobachteten Abweichungen ergeben.

Insgesamt wird der Belastungs-, Kriech- und der Entlastungsvorgang sehr viel besser wiedergegeben, als durch die Finite Elemente Rechnung mit linear elastischem Materialverhalten (s. Abb. 3.10). Das heißt, daß das Drei-Parameter-Modell mit den identifizierten Materialparametern die wesentlichen Effekte gut beschreiben kann und somit eine erheblich bessere Voraussage des Deformationsverhaltens möglich ist.

### 3.5 Abschließende Bemerkungen

Der von Hand angepaßte spontane Elastizitätsmodul  $E_0 = 25.5$  GPa, aber auch der ermittelte Gleichgewichtsmodul  $E^{(G)} = 23.1$  GPa liegen deutlich über dem Literaturwert von 3-5 GPa [87, 100]. Für den in [100] ermittelten Elastizitätsmodul wurden z.B. Schichten von  $650 \mu\text{m}$  Dicke auf Siliziumwafern aufgeschleudert. Über die Einzelheiten des Meßverfahrens in [87] existieren keinerlei Angaben. Es ist jedoch zu vermuten, daß es sich um Makroproben handelt, da auch Angaben bezüglich Fließspannung, Bruchspannung und dabei aufgetretene Bruchdehnung gemacht wurden. Üblicherweise werden hierfür Flachproben mit einer Dicke von mehreren Millimetern herangezogen. Unter der Annahme, die Makroproben haben  $d = 3$  mm, resultiert aus den verfügbaren Quellen und den Ergebnissen dieser Arbeit die Darstellung in Abb. 3.13.

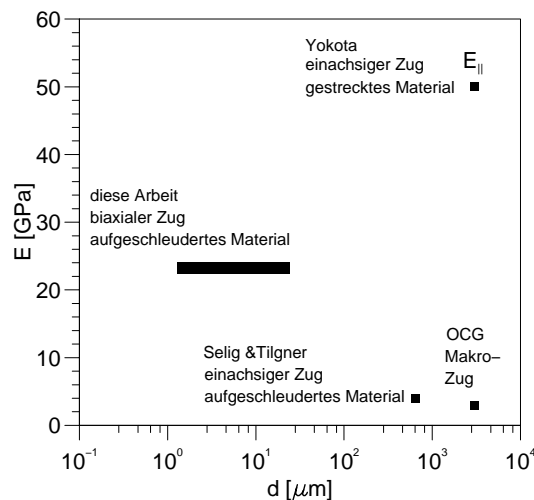


Abbildung 3.13: Elastizitätsmodul in Abhängigkeit von der Probendicke, dem Herstellungsverfahren und dem Spannungszustand.

Die Ursachen für die erheblichen Unterschiede im Elastizitätsmodul sind ohne weitere eingehende Untersuchungen nicht zu klären. Es gibt verschiedene Ansätze, die ein solches Verhalten begründen können, wie z.B. eine belastungsinduzierte Anisotropie oder ein ausgeprägter Einfluß der Probenabmessung. Anhand der folgenden Erläuterungen wird deshalb versucht, aus den hier gemachten Beobachtungen und dem verfügbaren Material in der Literatur eine erste Vorstellung bezüglich des Geschehens zu gewinnen.

Polymere besitzen große Freiheiten in der Anordnung der Polymerketten, die in einem Extremfall zufällig angeordnet, im anderen Extremfall völlig ausgerichtet sein können [22, S.45]. Mit zunehmender Ausrichtung der Makromoleküle verändern sich die mechanischen Eigenschaften entsprechend: der Elastizitätsmodul und die Festigkeit steigen;

der Ausdehnungskoeffizient sinkt. So beträgt z.B. der Elastizitätsmodul von ausgerichtetem Polypropylen  $E_{||} = 42$  GPa während im Zugversuch  $E < 3$  GPa gemessen wird [22, S. 334].

In [118, S. 74] wird gezeigt, daß der Elastizitätsmodul von Polyimid ebenfalls durch Ziehen unter Erwärmung von ursprünglich 2 GPa bis auf maximal 50 GPa erhöht werden kann. Der Maximalwert ist in Abb. 3.13 mit  $E_{||}$  bezeichnet. Insofern ist der hier ermittelte Elastizitätsmodul durchaus erzielbar. Es ist dennoch die Frage zu klären, wie die Erhöhung des Elastizitätsmoduls zustande kommt.

Im Fall des Mikrosensors bewirkt die Dünnhheit von Platte und Membran ein Wegfallen der dritten Dimension. Aufgrund des Aufschleuderverfahrens richten sich die Moleküle in der Ebene aus. Bei dem hier durchgeführten Experiment als auch im Betrieb liegt nun ein annähernd äquibiaxialer Zugspannungszustand vor, d.h. die Membran wird nach allen Seiten in der Ebene der ausgerichteten Moleküle gezogen. Die Skizze in Abb. 3.14 verdeutlicht, daß diese besondere Belastung in Kombination mit der Anordnung der Moleküle in der Ebene bewirkt, daß sich die Struktur deutlich steifer als im einachsigen Zug verhält. Im einachsigen Zug (s. Abb. 3.14b) erlauben die Moleküle eine leichte Deformierbarkeit, bis diese nahezu ausgerichtet sind. Bis dahin weisen die Molekülketten nur eine geringe Steifigkeit auf. Wird jedoch äquibiaxial gezogen (s. Abb. 3.14c), ist diese Bewegungsfreiheit eingeschränkt. Somit ist es denkbar, daß aufgrund der vorliegenden Belastung zusammen mit den durch die Herstellung in der Belastungsebene ausgerichteten Molekülketten der ermittelte Elastizitätsmodul näher an dem Wert  $E_{||}$  liegt.

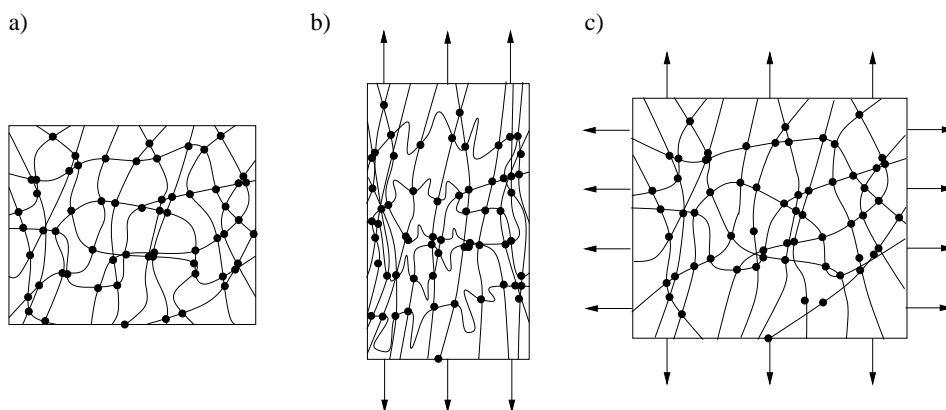


Abbildung 3.14: Deformation einer zweidimensionalen Polymerstruktur (a): b) einachsiger Zug; c) äquibiaxialer Zug.

## 4 Identifikation der Materialparameter der Viskoplastizität mit statischer Erholung anhand einachsiger homogener Deformationen

Ziel dieses Kapitels ist die Entwicklung Neuronaler Netze zur Identifikation der Materialparameter eines Materialmodells, das zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens von Metallen geeignet ist. Das Materialmodell entspricht in seiner Struktur dem Modell von Chaboche (siehe [68]). Die phänomenologischen Effekte, die mit solch einem Modell beschrieben werden können, lassen sich unterteilen in

- Elastizität
- Plastizität mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung
- Viskosität
- statische Erholung (Recovery).

Die ersten drei Phänomene werden üblicherweise in dem Begriff *Viskoplastizität* zusammengefaßt. Für eine übersichtliche Darstellung des entsprechenden Materialmodells der Viskoplastizität formuliert im Rahmen kleiner Deformationen siehe [112].

Die Identifikation der Materialparameter für das Materialmodell von Chaboche mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung für kleine Deformationen wurde bereits von SCHWERTEL [98], YAGAWA & OKUDA [117] sowie MAHNKEN [77] behandelt. SCHWERTEL verglich eine schrittweise Identifikation mit einer simultanen iterativen Parameterbestimmung auf der Basis von Näherungslösungen sowie mit deterministischen Optimierungsverfahren auf der Basis numerischer Integration. MAHNKEN wendete deterministische und stochastische Optimierungsverfahren an, während Neuronale Netze zur Parameteridentifikation eines Chaboche-Modells erstmals von YAGAWA & OKUDA eingesetzt wurden.

SCHWERTEL betrachtete nichtlineare isotrope Verfestigung sowie zwei nichtlineare kinematische Verfestigungen mit statischer Erholung, verzichtete aber auf die Identifikation der Parameter für die statische Erholung der isotropen Verfestigung mangels eines geeigneten Experimentes. Obwohl mehr als 20 unterschiedliche Messungen aus monotonem Zug, zyklischen Belastungen und Kriechexperimenten verwendet wurden, konnten die

Nichteindeutigkeiten bezüglich der Parameter der kinematischen Verfestigungen sowie der zugehörigen statischen Erholungen nicht eliminiert werden (siehe [98], S. 100–101). MAHNKEN verzichtete auf die Modellierung der statischen Erholung und betrachtete ausschließlich Effekte der Viskoplastizität mit nichtlinearer isotroper und einer nichtlinearen kinematischen Verfestigung, wofür die Eindeutigkeit mit einem zyklischen Experiment hergestellt werden konnte. Allerdings ist es MAHNKEN nicht gelungen, die Eindeutigkeit bezüglich der Viskositätsparameter herzustellen. Dies zeigt sich darin, daß bei jedem Optimierungslauf deutlich unterschiedliche Viskositätsparameter bestimmt wurden (siehe [77], S. 82).

Die Identifikation mit Neuronalen Netzen wurde von YAGAWA & OKUDA [117] unter Verwendung eines sowie mehrerer Experimente verglichen, wobei sukzessive die Datenbasis erweitert wurde. Die Modellierung des Materialverhaltens entsprach dem Modell von Chaboche der Viskoplastizität mit jeweils einer nichtlinearen isotropen und kinematischen Verfestigung, aber ohne statische Erholung. Zur Generierung der Trainingsmuster wurden die bei 7 Materialparametern mit 7 Stützpunkten theoretisch entstehenden  $7^7 = 823543$  Simulationen durch gezielte Selektion auf 98 reduziert. Ausgehend von einer Hysterese für zyklische Belastung (Fall 1) wurden nacheinander zyklische Verfestigungskurven (Fall 2), Zugkurven (Fall 3) und eine Relaxationskurve (Fall 4) zur Identifikation hinzugenommen. Es konnte gezeigt werden, daß in Fall 1 die Voraussagen für die anderen Experimente qualitativ richtig, aber ungenau waren. Bei Verwendung aller Experimente in Fall 4 war die Wiedergabe mit den identifizierten Materialparametern natürlich am besten, allerdings stand damit kein Datenmaterial zur Validierung mehr zur Verfügung. Aus den Kurven für Fall 1 und Fall 4 ist jedoch deutlich zu sehen, daß erst durch die Hinzunahme der Relaxationsdaten die geschwindigkeitsabhängigen Effekte korrekt identifiziert werden konnten.

Alle diese Arbeiten haben gezeigt, daß das eigentliche Problem bei der Parameteridentifikation die Herstellung der Eindeutigkeit darstellt. Bilden sich einzelne Parameter nicht in unabhängiger Form in den messbaren Dehnungs-Spannungs- bzw. Zeit-Spannungs-Trajektorien ab, so können diese Parameter nicht eindeutig bestimmt werden. In diesem Fall kann eine Simulation auf der Basis der identifizierten Parameter für eine andersartige Prozeßführung (z.B. eine andere Dehnrates) zu falschen Voraussagen führen. Dies gilt unabhängig davon, mit welcher Methode die Identifikation durchgeführt wurde. Zur teilweisen oder vollständigen Herstellung der Eindeutigkeit wurden meist unterschiedliche Experimente gleichzeitig betrachtet. Fast ausnahmslos wurden aber in den zitierten Arbeiten Standardexperimente herangezogen, wodurch es je nach Komplexität des Mo-



dells nicht möglich war, die Eindeutigkeit umfassend herzustellen.

In der vorliegenden Arbeit werden zum Zweck einer möglichst eindeutigen Identifikation keine Standardexperimente verwendet. Vielmehr wird die Prozeßführung systematisch an der Modellstruktur, unter Beachtung der experimentellen Realisierbarkeit, ausgerichtet. Die Strategie besteht dabei darin, analog zu der zu Anfang des Kapitels angegebenen Klassifizierung der Phänomene, die Identifikation in Teilprobleme aufzuspalten. Für jedes Teilproblem werden mit einer geeigneten Prozeßführung genau die Effekte ange-regt, die jeweils den zu identifizierenden Materialparametern zugeordnet sind. Durch die Generierung solcher verschiedener Identifikationsmodule können die Materialparameter eindeutig, entsprechend ihrer physikalischen Bedeutung, identifiziert werden.

## 4.1 Zusammenhänge zwischen wahren und experimentell meßbaren Größen

### Technische Spannung und technische Dehnung

Zum Vergleich von Simulation und Experiment muß berücksichtigt werden, daß im Experiment bei homogener Zug- bzw. Druckbelastung die *technische Spannung*  $\sigma_t$  und die *technische Dehnung*  $e$  gemessen werden. Die im Modell für den einachsigen Fall verwendete *wahre Spannung*  $\sigma$  und die *logarithmische (wahre) Dehnung*  $\varepsilon$  können unter der Voraussetzung plastischer Inkompressibilität und kleiner elastischer Verzerrungen anhand der Gleichungen

$$\sigma_t := \frac{F}{A_0} = \frac{\sigma}{1 + e}, \quad (4.1)$$

$$\sigma := \frac{F}{A} = \sigma_t(1 + e), \quad (4.2)$$

$$e := \frac{l - l_0}{l_0} = \exp(\varepsilon) - 1, \quad (4.3)$$

$$\varepsilon := \ln(l/l_0) = \ln(1 + e) \quad (4.4)$$

in die experimentell meßbaren Größen  $\sigma_t$  und  $e$  umgerechnet werden und umgekehrt. Diese Umrechnungen werden später benötigt, um Meßdaten und Modelldaten in Bezug zu bringen. Die Größen  $F$ ,  $A$ ,  $A_0$ ,  $l$  und  $l_0$  bezeichnen in diesem Zusammenhang die gemessene Kraft, den aktuellen Querschnitt, den Ausgangsquerschnitt, die aktuelle Länge und die Ausgangslänge im Gleichmaßbereich der Probe.

### Beginn der Einschnürung

Die Einschnürung der Probe bei monotoner Zugbelastung setzt ein, wenn die technische Spannung die *Zugfestigkeit*  $R_m$

$$\sigma_t = R_m \quad (4.5)$$

erreicht hat, d.h. die technische Spannung den maximalen Wert annimmt. Bis zu diesem Zeitpunkt herrscht ein einachsiger homogener Deformationszustand im betrachteten Probenbereich, womit die Evolutionsgleichungen des Materialmodells einfach numerisch integriert werden können. Anschließend wird die Deformation inhomogen und eine Lösung kann nur noch mit Hilfe der Finite Elemente Methode gewonnen werden.

## 4.2 Das verwendete Materialmodell

Materialmodelle der Viskoplastizität für große Deformationen unter Benutzung von dualen Variablen und den damit verbundenen Raten wurden von TSAKMAKIS [113, 114] auf eine solche Art und Weise eingeführt, daß die Dissipationsungleichung für alle erlaubten Prozesse erfüllt wird. Eine spezielle Eigenschaft dieser Theorien ist die Formulierung des Tensors zur Beschreibung der kinematischen Verfestigung mit der mathematischen Struktur eines Mandel'schen Spannungstensors. Die Evolutionsgleichungen zur Modellierung des Verhaltens der kinematischen Verfestigung sind nicht bezüglich des Tensors der kinematischen Verfestigung  $\xi$ , sondern bezüglich eines internen Spannungstensors  $\mathbf{Z}$  formuliert, der dem Tensor der kinematischen Verfestigung in der Zwischenkonfiguration zugeordnet ist. Dieser interne Spannungstensor nimmt, z.B. innerhalb der sogenannten Familie 1 dualer Dehnungs- und Spannungstensoren, die mathematische Struktur eines zweiten Piola-Kirchhoff Spannungstensors bezüglich der plastischen Zwischenkonfiguration an.

Im folgenden soll die Modellbildung kurz skizziert werden. Für eine nähere Beschreibung sei an dieser Stelle auf die oben zitierte Literatur sowie [15, 16, 62] verwiesen. Zur Formulierung im Rahmen der Theorie großer Deformationen wird von den in Abschnitt 1.4.3 eingeführten Dehnungs- und Spannungstensoren sowie deren Raten ausgegangen.

Im weiteren wird die Gültigkeit der Clausius-Duhem-Ungleichung unter der Voraussetzung isothermer Prozesse

$$\frac{1}{\rho_0} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\dot{\mathbf{T}}} - \dot{\Psi} \geq 0 \quad (4.6)$$

angenommen, wobei die Dichte in der Bezugsconfiguration mit  $\rho_0$  bezeichnet wird. Die freie Energiefunktion soll additiv zerlegbar sein in die Anteile

$$\Psi(t) = \hat{\Psi}(\hat{\Gamma}_e, \hat{\mathbf{Y}}, r) = \hat{\Psi}_e(\hat{\Gamma}_e) + \hat{\Psi}_{p1}(\hat{\mathbf{Y}}) + \hat{\Psi}_{p2}(r), \quad (4.7)$$

womit die Zeitableitung

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_e} \cdot \dot{\hat{\Gamma}}_e + \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} \dot{\hat{\mathbf{Y}}} + \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial r} \dot{r} \quad (4.8)$$

folgt. In (4.7) bezeichnet  $\hat{\mathbf{Y}}$  eine tensorwertige Variable bezüglich der Zwischenconfiguration vom Dehnungstyp und  $r$  eine skalarwertige Variable vom Dehnungstyp. Aus (4.6) folgt unter Beachtung der Isotropie der freien Energiefunktion  $\hat{\Psi}$  mit (1.26), (1.23) und (4.8)

$$\left( \frac{1}{\rho_0} \hat{\mathbf{T}} - \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_e} \right) \cdot \hat{\Gamma}_e + \frac{1}{\rho_0} \hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{D}}_p + \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_e} \cdot (\hat{\mathbf{L}}_p^T \hat{\Gamma}_e + \hat{\Gamma}_e \hat{\mathbf{L}}_p) - \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}} \dot{\hat{\mathbf{Y}}} - \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial r} \dot{r} \geq 0. \quad (4.9)$$

Für rein elastische Prozesse stellt die Hyperelastizitätsbeziehung

$$\hat{\mathbf{T}} = \rho_0 \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\Gamma}_e} \quad (4.10)$$

eine notwendige und hinreichende Bedingung zur Erfüllung der Ungleichung (4.9) dar. Es wird nun angenommen, daß (4.10) auch bei elastisch-plastischen Prozessen gültig ist. Analog zu (4.10) werden zu  $\hat{\mathbf{Y}}$  und  $r$  thermodynamisch konjugierte Variablen vom Spannungstyp

$$\hat{\mathbf{Z}} := \rho_0 \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \hat{\mathbf{Y}}}, \quad (4.11)$$

$$k := \rho_0 \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial r} \quad (4.12)$$

zugeordnet. Aufgrund der Isotropie der freien Energiefunktion  $\hat{\Psi}$  und der Potentialbeziehung (4.10) ist das Produkt  $\hat{\mathbf{T}} \hat{\Gamma}_e$  kommutativ, so daß mit der Definition des Mandel'schen Spannungstensors

$$\hat{\mathbf{P}} := (\mathbf{1} + 2\hat{\Gamma}_e) \hat{\mathbf{T}} \quad (4.13)$$

aus der verbleibenden Restungleichung von (4.9) die Dissipationsungleichung

$$\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{D}}_p - \hat{\mathbf{Z}} \cdot \dot{\hat{\mathbf{Y}}} - k \dot{r} \geq 0 \quad (4.14)$$

resultiert. Wird der Translationstensor der kinematischen Verfestigung ebenfalls in Form eines Mandel'schen Spannungstensors

$$\hat{\xi} = (\mathbf{1} + 2\hat{\mathbf{Y}})\hat{\mathbf{Z}} \quad (4.15)$$

definiert, folgt durch Addition und Subtraktion des Terms  $\hat{\xi} \cdot \hat{\mathbf{D}}_p$  zu (4.14)

$$\underbrace{\hat{\xi} \cdot \hat{\mathbf{D}}_p - \hat{\mathbf{Z}} \cdot \dot{\hat{\mathbf{Y}}}}_A + \underbrace{(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\xi}) \cdot \hat{\mathbf{D}}_p - k\dot{r}}_B \geq 0. \quad (4.16)$$

Sind die Terme  $A$  und  $B$  der Ungleichung (4.16) jeweils für sich immer größer gleich null, ist auch (4.16) für jeden denkbaren Prozeß erfüllt. Aus den Ungleichungen  $A \geq 0$  und  $B \geq 0$  können nun Evolutionsgleichungen für die kinematische bzw. für die isotrope Verfestigung abgeleitet werden.

### Kinematische Verfestigung ( $A \geq 0$ )

Für die freie Energiefunktion  $\hat{\Psi}_{p1}$  wird als einfachster Ansatz eine quadratische Form in  $\hat{\mathbf{Y}}$  (Materialkonstante  $c$ )

$$\hat{\Psi}_{p1}(\hat{\mathbf{Y}}) = \frac{1}{2\rho_0} c \hat{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{Y}} \quad (4.17)$$

gewählt. Aus der Definition (4.11) ergibt sich der einfache Zusammenhang

$$\hat{\mathbf{Z}} = c\hat{\mathbf{Y}} \quad \Rightarrow \quad \dot{\hat{\mathbf{Y}}} = \frac{1}{c}\dot{\hat{\mathbf{Z}}} \quad (4.18)$$

zwischen  $\hat{\mathbf{Z}}$  und  $\hat{\mathbf{Y}}$  bzw.  $\dot{\hat{\mathbf{Y}}}$  und  $\dot{\hat{\mathbf{Z}}}$ . Mit der objektiven Ableitung für die Spannung  $\hat{\mathbf{Z}}$

$$\overset{\nabla}{\hat{\mathbf{Z}}} := \dot{\hat{\mathbf{Z}}} - \hat{\mathbf{L}}_p \hat{\mathbf{Z}} - \hat{\mathbf{Z}} \hat{\mathbf{L}}_p^T \quad (4.19)$$

sowie (4.18) kann Term  $A$  von (4.16) zu

$$\hat{\mathbf{Z}} \cdot \left( \hat{\mathbf{D}}_p - \frac{1}{c} \overset{\nabla}{\hat{\mathbf{Z}}} \right) \geq 0 \quad (4.20)$$

umgeformt werden. Zur Erfüllung dieser Ungleichung stellt die Evolutionsgleichung

$$\overset{\nabla}{\hat{\mathbf{Z}}} = c\hat{\mathbf{D}}_p - b\dot{s}\hat{\mathbf{Z}} - p \|\hat{\mathbf{Z}}\|^{w-1} \hat{\mathbf{Z}} \quad (4.21)$$

eine hinreichende Bedingung dar. Die Materialparameter  $c$ ,  $b$ ,  $p$  und  $w$  sollen nichtnegativ sein. Hierbei beschreibt die Materialkonstante  $c$  den Anstieg zu Beginn der Verfestigung und das Verhältnis  $c/b$  steht in Beziehung zu der Begrenzung der Verfestigung. Die Rate der plastischen Bogenlänge  $\dot{s}$  ist definiert durch

$$\dot{s} := \sqrt{\frac{2}{3} \hat{\mathbf{D}}_p \cdot \hat{\mathbf{D}}_p}. \quad (4.22)$$

### Isotrope Verfestigung ( $B \geq 0$ )

Auch hier wird ein quadratischer Ansatz für die freie Energiefunktion (nichtnegativer Materialparameter  $\gamma$ )

$$\hat{\Psi}_{p2}(r) = \frac{1}{2\rho_0} \gamma r^2 \quad (4.23)$$

gewählt. Aus (4.12) folgt für die zu  $r$  konjugierte Spannung und die zugehörigen Zeitableitungen

$$k = \gamma r \quad \Rightarrow \quad \dot{k} = \gamma \dot{r}, \quad (4.24)$$

wobei  $k$  im folgenden die isotrope Verfestigungsvariable darstellt.

Es wird eine von Mises Fließfunktion mit dem Translationstensor der kinematischen Verfestigung  $\hat{\xi}$  als Mittelpunkt und einem Radius der Fließfläche vom Betrag der isotropen Verfestigung  $k$

$$F = \hat{F}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\xi}, k) = \sqrt{\frac{3}{2}(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\xi})^{\text{D}} \cdot (\hat{\mathbf{P}} - \hat{\xi})^{\text{D}}} - k \quad (4.25)$$

angenommen. Die Erfüllung des Postulats von Ill'iushin in seiner schwachen Form wird durch die Normalenregel

$$\hat{\mathbf{D}}_p = \begin{cases} \dot{s} \frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{\mathbf{P}}} & \text{für } F = 0 \wedge \dot{F}|_{\mathbf{F}_p = \text{konst}} > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.26)$$

erreicht, wobei die Normalenrichtung durch (4.25) mit

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{\mathbf{P}}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\xi})^{\text{D}}}{\|(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\xi})^{\text{D}}\|} \quad (4.27)$$

gegeben ist. Durch Einsetzen von (4.25) und (4.26) in Term  $B$  von (4.16) gelingt es zu zeigen, daß

$$\dot{s} - \dot{r} \geq 0 \quad (4.28)$$

eine hinreichende Bedingung zur Erfüllung der Ungleichung  $B \geq 0$  darstellt. Dies kann z.B. gewährleistet werden durch die Beziehung

$$\dot{r} = \left(1 - \frac{\beta}{\gamma}(k - k_0)\right) \dot{s} - \frac{\pi}{\gamma}(k - k_0)^\omega, \quad (4.29)$$

womit wegen (4.24) die Evolutionsgleichung für die isotrope Verfestigung

$$\dot{k} = \left( \gamma - \beta(k - k_0) \right) \dot{s} - \pi(k - k_0)^\omega \quad (4.30)$$

resultiert.

Zum Zweck einer effizienten numerischen Integration der Evolutionsgleichung für die kinematische Verfestigung ist es zweckmäßig, die wegen (4.15) auftretenden nichtlinearen Terme in

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \left( \mathbf{1} + \frac{2}{c} \hat{\mathbf{Z}} \right) \hat{\mathbf{Z}} = \hat{\mathbf{Z}} + \frac{2}{c} \hat{\mathbf{Z}}^2 \quad (4.31)$$

zu vernachlässigen, d.h. der Tensor der kinematischen Verfestigung vom Typ eines Mandel'schen Spannungstensors wird dem internen Spannungstensor des zweiten Piola-Kirchhoff Typs zur Beschreibung der kinematischen Verfestigung gleichgesetzt:

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\mathbf{Z}} . \quad (4.32)$$

Gerechnete Beispiele für Fälle einfacher Deformationen weisen darauf hin, daß diese Annahme die ermittelte Form des konstitutiven Verhaltens nicht nennenswert beeinflusst (siehe hierzu [38, 114]).

Werden zusätzlich die elastischen Deformationen, auf eine Art und Weise wie in [15] beschrieben, als klein vorausgesetzt, vereinfachen sich die konstitutiven Gleichungen zu einer Form, wie sie in [15, 16] näher diskutiert werden.

Nach Transformation der Gleichungen in die Momentankonfiguration ergibt sich schließlich ein Materialmodell, gegeben in der Form

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \mathbf{c}[\mathbf{D} - \mathbf{D}_p] , \quad (4.33)$$

$$F = \sqrt{\frac{3}{2}(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D} - k , \quad (4.34)$$

$$\mathbf{D}_p = \dot{s} \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{N} , \quad \mathbf{N} = \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D}{\|(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D\|} , \quad (4.35)$$

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0)) \dot{s} - \pi(k - k_0)^\omega , \quad (4.36)$$

$$\overset{\nabla}{\mathbf{Z}} = \left( \sqrt{\frac{3}{2}} c \mathbf{N} - b \mathbf{Z} \right) \dot{s} - p \|\mathbf{Z}\|^{w-1} \mathbf{Z} , \quad (4.37)$$

$$\dot{s} = \frac{\langle F \rangle^m}{\eta} \geq 0 . \quad (4.38)$$

In diesen Beziehungen bezeichnen fettgedruckte große Buchstaben Tensoren zweiter Stufe, während  $\mathbf{C}$  den isotropen Tensor vierter Stufe darstellt:

$$\mathbf{C} = 2\mu\mathbf{E} + \lambda\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}. \quad (4.39)$$

Die Parameter  $E$  und  $\nu$  bezeichnen den Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl. Die Funktion  $\langle F \rangle$  in (4.38) ist definiert mit

$$\langle F \rangle := \begin{cases} F & \text{für } F \geq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (4.40)$$

Solange bei einem Zugexperiment keine Einschnürung stattfindet, liegen eindimensionale homogene Deformationen vor und das obige Materialmodell (4.33)-(4.38) führt mit  $\dot{\varepsilon} \equiv D_{11}$  und  $\sigma \equiv S_{11}$  zu:

$$\dot{\sigma} = (2\sigma + E)\dot{\varepsilon} - ER_\sigma\dot{s}, \quad (4.41)$$

$$F = |\sigma - \xi| - k, \quad (4.42)$$

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0))\dot{s} - \pi(k - k_0)^\omega, \quad (4.43)$$

$$\dot{Z}_{11} = 2Z_{11}\dot{\varepsilon} + (cR_\sigma - bZ_{11})\dot{s} - p\|\mathbf{Z}\|^{w-1}Z_{11}, \quad (4.44)$$

$$\dot{Z}_{22} = 2Z_{22}D_{22} + \left(-\frac{1}{2}cR_\sigma - bZ_{22}\right)\dot{s} - p\|\mathbf{Z}\|^{w-1}Z_{22}, \quad (4.45)$$

$$\dot{s} = \frac{\langle F \rangle^m}{\eta} \geq 0, \quad (4.46)$$

unter Verwendung der Abkürzungen

$$R_\sigma = \frac{\sigma - \xi}{|\sigma - \xi|}, \quad (4.47)$$

$$\xi = Z_{11} - Z_{22}, \quad (4.48)$$

$$D_{22} = -\nu\dot{\varepsilon} + \left(\nu - \frac{1}{2}\right)R_\sigma\dot{s}, \quad (4.49)$$

$$\|\mathbf{Z}\| = \sqrt{Z_{11}^2 + 2Z_{22}^2}. \quad (4.50)$$

Die Evolutionsgleichungen (4.41)-(4.46) können mit Hilfe eines numerischen Standardverfahrens, wie z.B. dem Runge-Kutta Verfahren integriert werden (siehe z.B. [23]).

### 4.3 Sonderfälle und Näherungslösungen

Im Rahmen dieses Abschnitts werden grundlegende Betrachtungen zur geeigneten Separation der Effekte und Aufbereitung der Daten durchgeführt, wodurch eine vereinfachte Konstruktion der Netze, eine starke Reduktion der Anzahl an Trainingsmustern

sowie die Verbesserung der Identifikationsqualität erreicht werden kann. Zusätzlich werden Kennwerte durch Kombination verschiedener Materialparameter und Prozeßgrößen entwickelt, die eine sinnvolle Auswahl der Trainingsmuster ermöglichen.

### **Bemerkung**

Die Verbesserung durch Regularisierung der Daten bei Optimierungsverfahren ist z.B. beschrieben in [5, 72, 82]. Insbesondere für die nichtlinearen Inversionsaufgaben der Werkstoffmechanik gibt es kein allgemein anerkanntes mathematisches Vorgehen, was dazu führt, daß für eine erfolgreiche Regularisierung Erfahrung des Anwenders notwendig ist (siehe z.B. [77]). Eine Regularisierung wird daher meist erst beim Auftreten von Schwierigkeiten, wie z.B. Nichteindeutigkeit oder Unvollständigkeit vorgenommen. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, daß mit einer solchen Regularisierung die Herstellung der Eindeutigkeit oder Vollständigkeit u.U. künstlich durch die vom Anwender eingebrachte Information und nicht durch eine andere Form der gemessenen Daten erfolgt. Es wird dadurch erreicht, daß sich der regularisierte Parameter in einem vom Anwender vermuteten sinnvollen Bereich befindet.

In ähnlicher Weise wie bei den Optimierungsverfahren kann die Regularisierung auch bei Neuronalen Netzen vorgenommen werden, wobei hier jedoch geeignete Modifikationen in der Zielfunktion, in der Netzstruktur und im Trainingsalgorithmus vorzunehmen sind. Daraus ergeben sich sogenannte *Regularization Networks*, die automatisch die optimale Regularisierung z.B. mit Hilfe von Green-Funktionen vornehmen [39, Abschnitt 7.5].

Die Regularisierung im Rahmen dieser Arbeit erfolgt durch die geeignete Entdimensionierung der Ausgabedaten, welche in vielen Fällen durch eine Analyse der Evolutionsgleichungen in natürlicher Weise vorgegeben ist (siehe Abschnitt 2.3.5). Zusätzlich besteht die Möglichkeit eine GSL-Transformation vorgenommen werden (siehe Abschnitt 2.3.3). Auf diese Weise kann konventionelle Simulationssoftware zum Training der Neuronalen Netze verwendet werden, was im Sinne der allgemeinen Verfügbarkeit ist.

#### **4.3.1 Effekte der Viskosität**

Zur Identifikation der Materialparameter der Viskosität müssen mit einem geeignet zu wählenden Prozeß Effekte angeregt werden, die durch die Evolutionsgleichung (4.46) hervorgerufen werden. Gleichung (4.46) kann leicht mit der Spannung und Dehnung in Beziehung gebracht werden, wenn (4.41) unter der Annahme kleiner Deformationen und



$R_\sigma = 1$  zu

$$\dot{\sigma} = E(\dot{\varepsilon} - \dot{s}) \quad (4.51)$$

vereinfacht wird. Durch Einsetzen von (4.46) in (4.51) folgt sofort

$$\frac{d\sigma}{dt} = E \left( \dot{\varepsilon} - \frac{\langle F \rangle^m}{\eta} \right) . \quad (4.52)$$

Hierbei stellt  $F$  die Überspannung bezüglich der statischen Spannung  $\sigma^{(s)}$

$$F = \sigma - \sigma^{(s)} \quad (4.53)$$

dar. Die statische Spannung ist hierbei diejenige Spannung, die bei spontaner Entlastung (Entlastung mit der Steigung des Elastizitätsmoduls) aus dem aktuellen Punkt auf die zugeordnete Gleichgewichtstrajektorie ( $F = 0$ ) resultiert. Für eine detaillierte Beschreibung der statischen Spannung siehe [114]. Im folgenden wird davon ausgegangen, daß  $F \geq 0$  gilt, womit das *Föppl-Symbol*  $\langle \cdot \rangle$  (auch als Mc Auley-Klammer bezeichnet) in (4.52) wegfällt

$$\frac{d\sigma}{dt} = E \left( \dot{\varepsilon} - \frac{F^m}{\eta} \right) . \quad (4.54)$$

Gleichung (4.54) zeigt, daß die Steigung der Dehnungs-Spannungs-Trajektorie für eine Belastung ausgehend von  $F = 0$  den Wert

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = E \quad (4.55)$$

annimmt. Daher ist insbesondere der Übergang vom elastischen in den inelastischen Bereich zu Beginn des Experimentes völlig glatt (solche Beziehungen sind in [111, 112] ausführlich diskutiert worden).

Für eine Belastung mit  $F > 0$  und einer Dehnrates  $\dot{\varepsilon} \approx \dot{s} \approx konst$  ergibt sich eine Steigung

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = E \left( 1 - \frac{F^m}{\eta \dot{\varepsilon}} \right) , \quad (4.56)$$

die kleiner ist, als die des Elastizitätsmoduls. Die Überspannung strebt in diesem Fall für  $\dot{s} \approx \dot{\varepsilon} \approx konst$  gegen den Sättigungswert

$$F = (\eta \dot{\varepsilon})^{1/m} . \quad (4.57)$$

Neben dem Belastungsverhalten zur Untersuchung der Viskositätseffekte können z.B. auch Relaxationsphasen verwendet werden (vgl. Abb. 3.4). Aus (4.54) und (4.53) folgt für  $\varepsilon = konst$  und  $\sigma^{(s)} \approx konst$  eine Differentialgleichung der Form

$$\dot{F} = \frac{d(\sigma - \sigma^{(s)})}{dt} \approx \frac{d\sigma}{dt} = -E \frac{F^m}{\eta} \quad (4.58)$$

mit der Lösung

$$F(t) = \left[ F(t_0)^{1-m} - (1-m) \frac{E}{\eta} (t - t_0) \right]^{\frac{1}{1-m}}, \quad (4.59)$$

wobei der Beginn der Relaxation zum Zeitpunkt  $t_0$  mit einer anliegenden Überspannung  $F(t_0)$  charakterisiert ist.

### 4.3.2 Effekte der Plastizität

Bei einer Beschränkung auf Effekte der Plastizität reduzieren sich die Evolutionsgleichungen (4.43)–(4.45) zu

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0)) \dot{s}, \quad (4.60)$$

$$\dot{Z}_{11} = 2Z_{11}\dot{\varepsilon} + (cR_\sigma - bZ_{11}) \dot{s}, \quad (4.61)$$

$$\dot{Z}_{22} = 2Z_{22}D_{22} + \left( -\frac{1}{2}cR_\sigma - bZ_{22} \right) \dot{s}. \quad (4.62)$$

Die Integration der Evolutionsgleichung (4.60) mit der Anfangsbedingung  $k(s=0) = k_0$  ergibt

$$k = k_0 + \frac{\gamma}{\beta} \left[ 1 - e^{-\beta s} \right]. \quad (4.63)$$

Für monotone Zugbelastung ( $R_\sigma = 1$ ) und der Annahme vernachlässigbarer elastischer Verzerrungen ( $\dot{\varepsilon} \approx \dot{s}$ ) folgt aus (4.49)

$$D_{22} = -\frac{1}{2}\dot{s}. \quad (4.64)$$

Gleichung (4.64) eingesetzt in (4.61) und (4.62) liefert

$$\dot{Z}_{11} = 2Z_{11}\dot{s} + (c - bZ_{11}) \dot{s} = (c - (b-2)Z_{11}) \dot{s}, \quad (4.65)$$

$$\dot{Z}_{22} = -Z_{22}\dot{s} + \left( -\frac{1}{2}c - bZ_{22} \right) \dot{s} = \left( -\frac{1}{2}c - (b+1)Z_{22} \right) \dot{s}. \quad (4.66)$$

Durch Integration von (4.65) und (4.66) für die Anfangswerte  $s = s_0$ ,  $Z_{11} = Z_{11}(s_0)$ ,  $Z_{11} = Z_{22}(s_0)$  ergibt sich die Änderung der Komponenten des Tensors der kinematischen Verfestigung für eine plastische Bogenlänge  $s > s_0$  zu

$$\Delta Z_{11} = Z_{11}(s) - Z_{11}(s_0) = \left( \frac{c}{b-2} - Z_{11}(s_0) \right) \left[ 1 - e^{-(b-2)(s-s_0)} \right], \quad (4.67)$$

$$\Delta Z_{22} = Z_{22}(s) - Z_{22}(s_0) = \left( -\frac{c}{2(b+1)} - Z_{22}(s_0) \right) \left[ 1 - e^{-(b+1)(s-s_0)} \right]. \quad (4.68)$$

Für die Anfangsbedingungen  $s_0 = 0$ ,  $Z_{11}(s_0) = 0$ ,  $Z_{22}(s_0) = 0$  sowie Einsetzen in (4.48) folgt

$$\xi = \frac{c}{b-2} \left[ 1 - e^{-(b-2)s} \right] + \frac{c}{2(b+1)} \left[ 1 - e^{-(b+1)s} \right]. \quad (4.69)$$

Somit resultiert für die anliegende Spannung bei monotoner Zugbelastung ( $|\sigma - \xi| \equiv \sigma - \xi$ ) aus (4.42), (4.63) und (4.69)

$$\begin{aligned} \sigma - F &= \underbrace{k_0 + \frac{\gamma}{\beta} \left[ 1 - e^{-\beta s} \right]}_{\text{isotrope Verfestigung}} \\ &\quad + \underbrace{\frac{c}{b-2} \left[ 1 - e^{-(b-2)s} \right] + \frac{c}{2(b+1)} \left[ 1 - e^{-(b+1)s} \right]}_{\text{kinematische Verfestigung}}. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Anhand der Näherungslösung (4.70) (Zug unter Vernachlässigung statischer Erholung) lassen sich nun Kenngrößen durch Grenzübergänge gewinnen. Der initiale Tangentenmodul setzt sich nach

$$(\sigma - F)' := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d(\sigma - F)}{ds} = \gamma + \frac{3}{2}c \quad (4.71)$$

aus einem Anteil isotroper und kinematischer Verfestigung zusammen. Für den Grenzübergang zu unendlich großen plastischen Dehnungen ergibt sich eine obere Schranke  $\Sigma$  für die Spannung  $\sigma - F$ :

$$\Sigma := \lim_{s \rightarrow \infty} (\sigma - F) = k_0 + \frac{\gamma}{\beta} + \frac{c}{b-2} + \frac{c}{2(b+1)} \quad (4.72)$$

$$= k_0 + \frac{\gamma}{\beta} + \frac{3c}{2b} \frac{b^2}{b^2 - b - 2}. \quad (4.73)$$

### 4.3.3 Statische Erholung

#### Statische Erholung der isotropen Verfestigung

In diesem Abschnitt werden Effekte der statischen Erholung für die Evolutionsgleichung der isotropen Verfestigung diskutiert. Durch die Substitution  $\kappa := k - k_0$  folgt aus (4.43)

$$\dot{\kappa} = \underbrace{(\gamma - \beta\kappa)\dot{s}}_{\text{Verfestigung}} - \underbrace{\pi\kappa^\omega}_{\text{Erholung}} . \quad (4.74)$$

Die Verfestigungs- und Erholungseffekte, gegeben durch die beiden Anteile an  $\dot{\kappa}$  als rechte Seite von Gl. (4.74) können durch geeignete Prozeßführung separiert werden. Die Verfestigung ist dominant, wenn  $(\gamma - \beta\kappa)\dot{s} \gg \pi\kappa^\omega$ . Dies wird für eine schnelle Belastung im plastischen Bereich mit genügendem Abstand vom Sättigungswert  $\kappa \ll \gamma/\beta$  erreicht. Als wesentlicher Effekt verbleibt

$$\dot{\kappa} = (\gamma - \beta\kappa)\dot{s} \quad (4.75)$$

bzw.

$$\kappa = \frac{\gamma}{\beta} (1 - e^{-\beta s}) . \quad (4.76)$$

Die Verfestigung wird vernachlässigbar für  $\pi\kappa^\omega \gg (\gamma - \beta\kappa)\dot{s}$ , was durch Einfügen eines Relaxationsprozesses ( $\dot{\varepsilon} = 0 \Rightarrow \dot{s} \approx 0$ ) erreicht werden kann. Somit vereinfacht sich (4.74) zu

$$\dot{\kappa} = -\pi\kappa^\omega , \quad (4.77)$$

und mit  $\kappa_0 := \kappa(t = t_0)$  folgt

$$\kappa = \begin{cases} \exp [ \ln \kappa_0 - \pi(t - t_0) ] & \text{für } \omega = 1 \\ \left[ \kappa_0^{1-\omega} - \pi(1-\omega)(t - t_0) \right]^{\frac{1}{1-\omega}} & \text{sonst} . \end{cases} \quad (4.78)$$

Zur Wahl eines geeigneten Parameters  $\pi$  bei vorgegebener Potenz  $\omega$  ist der Anteil

$$\Delta\kappa^* := \frac{\kappa_0 - \kappa(t_0 + \Delta t_r)}{\kappa_0} \quad (4.79)$$

der Verfestigung  $\kappa_0$ , der während einer Relaxation von  $\Delta t_r = 3600s$  Dauer abgebaut wird, eine anschauliche Größe. Als Anfangsbedingung wird ein  $\kappa_0$  angenommen, welches bei 1% plastischer Dehnung nach (4.63) zu berechnen ist. Aus (4.78) läßt sich der geeignete Wert von  $\pi$  in Abhängigkeit von  $\omega$  und  $\Delta t_r$  ermitteln nach

$$\pi = \frac{\kappa_0^{1-\omega} (1 - (1 - \Delta\kappa^*)^{1-\omega})}{(1-\omega)\Delta t_r} , \quad \omega \neq 1 . \quad (4.80)$$

### Statische Erholung der kinematischen Verfestigung

Für  $s_0 = 0$  und  $Z_{11}(s_0) = Z_{22}(s_0) = 0$  ergibt sich aus (4.67) und (4.68) das Verhältnis

$$\frac{Z_{22}}{Z_{11}} = -\frac{\frac{c}{b-2} [1 - e^{-(b-2)s}]}{\frac{c}{2(b+1)} [1 - e^{-(b+1)s}]} . \quad (4.81)$$

Liegen kleine plastische Deformationen vor, so kann für  $s \ll 1$  die Exponentialfunktion als Reihe entwickelt werden, so daß

$$\frac{Z_{22}}{Z_{11}} = -\frac{\frac{c}{b-2} [1 - 1 + (b-2)s + \mathcal{O}(s^2)]}{\frac{c}{2(b+1)} [1 - 1 + (b+1)s + \mathcal{O}(s^2)]} = -\frac{1}{2} \quad (4.82)$$

folgt. Nach (4.48) ergibt sich somit wegen  $Z_{22} = -\frac{1}{2}Z_{11}$

$$\xi = \frac{3}{2}Z_{11} . \quad (4.83)$$

Für eine Relaxation gilt näherungsweise  $\dot{s} \approx \dot{\varepsilon} = 0$  und somit reduzieren sich (4.44) und (4.45) zu

$$\dot{Z}_{11} = -p \|\mathbf{Z}\|^{w-1} Z_{11} , \quad (4.84)$$

$$\dot{Z}_{22} = -p \|\mathbf{Z}\|^{w-1} Z_{22} . \quad (4.85)$$

Dieses Differentialgleichungssystem ist über  $\|\mathbf{Z}\|$  gekoppelt. Durch Division von (4.84) mit (4.85) erhält man die Differentialgleichung

$$\frac{\dot{Z}_{11}}{Z_{11}} = \frac{\dot{Z}_{22}}{Z_{22}} \quad (4.86)$$

mit der Lösung

$$Z_{22} = CZ_{11} . \quad (4.87)$$

Die Integrationskonstante  $C$  ist durch die Anfangsbedingung (4.82) gegeben, so daß unter den eingeführten Annahmen für die gesamte Relaxation

$$Z_{22} = -\frac{1}{2}Z_{11} \quad (4.88)$$

gilt. Der Betrag  $\|\mathbf{Z}\|$  in Abhängigkeit von  $Z_{11}$  ist also

$$\|\mathbf{Z}\| = \sqrt{\frac{3}{2}}Z_{11} . \quad (4.89)$$

Durch Einsetzen von (4.89) und (4.83) in (4.84) resultiert die Differentialgleichung für die Entwicklung der kinematischen Verfestigung während der Relaxation (nach monotoner Belastung)

$$\dot{\xi} = -p \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1-w}{2}} \xi^w. \quad (4.90)$$

Durch Integration ergibt sich die Lösung

$$\xi = \begin{cases} \exp [ \ln \xi_0 - p(t - t_0) ] & \text{für } w = 1 \\ \left[ \xi_0^{1-w} - p \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1-w}{2}} (1-w)(t - t_0) \right]^{\frac{1}{1-w}} & \text{sonst} \end{cases}. \quad (4.91)$$

Analog zu dem Erholungsparameter  $\pi$  der isotropen Verfestigung wird der Anteil der Verfestigung  $\xi_0$

$$\Delta \xi^* := \frac{\xi_0 - \xi(t_0 + \Delta t_r)}{\xi_0} \quad (4.92)$$

gewählt, der während der Relaxation  $\Delta t_r = 3600$  s entfestigt. Der Ausgangswert  $\xi_0 = \xi(t = t_0)$  wird anhand von (4.69) für die plastische Dehnung von  $\varepsilon_p = s = 1\%$  berechnet, wodurch sich  $p$  mit

$$p = \frac{\xi_0^{1-w} (1 - (1 - \Delta \xi^*)^{1-w})}{\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1-w}{2}} (1-w) \Delta t_r}, \quad w \neq 1 \quad (4.93)$$

festlegen läßt.

## 4.4 Erläuterungen zur Prozeßführung

Wie bereits zu Anfang dieses Kapitels erläutert wurde, ist die Wahl der Prozeßführung entscheidend für die eindeutige Identifizierbarkeit der Materialparameter. Abbildung 4.1 zeigt die hier verwendete Lastgeschichte, welche sich infolge umfangreicher Untersuchungen als am besten geeignet erwiesen hat. Da bei der Entwicklung dieser Prozeßführung sehr viel Erfahrung eingeflossen ist, sollen zum besseren Verständnis die wesentlichen Elemente skizziert werden.

### Plastizität

In den Arbeiten von SCHWERTEL und MAHNKEN wurde gezeigt, daß die Aufspaltung der Verfestigung in isotropen und kinematischen Anteil mit zyklischen Experimenten

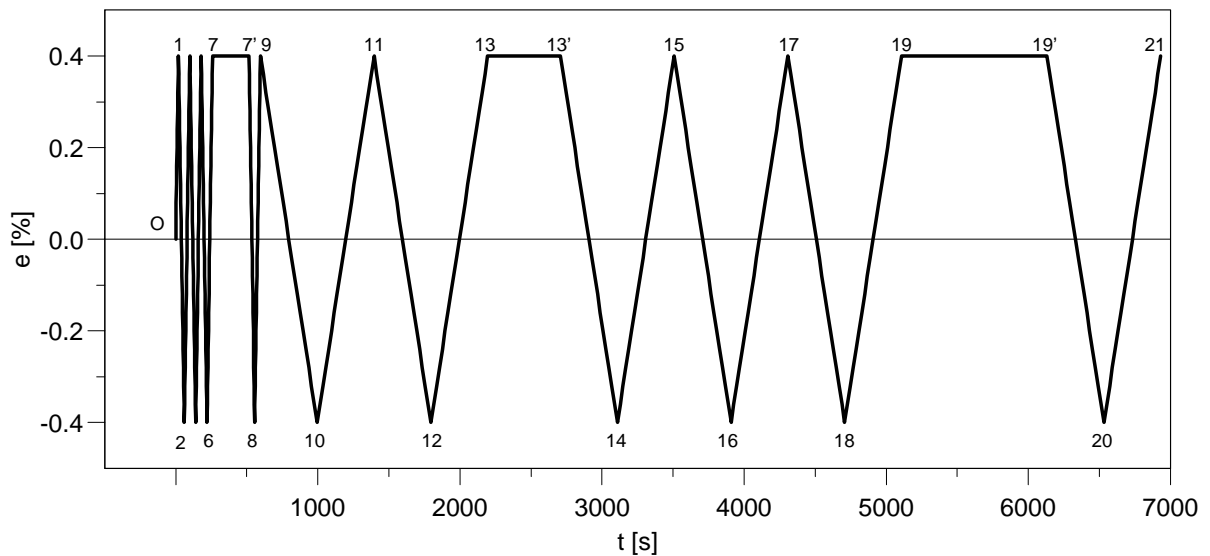


Abbildung 4.1: Prozeßführung für die Identifikation.

eindeutig vorgenommen werden kann (vgl. [98, S. 38 ff.], [77, S. 73 ff.]). Somit wird ein dehnungsgesteuertes zyklisches Experiment gewählt, charakterisiert durch den Betrag der Dehnrate  $|\dot{e}|$ , der Mitteldehnung

$$e_m := \frac{e_o + e_u}{2} \quad (4.94)$$

sowie der Dehnungsamplitude

$$e_a := \frac{e_o - e_u}{2}, \quad (4.95)$$

wobei  $e_o$  den maximalen und  $e_u$  den minimalen Dehnungswert bezeichnen.

Die isotrope Verfestigung nimmt nach (4.60) unabhängig vom Vorzeichen des plastischen Dehnungsincrements immer zu, während die kinematische Verfestigung infolge (4.61) und (4.62) bei Vorzeichenwechsel zunächst abgebaut und anschließend wieder in die andere Richtung aufgebaut wird (siehe Abb. 4.2). Auf diesem Verhalten beruht die Sättigung der isotropen Verfestigung innerhalb weniger Zyklen, während sich der Verlauf der kinematischen Verfestigung nach einer kurzen Stabilisierungsphase identisch wiederholt.

## Viskosität

Für die Identifikation der Viskositätsparameter können die Relaxationsphasen 7-7', 13-13' und 19-19' herangezogen werden, wodurch sich  $\eta$  und  $m$  in Form von (4.59) in

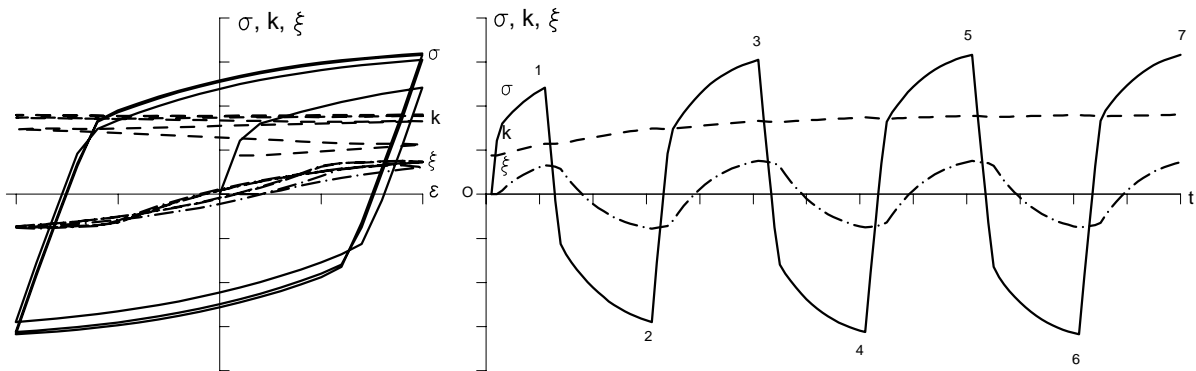


Abbildung 4.2: Verhalten isotroper und kinematischer Verfestigung bei zyklischer Belastung mit Mitteldehnung  $e_m = 0$  und konstanter Dehnungsamplitude  $e_a$ .

der sich abbauenden Überspannung äußern. Ebenso liefern auch Belastungen mit unterschiedlicher Belastungsgeschwindigkeit eine Information über die Geschwindigkeitsabhängigkeit. Hier bilden sich die Viskositätsparameter nach (4.57) in den unterschiedlichen Überspannungen ab. Es werden zwei unterschiedliche Dehnungsgeschwindigkeiten  $\dot{e}_l$  und  $\dot{e}_s$  ( $l$ : langsam;  $s$ : schnell) benutzt. Bei Vorversuchen wurden Experimente mit einem Dehnratenverhältnis  $\dot{e}_s/\dot{e}_l = 2$  und  $\dot{e}_s = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  gefahren (s. Abb. 4.3a). Die erreichten Effekte durch die Dehnratenänderung in der stabilisierten Hysterese waren hier jedoch so gering, daß das Dehnratenverhältnis auf  $\dot{e}_s/\dot{e}_l = 10$  erhöht wurde (s. Abb. 4.3b). Die Dehnraten für die Belastungsphasen beträgt somit bis zum Punkt 9  $\dot{e}_s = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  und danach  $\dot{e}_l = 2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ .

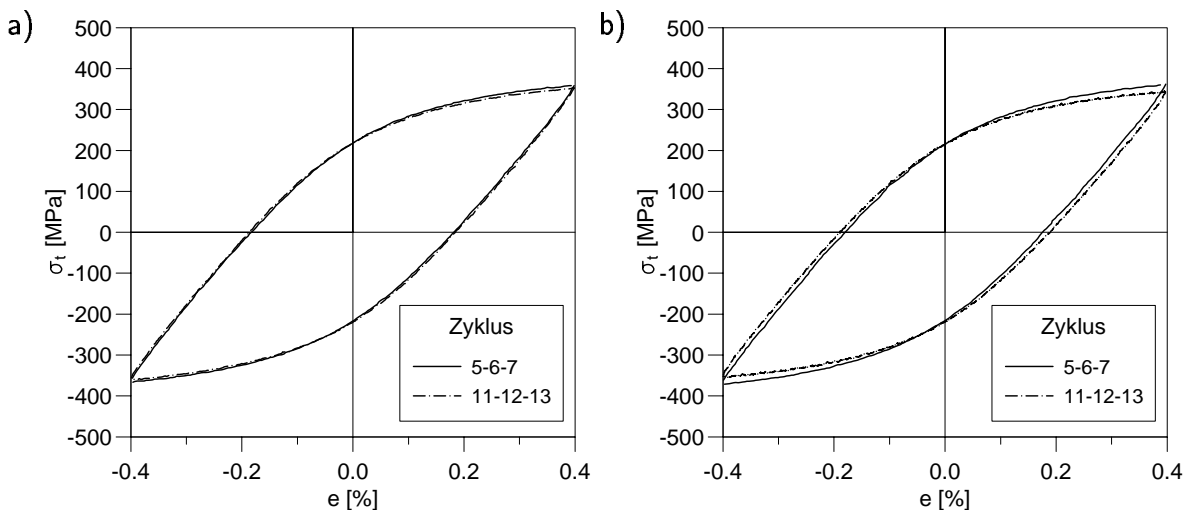


Abbildung 4.3: Effekt der Dehnrates auf die stabilisierte Hysterese bei  $T = 500 \text{ °C}$  a)  $\dot{e}_s/\dot{e}_l = 2$ , b)  $\dot{e}_s/\dot{e}_l = 10$ .



Anmerkung: Da sich die Vorversuche von den Identifikationsexperimenten nur im Dehnratenverhältnis unterscheiden, werden diese zu Anfang von Abschnitt 4.7 für die qualitative Diskussionen verwendet. Diese Experimente sind leicht an der deutlich kleineren Versuchsdauer von 3092 s erkennbar.

### Statische Erholung

Die drei Relaxationsphasen 7-7', 13-13' und 19-19' mit jeweils verdoppelter Dauer sowie die vorangehenden Zyklierungen dienen der eindeutigen Aufspaltung der statischen Erholungen für die isotrope und die kinematische Verfestigung. In den vorigen Abschnitten wurde gezeigt, daß die Effekte der statischen Erholung geeigneterweise mit Hilfe einer Relaxationsphase von den Verfestigungseffekten getrennt werden. Während einer Relaxationsphase kann jedoch nur ein Abfall des Spannungsbetrages beobachtet werden, welcher sich sowohl unter Zug als auch unter Druck gemäß (4.42) aus den drei Anteilen

$$\sigma = \xi + kR_\sigma + FR_\sigma \quad (4.96)$$

zusammensetzt. Alle drei Anteile nehmen über der Zeit mit unterschiedlicher Geschwindigkeit ab. Die Materialparameter der statischen Erholung können jedoch nur dann bestimmt werden, wenn der Verlauf von  $\kappa(t) = k(t) - k_0$  sowie  $\xi(t)$  bekannt ist. Dies bedeutet, es müssen zusätzliche Informationen über die zeitabhängige Aufteilung der Gesamtspannung vorliegen, um eine eindeutige Identifikation zu ermöglichen.

In einem ersten Schritt wird zunächst ein Relaxationsprozeß betrachtet. Abbildung 4.4a zeigt stellvertretend den Abbau der kinematischen Verfestigung durch die statische Erholung nach (4.91). Der Einfluß der Potenz  $w$  zeigt sich in der Krümmung des Verlaufes. Somit werden mindestens drei Werte der betreffenden inneren Variable  $k$  bzw.  $\xi$  benötigt, um die Materialparameter  $\pi$  und  $\omega$  bzw.  $p$  und  $w$  zu ermitteln.

Wie die notwendige Information zur Aufteilung der Gesamtspannung mit Hilfe der Prozeßführung gewonnen werden kann, zeigen die folgenden Überlegungen. Zunächst ist es sinnvoll, qualitative Effekte in der Dehnungs-Spannungs- bzw. Zeit-Spannungs-Trajektorie zu untersuchen, die der statischen Erholung der isotropen bzw. der kinematischen Verfestigung zugeordnet werden können. Hierzu wird von der Überlegung ausgegangen, daß die statische Erholung der isotropen Verfestigung den Radius der Fließfläche verkleinert, während die statische Erholung der kinematischen Verfestigung den Mittelpunkt der Fließfläche in Richtung des Nullpunktes bewegt.

Dieser Effekt ist in Abb. 4.4b dargestellt. Für dieses Beispiel wurden die beiden Verfestigungen sowie die beiden statischen Erholungen jeweils gleich groß gewählt; es ist jedoch

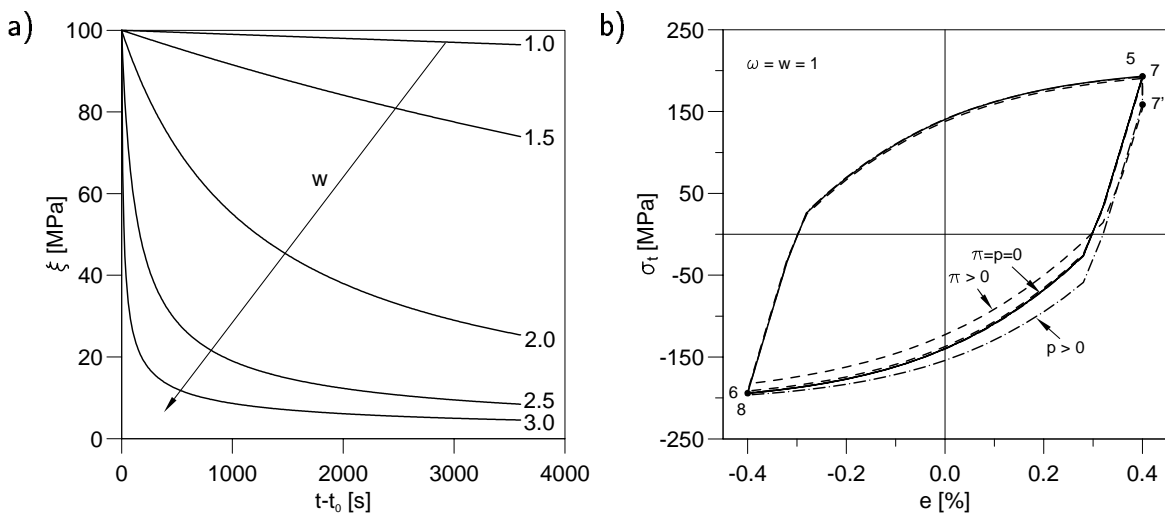


Abbildung 4.4: Qualitative Untersuchung der Effekte statischer Erholung: a) Verlauf der kinematischen Verfestigung nach (4.91) für  $\xi_0 = 100$  MPa; b) Unterschiede, die auf die statische Erholung der isotropen Verfestigung ( $\pi > 0$ ) bzw. der kinematischen Verfestigung ( $p > 0$ ) zurückzuführen sind.

immer nur eine statische Erholung aktiv. Um den elastisch-plastischen Übergang deutlich zu machen, wurde die Überspannung sehr klein gewählt. Die durchgezogene Kurve zeigt die nach einigen Lastzyklen in guter Näherung stabilisierte Hysterese, bestehend aus den Phasen 5–6 und 6–7 (siehe Abb. 4.2). Punkt 7' markiert die Lage des oberen Randes der Fließfläche am Ende der Relaxationsphase 7–7'.

Die Verkleinerung bzw. Verschiebung der Fließfläche wird als Differenz der Druckkurven 5–6 und 7'–8 (Druckkurve der stabilisierten Hysterese sowie der auf die Relaxation folgenden Druckkurve) deutlich sichtbar. Die Erholung der isotropen Verfestigung hebt die Kurve an, die Erholung der kinematischen Verfestigung senkt sie ab. Kombinationen davon befinden sich ihrer Stärke entsprechend zwischen diesen Extremen. Somit ist ein Maß gefunden, mit welchem sich die Erholung der jeweiligen Verfestigung zuordnen läßt.

Auf der Basis dieses Maßes kann der Verlauf der inneren Variablen durch Relaxationen unterschiedlicher Dauer, von der stabilisierten Hysterese ausgehend, gewonnen werden. Dabei ist die erneute Stabilisierung der Hysterese vor jeder Relaxation Voraussetzung, um die Relaxationsendpunkte als Resultat desselben Ausgangszustandes miteinander in Verbindung bringen zu können.

#### 4.4.1 Wahl des Simulationsbereichs

Zur Identifikation der Parameter müssen die experimentell gemessenen Daten vollständig innerhalb der durch die Trainingsmuster festgelegten Wertebereiche der Eingabe- und Ausgabedaten liegen. Diese Wertebereiche sind definiert durch die Wahl der Simulationsgrenzen bei der Generierung der Muster sowie durch die für die Eingabe- bzw. Ausgabedaten festzulegende Entdimensionierung. Dies bedeutet, daß bei geeigneter Entdimensionierung ein Parameter weit über die ursprünglichen Simulationsgrenzen hinaus identifizierbar sein kann.

Da jedoch die Tragweite dieser Generalisierung nicht bekannt ist, werden die Parameterbereiche möglichst realistisch gewählt. Liegen keine Erfahrungen über den denkbaren Bereich und die sinnvolle Wahl der Stützpunkte für einen Parameter vor, können die Kenngrößen in Tabelle 4.1 verwendet werden. In diesen Kenngrößen sind Materialparameter und charakteristische Prozeßgrößen so kombiniert, daß ein direkter Bezug zur Aufteilung der Gesamtspannung besteht, was eine anschauliche Wahl ermöglicht. Auf diese Weise wird z.B. die Wahl des Viskositätsparameters  $\eta$  in Abhängigkeit von der Potenz  $m$  und einer definierten Referenz-Prozeßgeschwindigkeit  $\dot{\epsilon}_{ref} := 10^{-3} \text{s}^{-1}$  automatisch bezüglich des meßbaren Effektes regularisiert, d.h. die Werte werden so gewählt, daß die resultierenden Stützpunkte gleichverteilte Überspannungen ergeben.

Initialer Tangentenmodul	$\sigma' = \gamma + \frac{3}{2}c$
Anteil von $k$ an $\sigma'$	$\sigma_k^{I*} = \frac{\gamma}{\sigma'}$
Anteil von $\xi$ an $\sigma'$	$\sigma_\xi^{I*} = \frac{3}{2} \frac{c}{\sigma'}$
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 von $\xi$ an $\Delta\Sigma$	$\Delta\Sigma_\xi^* = \frac{3}{2} \frac{c}{b} \frac{1}{\Delta\Sigma}$
Maximale Überspannung	$F_0 = (\eta \dot{\epsilon}_{ref})^{1/m}$
Bezogene statische	$\Delta\kappa^* = 1 - \kappa(t_0 + \Delta t_r) / \kappa_0$
Erholung	$\Delta\xi^* = 1 - \xi(t_0 + \Delta t_r) / \xi_0$

Tabelle 4.1: Kenngrößen zur Wahl des Simulationsbereiches.

Die für die folgenden Abschnitte verwendeten Trainings- und Verifikationsmuster werden durch zufällige Wahl der Kenngrößen innerhalb der in Tab. 4.2 angegebenen Grenzen erzeugt. Durch die Belegung mittels dieser Kenngrößen wird gewährleistet, daß auch bei Verwendung von Zufallszahlen nur sinnvolle Materialparameter gewählt werden. Die

Belegung mit zufälligen Werten bietet den Vorteil, daß jedes Muster für jeden Parameter einen einmalig vorkommenden Wert darstellt. Damit ist es möglich, den gewünschten Bereich ungeachtet der großen Zahl von Parametern mit wenigen Simulationen abzudecken. Zusätzlich verhindert dieses Vorgehen die Neigung zur Klassifikation bezüglich der trainierten Beispiele. (Auf diese Vorgehensweise zur Reduktion der Anzahl der Simulationen wird in Kapitel 5 näher eingegangen.)

Anhand zweier Sonderfälle läßt sich eine zusätzliche Bedingung für die sinnvolle Wahl von  $\sigma_\xi^{I*}$  im Zusammenhang mit  $\Delta\Sigma_\xi^*$  gewinnen (s. Tabelle 4.1). Wird  $\Delta\Sigma_\xi^*$  als frei wählbar zwischen  $0 \leq \Delta\Sigma_\xi^* \leq 1$  betrachtet, so muß für die Extremwerte 0 und 1 der Wert von  $\sigma_\xi^{I*}$  zwingend ebenfalls zu 0 bzw. 1 gewählt werden. Dies folgt aus der Überlegung, daß für reine isotrope bzw. reine kinematische Verfestigung kein Anteil am initialen Modul für die jeweils andere Verfestigungsart existiert (vgl. Abb. 4.5, gekennzeichnet durch  $\bullet$ ). Für den gesamten Bereich dazwischen ( $0 < \Delta\Sigma_\xi^* < 1$ ) sind die Extremwerte  $\sigma_\xi^{I*} = 0, 1$  ausgeschlossen, d.h. die Grenzkurven des erlaubten Gebietes müssen sich mit Ausnahme der Diagonalepunkte innerhalb der quadratischen Fläche befinden. Im folgenden werden die Grenzkurven als Viertelkreise vorgegeben, was allen Anforderungen entspricht und dennoch große Freiheit für die Wahl von  $\sigma_\xi^{I*}$  nach

$$1 - \sqrt{1 - \Delta\Sigma_\xi^{*2}} \leq \sigma_\xi^{I*} \leq \sqrt{1 - (1 - \Delta\Sigma_\xi^*)^2} \quad (4.97)$$

läßt. Zum Beispiel für gleiche Anteile isotroper und kinematischer Verfestigung an der maximalen Verfestigung ( $\Delta\Sigma_\xi^* = 0.5$ ) kann der Anteil der kinematischen Verfestigung am initialen Modul  $\sigma_\xi^{I*}$  zwischen 13% und 87% gewählt werden.

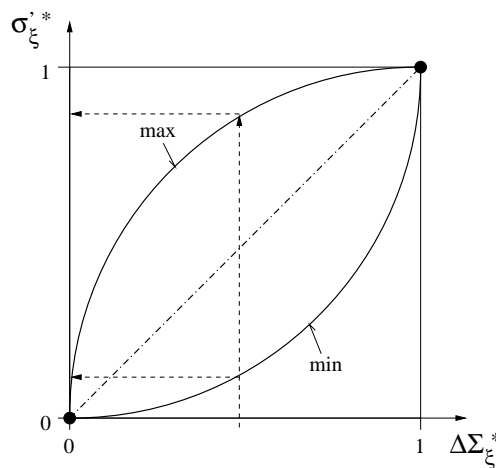


Abbildung 4.5: Grenzen für die Wahl von  $\sigma_\xi^{I*}$  bei gegebenem  $\Delta\Sigma_\xi^*$ .

Die insgesamt 500 Simulationen wurden zufällig in  $N_T = 450$  Trainingsmuster und in  $N_V = 50$  Verifikationsmuster aufgeteilt, wobei darauf geachtet wurde, daß die Verifikationsmuster innerhalb des Raumes der Trainingsmuster liegen.

Kenngroße	SI-Einheit	Min	Max	Kenngroße	SI-Einheit	Min	Max
$E$	[GPa]	70.	210.	$m$	[-]	1.	10.
$k_0$	[MPa]	1.	200.	$F_0$	[MPa]	10.	200.
$\sigma'$	[GPa]	10.	60.	$\omega$	[-]	1.	3.
$\Delta\Sigma$	[MPa]	10.	250.	$\Delta\kappa^*$	[-]	0.05	0.95
$\Delta\Sigma_\xi^*$	[-]	0.1	0.9	$\mathbf{w}$	[-]	1.	3.
$\sigma'_\xi^*$	[-]	Gl. (4.97)		$\Delta\xi^*$	[-]	0.05	0.95

Tabelle 4.2: Definition des Simulationsbereichs mittels der in Tabelle 4.1 angegebenen Kenngrößen.

Die durch numerische Simulationen erstellte Datenbasis für den betrachteten Prozeß in Abb. 4.1, bestehend aus Materialparametern und zugehörigen Zeit-, Dehnungs- und Spannungsdaten, wird in jedem der folgenden Abschnitte verwendet. Im folgenden sind immer alle Effekte aktiv und müssen durch geeignete Prozeßführung separiert bzw. von den Neuronalen Netzen berücksichtigt werden.

## 4.5 Generierung der Neuronalen Netze

Wie bei der Entwicklung der Prozeßführung stellt auch bei der Erstellung der Eingabe- und Ausgabedefinitionen Erfahrung einen wesentlichen Faktor dar. Ausgehend von den Materialgleichungen und den davon abgeleiteten Näherungslösungen können viele der Definitionen motiviert werden. Die endgültige Form ist jedoch das Produkt eines iterativen Prozesses, in dem oft empirisch Größen hinzugefügt oder bestehende Definitionen wegen z.B. einer hohen Sensitivität auf Meßfehler wieder herausgenommen wurden, obwohl letztere bei der Anwendung auf Simulationsdaten sehr gute Resultate erzielten. Da der Weg bei der Formulierung der Netzdefinitionen aufgrund dieser Gegebenheiten nicht deterministisch ist, werden im folgenden lediglich die endgültigen Definitionen dokumentiert, die nach gründlicher Überprüfung mit Simulationsbeispielen und experimentellen Meßdaten zuverlässige Ergebnisse lieferten. Dabei wird rein qualitativ erläutert, welche Größe welche Information beinhaltet.

### 4.5.1 Abtastung der Spannung

Die Generierung der Ein- und Ausgabedaten der Neuronalen Netze erfolgt in den mit (4.2) und (4.4) umgerechneten wahren Spannungen  $\sigma$  und logarithmischen Dehnungen  $\varepsilon$ . In vielen Fällen erscheint dies nicht notwendig, da meist nur kleine Dehnungen auftreten. Andererseits würden die Neuronalen Netze nach Möglichkeit die Umrechnung automatisch intern vornehmen. Dies wäre eine unnötige Belastung und kann durch eine systematische Umrechnung vermieden werden.

Insgesamt werden im folgenden drei Arten der Spannungsabtastung verwendet. Für die Diskretisierung der Belastungsphasen werden Abtastungen bei festen Totaldehnungen bzw. in äquidistanten plastischen Dehnungsintervallen vorgenommen. Der Spannungsverlauf während der Relaxationsphasen wird bei fest vorgegebenen Relaxationszeiten abgetastet.

#### Abtastung bei festen Totaldehnungen

Die Belastungsphase O-1 (siehe Abbildungen 4.1,4.2) wird in 10 äquidistante Intervalle aufgeteilt, die Belastungsphase 1-2, 2-3, ..., 6-7 ergeben für die gleichen Dehnungsabstände jeweils 20 Intervalle. Entspricht im folgenden die Indizierung  $j$  der Belastungsphase  $(j-1)-j$  (siehe Bezeichnung der Lastumkehrpunkte in Abb. 4.2), so sind die zugehörigen Dehnungswerte für eine Dehnungsamplitude  $e_a$  gegeben durch

$$e_{j,i} = \begin{cases} \frac{i}{10} e_a & i = 1 \dots 10, \quad \text{für } j = 1 \\ (-1)^j \left(1 - \frac{i}{10}\right) e_a & i = 1 \dots 20, \quad \text{für } j > 1. \end{cases} \quad (4.98)$$

#### Abtastung in äquidistanten plastischen Dehnungsintervallen

Da die plastische Dehnschwingbreite bei fester Dehnungsamplitude sehr unterschiedlich sein kann, wird jede Zug- und Druckphase in 20 äquidistante plastische Dehnungsintervalle aufgeteilt, wobei die Randwerte durch die plastischen Dehnungen an den Lastumkehrpunkten gegeben sind. Die Randwerte sind somit nicht identisch mit den Extremwerten, da beim Durchlaufen der Überspannung nach einer Lastumkehr die plastische Dehnung noch etwas in die bisherige Richtung weiterwächst (s. Abb. 4.6).

Die Stützpunkte für das Abtasten der Spannung sind somit definiert mit

$$\varepsilon_{pj,i} = \begin{cases} \frac{i}{10} \varepsilon_{p1} & i = 1 \dots 10, \quad \text{für } j = 1 \\ \varepsilon_{pj-1} + (-1)^j \left(1 - \frac{i}{20}\right) (\varepsilon_{pj} - \varepsilon_{pj-1}) & i = 1 \dots 20, \quad \text{für } j > 1 \end{cases}, \quad (4.99)$$

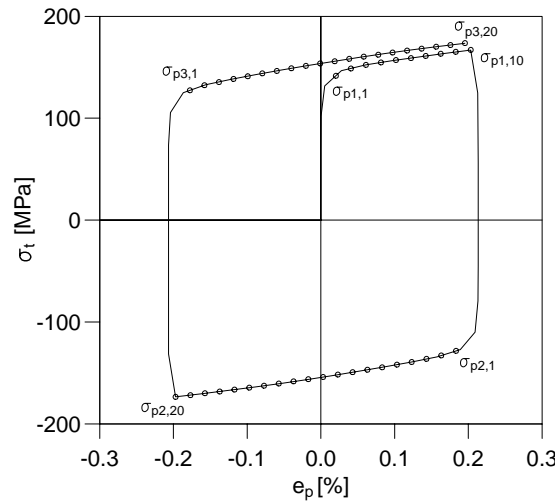


Abbildung 4.6: Numerisches Beispiel für die Abtastung der Spannungsdaten mit abschnittsweise äquidistanten plastischen Dehnungsintervallen.

wobei der Index  $j$  die aktuelle Belastungsphase  $(j-1)$ - $j$  bezeichnet. Im folgenden sollen die diesen Stützpunkten zugeordneten Spannungen mit

$$\sigma_{pj,i} := \sigma(\varepsilon_p = \varepsilon_{pj,i}) \quad (4.100)$$

bezeichnet werden. Diese Spannungswerte werden durch lineare Interpolation aus den zur Verfügung stehenden Daten der Belastungsphase  $(j-1)$ - $j$  ermittelt (siehe Abb. 4.6).

### Abtastung bei festen Relaxationszeiten

Für eine Relaxationsphase wird die Spannung zu den Zeiten

$$\Delta t_{rj,i} = 2^{i-1} \cdot 1 \text{ s}, \quad i = 1 \dots I_{rj} \quad (4.101)$$

abgetastet, wobei  $I_{rj}$  in Tabelle 4.3 angegeben ist. Die Indizierung  $rj$  bezeichnet hierbei die Nummer der Relaxation gemäß Tabelle 4.3. Die jeweilige maximale Relaxationsdauer soll im folgenden mit  $\Delta t_{rj} := \Delta t_{rj,I_{rj}}$  bezeichnet werden.

## 4.5.2 Elastizitätsmodul

Bei viskoplastischem Materialverhalten ist die Ermittlung des Elastizitätsmoduls durchaus nichttrivial. Wie in Abschnitt 4.3.1 erläutert wurde, entsteht für viskoplastisches Materialverhalten beim Übergang vom elastischen in den viskoplastischen Bereich kein

Relaxation	$rj$	$I_{rj}$	$\Delta t_{rj}$ [s]
7–7'	1	9	256
13–13'	2	10	512
19–19'	3	11	1024

Tabelle 4.3: Daten der Relaxationsphasen.

Knick im Kurvenverlauf. Aufgrund des glatten Übergangs fällt es schwer, den elastischen Bereich zu isolieren. In der Regel wird ein Schwellwert für die Abweichung des aktuellen Spannungspunktes von der Fitgeraden durch die davorliegenden Punkte herangezogen. Der ermittelte Steigungswert hängt somit wieder von der Wahl des Schwellwertes ab. Mit Hilfe eines Neuronalen Netzes kann dieses Problem unabhängig von willkürlich gewählten Toleranzen gelöst werden.

### Eingabedefinition

Für die Eingabedefinition wird der Verlauf der stabilisierten Hysterese, gegeben durch die Belastungsphasen 5–6 und 6–7 sowie der Belastung in Druckrichtung 7'–8 nach der ersten Relaxation verwendet. Hierzu werden die durch die Abtastpunkte bei festen Totaldehnungen gegebenen Sekantensteigungen durch die Steigung der Diagonalen der Hysterese entdimensioniert:

$$x_1 \dots x_{17} := \frac{\sigma_{6,i} - \sigma_{6,i-1}}{\sigma_7 - \sigma_6}, \quad i = 3 \dots 19, \quad (4.102)$$

$$x_{18} \dots x_{34} := \frac{\sigma_{7,i} - \sigma_{7,i-1}}{\sigma_7 - \sigma_6}, \quad i = 3 \dots 19, \quad (4.103)$$

$$x_{35} \dots x_{52} := \frac{\sigma_{8,i} - \sigma_{8,i-1}}{\sigma_7 - \sigma_6}, \quad i = 2 \dots 19. \quad (4.104)$$

Bei diesen Eingabedefinitionen wurden für die Steigungsbildung absichtlich keine Randpunkte der Prozeßphasen verwendet, da hier bezüglich der Spannungs- und Dehnungswerte durch die Beschleunigung der Maschine die größten Unsicherheiten entstehen.

### Ausgabedefinition

Der Wert des Elastizitätsmoduls wird durch die Steigung der Diagonalen der stabilisierten Hysterese entdimensioniert, womit

$$y := E \left/ \left( \frac{\sigma_7 - \sigma_6}{\varepsilon_7 - \varepsilon_6} \right) \right. . \quad (4.105)$$



Für die Trainingsmuster ist der Wertebereich von  $y$  somit durch das Intervall  $[1.04, 15.9]$  gegeben.

### Training und Verifikation

Das Neuronale Netz besteht aus 52 Eingabeneuronen, 25 und zehn Neuronen in der ersten und zweiten verdeckten Schicht und einem Ausgabeneuron. Das Training dauerte 500 Epochen und führte zu MSE-Werten von 0.00001 für die Trainings- und die Verifikationsmuster. Aufgrund der kurzen Trainingsdauer und des verschwindenden Fehlers kann auf eine hohe Identifikationsgenauigkeit geschlossen werden. Die charakteristischen Daten des Neuronalen Netzes sind in Tabelle 4.8 (Abschnitt 4.5.6) im Vergleich mit den anderen Netzen angegeben.

Die mit dem trainierten Netz erzielten Ergebnisse sind in Abb. 4.7 dargestellt. Abbildung 4.7a zeigt den identifizierten Wert  $E_{id}$  aufgetragen über den korrekten Wert  $E$ . Sowohl für die Trainings- als auch für die Verifikationsmuster können nur geringfügige Abweichungen festgestellt werden. In Abb. 4.7b ist die Verteilung des relativen Fehlers  $err_i$  aufgetragen (siehe Gl. (2.96)). Diese Graphik zeigt, daß 90% der Trainings und Verifikationsmuster einen Fehler kleiner als 4% aufweisen. Die Identifikation des Elastizitätsmoduls kann damit als sehr genau bezeichnet werden.

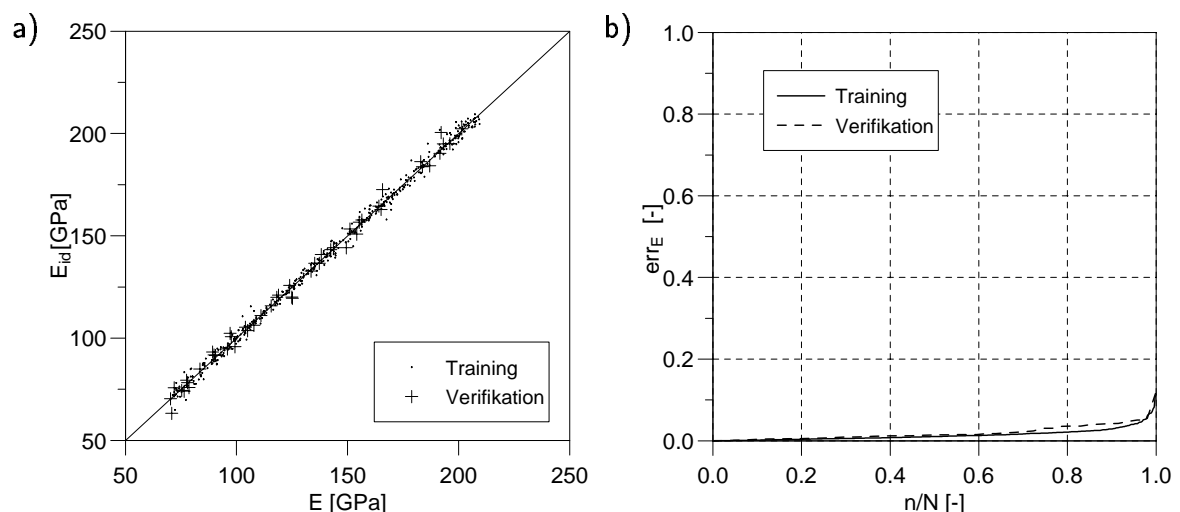


Abbildung 4.7: a) Identifikation des Elastizitätsmoduls; b) Verteilung des relativen Fehlers  $err_E \equiv err_1$ .

### 4.5.3 Parameter der Viskosität

Wegen (4.46) ist das Verhältnis der beiden Überspannungen durch

$$\frac{F_s}{F_l} = \left( \frac{\dot{s}_s}{\dot{s}_l} \right)^{1/m} \quad (4.106)$$

gegeben. Das bedeutet, daß der Materialparameter  $m$  für die Geschwindigkeitsabhängigkeit während der Belastung verantwortlich ist.

Für zunehmende Werte von  $m$  wird die Geschwindigkeitsabhängigkeit immer geringer. Gleichzeitig hat dies eine starke Verlangsamung des Relaxationsprozesses zur Folge. Um dies zu zeigen, muß für eine feste Überspannung  $F_0$  zu Beginn der Relaxation der Wert von  $\eta$  in Abhängigkeit von  $m$  nach (4.46) ermittelt und in (4.58) eingesetzt werden, womit direkt

$$\dot{F} = -E\dot{s}_0 \left( \frac{F}{F_0} \right)^m \quad (4.107)$$

folgt. Somit erhält man für ein beliebiges aber festes Verhältnis  $F/F_0 < 1$  einen mit steigendem  $m$  abnehmenden Betrag der Geschwindigkeit  $\dot{F}$ . Dies hat wiederum zur Folge, daß die Relaxationsdaten unvollständig bezüglich der zugeordneten statischen Spannung (und somit bezüglich der Überspannung) zu Beginn der Relaxation werden, denn die statische Spannung wird während der Relaxation ebenfalls durch die statische Erholung abgebaut.

#### Eingabedefinition

Gemäß (4.107) charakterisiert die dimensionslose Spannungsrate  $\dot{\sigma}/(E\dot{s}_0)$  das Verhältnis der aktuellen Überspannung zur ursprünglich vorhandenen Überspannung hoch der Potenz  $m$  und wird für die ersten Eingabedaten verwendet:

$$x_1 \dots x_7 := \frac{(\sigma_{r1,i} - \sigma_{r1,i-1})/(\Delta t_{r1,i} - \Delta t_{r1,i-1})}{E\dot{s}_7}, \quad i = 3 \dots 9, \quad (4.108)$$

$$x_8 \dots x_{15} := \frac{(\sigma_{r2,i} - \sigma_{r2,i-1})/(\Delta t_{r2,i} - \Delta t_{r2,i-1})}{E\dot{s}_{13}}, \quad i = 3 \dots 10, \quad (4.109)$$

$$x_{16} \dots x_{24} := \frac{(\sigma_{r3,i} - \sigma_{r3,i-1})/(\Delta t_{r3,i} - \Delta t_{r3,i-1})}{E\dot{s}_{19}}, \quad i = 3 \dots 11. \quad (4.110)$$

Die plastischen Dehnraten sind mit

$$\dot{s}_j \approx \frac{\varepsilon_{pj,20} - \varepsilon_{pj,19}}{t_{j,20} - t_{j,19}} \quad (4.111)$$

unter Verwendung von

$$\varepsilon_{pj,i} = \varepsilon_{j,i} - \sigma_{j,i}/E \quad (4.112)$$

zu berechnen.

Die bereits abgebaute Überspannung wird beschrieben durch die Eingabedaten:

$$x_{25} \dots x_{32} := \frac{\sigma_7 - \sigma_{r1,i}}{\sigma_7}, \quad i = 2 \dots 9, \quad (4.113)$$

$$x_{33} \dots x_{41} := \frac{\sigma_{13} - \sigma_{r2,i}}{\sigma_7}, \quad i = 2 \dots 10, \quad (4.114)$$

$$x_{42} \dots x_{51} := \frac{\sigma_{19} - \sigma_{r3,i}}{\sigma_7}, \quad i = 2 \dots 11. \quad (4.115)$$

Der Bezug zwischen den Überspannungen zu Anfang der Relaxationen wird durch die Eingabedaten

$$x_{52} := \frac{\sigma_{13} - \sigma_{13'}}{\sigma_7}, \quad (4.116)$$

$$x_{53} := \frac{\sigma_{19} - \sigma_{19'}}{\sigma_7} \quad (4.117)$$

hergestellt.

### Ausgabedefinition

Für die Identifikation wird der Wert von  $m$  indirekt durch seinen Einfluß auf die Überspannung ermittelt

$$y_1 := \left( \frac{\dot{s}_{13}}{\dot{s}_7} \right)^{1/m} \quad \left( = \frac{F_{13}}{F_7} \right), \quad (4.118)$$

wodurch gleichzeitig der Wert von  $m$  selbst nicht mehr durch den Maximalwert der Trainingsmuster nach oben beschränkt wird. Das bedeutet, daß auch identifizierte Werte  $m > 10$  gültig sind, solange der Wertebereich von  $y_1$  nicht verlassen wird. Die gesuchte Überspannung wird in Form von

$$y_2 := \frac{F_7}{\sigma_7 - \sigma_{7'}} \quad (4.119)$$

bestimmt. Für starke statische Erholungseffekte kann  $y_2$  kleiner eins werden (siehe Tabelle 4.4).

## Training und Verifikation

Das Neuronale Netz besteht aus 55 Eingabeneuronen, 30 und zehn Neuronen in der ersten und zweiten verdeckten Schicht sowie zwei Ausgabeneuronen. Das Training dauerte 4000 Epochen und führte zu MSE-Werten von 0.00045 und 0.00065 für die Trainings- bzw. Verifikationsmuster. Aufgrund der sehr kleinen Fehler kann auch hier auf eine hohe Identifikationsgenauigkeit geschlossen werden.

Die charakteristischen Daten des Neuronalen Netzes sind in Tabelle 4.8 (Abschnitt 4.5.6) im Vergleich mit den anderen Netzen angegeben. In Tabelle 4.4 sind die Wertebereiche der Ausgabeneuronen sowie die ermittelten Konfidenzintervalle der Trainings- und Verifikationsmuster zusammengefaßt. Die Identifikationsqualität ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Anhand dieser Ergebnisse kann festgestellt werden, daß das Neuronale Netz in der Lage ist, anhand der zur Verfügung stehenden Daten die Materialparameter trotz der Anwesenheit von statischer Erholung eindeutig zu ermitteln.

Ausgang	$F_{13}/F_7$	$F_7$
Min [-]	0.103	0.358
Max [-]	0.912	2.712
$err_T$ 90% [%]	5.9	13.5
$err_V$ 90% [%]	10.3	13.1

Tabelle 4.4: Wertebereiche der Ausgabedaten sowie 90%-Konfidenzintervalle für die Identifikation der Viskositätsparameter.

### 4.5.4 Innere Variablen

Aufgrund der gewonnenen Erfahrungen ist es zweckmäßig, die Werte der inneren Variablen  $\xi$  und  $k$  an verschiedenen Punkten, insbesondere zu Beginn und am Ende jeder Relaxation, mit dem hier zu formulierenden Netz zu bestimmen. In einem nachfolgenden Schritt können auf der Basis dieser Ergebnisse die Materialparameter der Plastizität sowie der statischen Erholung präziser ermittelt werden. Im Fall der Plastizitätsparameter ist dieser Zwischenschritt wichtig, da die Fließspannung immer kleiner sein muß, als die isotrope Verfestigung zum Ende der längsten Relaxation. In Bezug auf die statische Erholung wird es aufgrund der bekannten Verläufe der inneren Variablen möglich sein, bereits vorher zu entscheiden, für welche Verfestigung eine identifizierbare Erholung vorliegt.

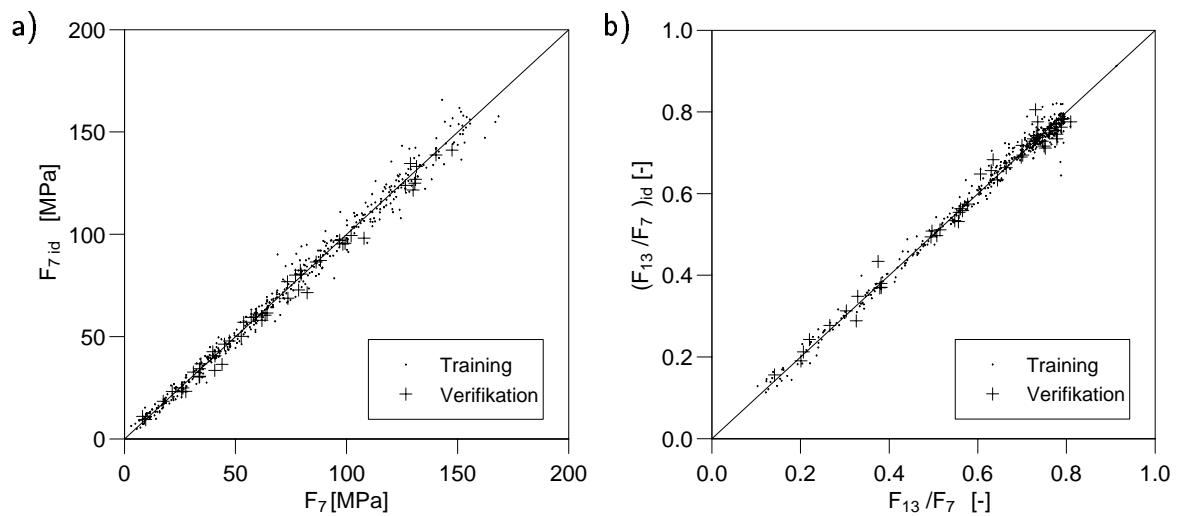


Abbildung 4.8: Auswertung der Viskositätsparameter: a) Überspannung; b) Geschwindigkeitsabhängigkeit.

Die Identifikation des Verhaltens der isotropen Verfestigung aus Experimenten erwies sich für Daten, die ausschließlich bei festen Totaldehnungen abgetastet wurden, als zu empfindlich gegenüber der Modellabweichung. Dies zeigte sich unmittelbar an Werten der isotropen Verfestigung, die kleiner als die Fließspannung waren. Als Hauptgrund ließ sich ein experimentelles Phänomen ausmachen, das zu Fehlinterpretationen durch das Neuronale Netz führt.

Das Beispiel in Abb. 4.9 soll dies verdeutlichen. In Abb. 4.9a wird von einem Experiment bei  $T = 350\text{ °C}$  die erste Zugbelastungsphase O–1 sowie die Belastungsphase 6–7 (Zugphase der stabilisierten Hysterese) betrachtet. Wohlgermerkt beinhaltet die Belastungsphase 6–7 die Überspannung und den aktuellen Fließradius zweifach (vom unteren Rand bis zum Mittelpunkt der Fließfläche und von dort wiederum bis zum oberen Rand), während die Belastungsphase O–1 nur die Hälfte davon umfaßt (Beginn ist der Mittelpunkt der Fließfläche). Zum direkten graphischen Vergleich wurden deshalb die Dehnung und die Spannung der Belastungsphase O–1 mit einem Faktor zwei multipliziert.

Die gleiche Auftragungsweise der Modellantwort für reine kinematische Verfestigung in Abb. 4.9b zeigt gegenüber dem Experiment einen deutlichen qualitativen Unterschied. Als Antwort des Modells kann die Belastungskurve 6–7 niemals unterhalb der ersten Zugbelastung verlaufen, wie es bei dem experimentell gemessenen Verlauf der Fall ist. Dies resultiert aus der Annahme eines rein elastischen Bereichs bei der Formulierung des Modells, was natürlich eine Idealisierung der realen Vorgänge darstellt. Ein mit

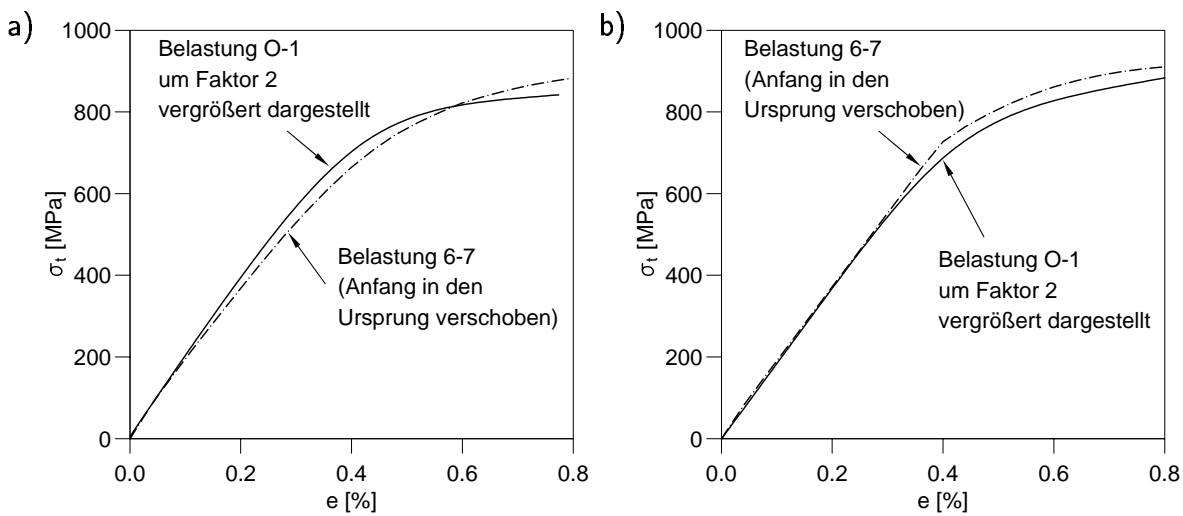


Abbildung 4.9: Ausbildung des "elastischen" Bereichs für die erste Belastung und nach Zyklierung: a) Experiment; b) Modell.

solch idealisierten Modelldaten trainiertes Neuronales Netz ist jedoch gezwungen, die Meßdaten im Sinne des Modells zu interpretieren und wird die realen Verhältnisse als Verkleinerung des Fließradius interpretieren. Somit wird eine negative isotrope Verfestigung bestimmt.

Zur Behebung des Problems der scheinbar kleiner werdenden Fließfläche müssen Daten verwendet werden, die den anfänglichen "elastischen" Bereich ausschließen. Um dennoch die maximale Information über das nichtlineare Verfestigungsverhalten zu berücksichtigen, ist es für einige Eingabedefinitionen zweckmäßig, die Stützpunkte bezüglich der plastischen Dehnung abzutasten (siehe Abschnitt 4.5.1).

Durch den Ausschluß des elastischen Bereichs entsteht eine Unvollständigkeit bezüglich der Entwicklung der isotropen Verfestigung. Diese Unvollständigkeit kann jedoch durch die Einarbeitung neuer Maße wieder aufgehoben werden. Ein solches geeignetes Maß kann durch Betrachtung von Abb. 4.10 gefunden werden. Die Entwicklung der isotropen Verfestigung zeigt sich in einem Keil, gebildet aus der ersten Belastung O-1 und der folgenden Zugphase 2-3. Dies kann analog mit der Differenz zwischen den Druckphasen 1-2 und 3-4 fortgesetzt werden. Somit repräsentieren die Differenzen dieser Kurven eine geeignete Information über die Entwicklung der isotropen Verfestigung.

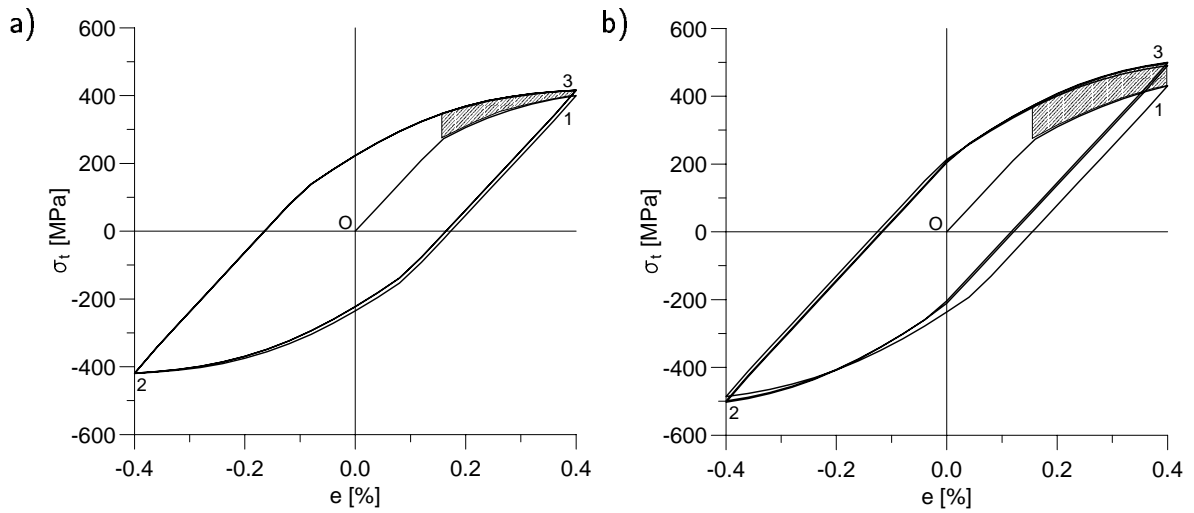


Abbildung 4.10: Numerisches Beispiel für den Einfluß der isotropen Verfestigung: a) reine kinematische Verfestigung; b) isotrope und kinematische Verfestigung.

### Eingabedefinition

Die in Abb. 4.10 veranschaulichten Spannungsdifferenzen werden durch die Eingabedefinitionen

$$x_1 \dots x_9 := \frac{\sigma_{3,i+10} - \sigma_{1,i}}{\sigma_1}, i = 1, 9, \quad (4.120)$$

$$x_{10} \dots x_{19} := \frac{\sigma_{4,i} - \sigma_{2,i}}{\sigma_1}, i = 1, 3, \dots, 19 \quad (4.121)$$

repräsentiert. Es folgen Angaben über die weitere Entwicklung der isotropen Verfestigung infolge der Zyklisierung

$$x_{20} \dots x_{26} := \frac{|\sigma_j - \sigma_{j-1}| - 2F_7}{\sigma_7 - F_7}, j = 1 \dots 7, 9, \quad (4.122)$$

$$x_{27} \dots x_{29} := \frac{|\sigma_j - \sigma_{j-1}| - 2F_{13}}{\sigma_7 - F_7}, j = 10 \dots 13, \quad (4.123)$$

$$x_{28} \dots x_{34} := \frac{|\sigma_j - \sigma_{j-1}| - 2F_{13}}{\sigma_7 - F_7}, j = 15 \dots 19. \quad (4.124)$$

Eine Information über die Nichtlinearität der kinematischen Verfestigung wird anhand der Zugbelastungsphase für die stabilisierte Hysterese in Form von

$$x_{35} \dots x_{43} := \frac{\sigma_{p7,i} - \sigma_{p7,2}}{\sigma_7 - \sigma_{p7,2}}, i = 3, 5, \dots, 19 \quad (4.125)$$

geliefert, wobei der Bezug zur Gesamtspannung durch den Wert

$$x_{44} := \frac{\sigma_7 - \sigma_{p7,2}}{\sigma_7} \quad (4.126)$$

hergestellt wird. Zusätzlich wird die stabilisierte Hysterese durch die Verhältnisse

$$x_{45} \dots x_{53} := \frac{\sigma_{p6,i} - \sigma_{p6,i-2}}{\sigma_7}, i = 4, 6, \dots 20, \quad (4.127)$$

$$x_{54} \dots x_{62} := \frac{\sigma_{p7,i} - \sigma_{p7,i-2}}{\sigma_7}, i = 4, 6, \dots 20, \quad (4.128)$$

charakterisiert. Den Angaben über das Verfestigungsverhalten folgt die verfügbare Information über das viskose Verhalten mit

$$x_{63} := \frac{F_7}{\sigma_7}, \quad (4.129)$$

$$x_{64} := \frac{F_{13}}{\sigma_7}, \quad (4.130)$$

$$x_{65} := \left( \frac{\dot{s}_7}{\dot{s}_{13}} \right)^{1/m}, \quad (4.131)$$

$$x_{66} \dots x_{73} := \frac{\sigma_{r1,i} - \sigma_{r3,I_{r3}}}{\sigma_7 - \sigma_{r3,I_{r3}}}, i = 1 \dots 8, \quad (4.132)$$

$$x_{74} \dots x_{82} := \frac{\sigma_{r2,i} - \sigma_{r3,I_{r3}}}{\sigma_7 - \sigma_{r3,I_{r3}}}, i = 1 \dots 9. \quad (4.133)$$

Die Bezugsgröße  $\sigma_7 - \sigma_{r3,I_{r3}}$  beschreibt hierbei die maximale Relaxationsspanne des Experiments. Zur Unterstützung der Ermittlung der isotropen Verfestigung über der Relaxationsdauer beschreiben die folgenden Eingabedefinitionen die Veränderung des Fließflächendurchmessers an den betreffenden Stellen:

$$x_{83} := \frac{\sigma_{p8,2} - \sigma_7}{\sigma_{p7,2} - \sigma_6}, \quad (4.134)$$

$$x_{84} := \frac{\sigma_{p13,2} - \sigma_{12}}{\sigma_{p7,2} - \sigma_6}, \quad (4.135)$$

$$x_{85} := \frac{\sigma_{p19,2} - \sigma_{18}}{\sigma_{p7,2} - \sigma_6}, \quad (4.136)$$

$$x_{86} := \frac{\sigma_{p14,2} - \sigma_{13'}}{\sigma_{p13,2} - \sigma_{12}}, \quad (4.137)$$

$$x_{87} := \frac{\sigma_{p20,2} - \sigma_{19'}}{\sigma_{p19,2} - \sigma_{18}}. \quad (4.138)$$

Schließlich werden die Absenkungen der Druckkurven in Anlehnung an die Erläuterungen in Abschnitt 4.4 angegeben:

$$x_{88} \dots x_{97} := \frac{\sigma_{6,i} - \sigma_{8,i}}{\sigma_{7'}}, i = 2, 4, \dots 20, \quad (4.139)$$

$$x_{98} \dots x_{107} := \frac{\sigma_{12,i} - \sigma_{14,i}}{\sigma_{13'}}, i = 2, 4, \dots 20, \quad (4.140)$$

$$x_{108} \dots x_{117} := \frac{\sigma_{18,i} - \sigma_{20,i}}{\sigma_{19'}}, i = 2, 4, \dots 20. \quad (4.141)$$



### Ausgabedefinition

Für eine möglichst getreue Wiedergabe des Gesamtverlaufs wird hierfür zunächst eine Folge von statischen Spannungen bestimmt, wobei die verwendeten Werte der Überspannung näherungsweise nach (4.59) unter Verwendung der bekannten Viskositätsparameter sowie der entsprechenden Überspannungen  $F_7$ ,  $F_{13}$  bzw.  $F_{19}$  zu Beginn der jeweiligen Relaxation zu berechnen sind:

$$y_1 := \frac{\sigma_7^{(s)} + F_7}{\sigma_7}, \quad (4.142)$$

$$y_2 := \frac{\sigma_{7'}^{(s)} + F_{7'}}{\sigma_{7'}}, \quad (4.143)$$

$$y_3 := \frac{\sigma_{13'}^{(s)} + F_{13'}}{\sigma_{13'}}, \quad (4.144)$$

$$y_4 := \frac{\sigma_{19'}^{(s)} + F_{19'}}{\sigma_{19'}}. \quad (4.145)$$

Aufgrund der leichter abzuschätzenden Fließflächendurchmesser werden an denselben Punkten die zugeordneten Werte der isotropen Verfestigung ermittelt, womit aus der statischen Spannung durch Subtraktion die entsprechende kinematische Verfestigung zu berechnen ist:

$$y_5 := \frac{k_1}{\frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_{p2,2} - 2F_7)}, \quad (4.146)$$

$$y_6 := \frac{k_7}{\frac{1}{2}(\sigma_{p7,2} - \sigma_6 - 2F_7)}, \quad (4.147)$$

$$y_7 := \frac{k_{7'}}{k_7}, \quad (4.148)$$

$$y_8 := \frac{k_{13'}}{k_7}, \quad (4.149)$$

$$y_9 := \frac{k_{19'}}{k_7}. \quad (4.150)$$

### Training und Verifikation

Das Neuronale Netz besteht aus 117 Eingabeneuronen, 50 und 20 Neuronen in der ersten und zweiten verdeckten Schicht sowie 9 Ausgabeneuronen. Das Training dauerte 2000 Epochen und führte zu MSE-Werten von 0.00028 und 0.00395 für die Trainings- bzw. Verifikationsmuster.

Die charakteristischen Daten des Neuronalen Netzes sind in Tabelle 4.8 (Abschnitt 4.5.6) im Vergleich mit den anderen Netzen angegeben. In Tabelle 4.5 sind die Wertebereiche

der Ausgabeneuronen sowie die ermittelten Konfidenzintervalle für die Trainings- und Verifikationsmuster zusammengefaßt. Es sind durchgängig kleine Wertebereiche und sehr kleine Konfidenzintervalle festzustellen. Dies bedeutet, daß die inneren Variablen  $\sigma^{(s)}$ ,  $k$  und somit auch  $\xi$  sehr genau identifiziert werden können.

Ausgang	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$	$y_5$	$y_6$	$y_7$	$y_8$	$y_9$
Min	0.969	0.915	0.909	0.902	0.565	0.566	0.372	0.285	0.234
Max	1.000	1.003	1.000	1.000	1.035	1.082	1.003	1.0126	0.997
$err_T$ 90% [%]	0.0	0.2	0.2	0.2	0.9	1.0	1.3	1.6	1.7
$err_V$ 90% [%]	0.1	0.4	0.5	0.6	1.9	2.1	4.0	6.6	4.9

Tabelle 4.5: Wertebereiche der Ausgabedaten sowie 90%-Konfidenzintervalle für die Identifikation der Werte der inneren Variablen.

#### 4.5.5 Plastizitätsparameter

##### Eingabedefinition

Für die Ermittlung der Materialparameter der Plastizität ist die Trajektorie der statischen Spannung wesentlich. Daher werden abgesehen von Steigungsdaten die Eingabedaten um die Überspannung reduziert. Die Eingabedefinitionen des vorangegangenen Netzes, welche sich auf die Lastzyklen vor der ersten Relaxation beziehen, werden entsprechend modifiziert übernommen:

$$x_1 \dots x_9 := \frac{\sigma_{3,i+10} - \sigma_{1,i}}{\sigma_1 - F_7}, i = 1, 9, \quad (4.151)$$

$$x_{10} \dots x_{19} := \frac{\sigma_{4,i} - \sigma_{2,i}}{\sigma_1 - F_7}, i = 1, 3, \dots, 19, \quad (4.152)$$

$$x_{20} \dots x_{25} := \frac{|\sigma_j - \sigma_{j-1}| - 2F_7}{\sigma_7 - F_7}, j = 1 \dots 7, \quad (4.153)$$

$$x_{26} \dots x_{34} := \frac{\sigma_{p7,i} - \sigma_{p7,2}}{\sigma_7 - \sigma_{p7,2}}, i = 3, 5, \dots, 19, \quad (4.154)$$

$$x_{35} := \frac{\sigma_7 - \sigma_{p7,2}}{\sigma_7 - F_7}, \quad (4.155)$$

$$x_{36} \dots x_{44} := \frac{\sigma_{p6,i} - \sigma_{p6,i-2}}{\sigma_7 - F_7}, i = 4, 6, \dots, 20, \quad (4.156)$$

$$x_{45} \dots x_{53} := \frac{\sigma_{p7,i} - \sigma_{p7,i-2}}{\sigma_7 - F_7}, i = 4, 6, \dots, 20, \quad (4.157)$$

$$x_{54} := \frac{F_7}{\sigma_7}. \quad (4.158)$$

Diese Angaben werden durch die nun bekannten Werte der inneren Variablen ergänzt:

$$x_{55} := \frac{k_1}{k_7}, \quad (4.159)$$

$$x_{56} := \frac{k_{7'}}{k_7}, \quad (4.160)$$

$$x_{57} := \frac{k_{13'}}{k_7}, \quad (4.161)$$

$$x_{58} := \frac{k_{19'}}{k_7}. \quad (4.162)$$

### Ausgabedefinition

Die Materialparameter der isotropen Verfestigung werden mit den Ausgabeneuronen

$$y_1 := \frac{k_0}{k_1}, \quad (4.163)$$

$$y_2 := \frac{\gamma}{(k_1 - k_0)/\varepsilon_{p1}} \quad (4.164)$$

festgelegt. Ist  $\gamma$  bekannt, ist auch der Wert von  $\beta$  wegen (4.63) als Lösung der nichtlinearen Gleichung

$$0 = (k_7 - k_0) - \frac{\gamma}{\beta} [1 - e^{-\beta s_7}] \quad (4.165)$$

gegeben.

Durch den aus den Differentialgleichungen (4.65) und (4.66) unter Berücksichtigung von (4.48) abgeleiteten Differenzenquotienten im Punkt 7

$$y_3 := \frac{\frac{3}{2}c - (b-1)\xi_7}{\left. \frac{\Delta\sigma}{\Delta s} \right|_7} \quad (4.166)$$

wird die korrekte Steigung im Lastumkehrpunkt betont, berechnet mit

$$\left. \frac{\Delta\sigma}{\Delta s} \right|_7 := \frac{\sigma_7 - \sigma_{p7,10}}{\varepsilon_{p7} - \varepsilon_{p7,10}}. \quad (4.167)$$

Ist mit

$$y_4 := \frac{\frac{3}{2}c}{\xi_7/\varepsilon_{p1}} \quad (4.168)$$

die Anfangssteigung der kinematischen Verfestigung bekannt, kann aus  $y_3$  der Wert des Parameters  $b$  bestimmt werden.

Theoretisch könnte  $\frac{\Delta\sigma}{\Delta s}\Big|_7$  dann zu null werden, wenn bereits nach der ersten Hälfte der bei der Zyklisierung aufgebrauchten plastischen Dehnung keine Entwicklung der Verfestigung mehr stattfinden würde. Da dies experimentell aber mit großer Wahrscheinlichkeit zum Ausknicken der verwendeten schlanken Proben im Druck führen würde, kommen solche Fälle nicht in Betracht (vergleiche hierzu auch Abschnitt 4.7.5). Aus diesem Grund wurden alle Muster, für die  $\frac{\Delta\sigma}{\Delta s}\Big|_7 < 1000$  MPa betrug, bei dem Training nicht berücksichtigt. Dies führt zu der geringfügigen Verringerung der Anzahl an Mustern, welche in Tabelle 4.8 angegeben ist.

### Training und Verifikation

Das Neuronale Netz besteht aus 58 Eingabeneuronen, 25 und 12 Neuronen in der ersten und zweiten verdeckten Schicht sowie 4 Ausgabeneuronen. Das Training dauerte 5000 Epochen und führte zu MSE-Werten von 0.00108 und 0.00671 für die Trainings- bzw. Verifikationsmuster.

Die charakteristischen Daten des Neuronalen Netzes sind in Tabelle 4.8 (Abschnitt 4.5.6) im Vergleich mit den anderen Netzen angegeben. In Tabelle 4.6 sind die Wertebereiche der Ausgabeneuronen sowie die ermittelten Konfidenzintervalle für die Trainings- und Verifikationsmuster zusammengefaßt.

Die Wertebereiche erstrecken sich über deutlich größere Bereiche als bei der Ermittlung der inneren Variablen (vgl. Tabelle 4.5). Dies ist die Folge von ungenauen Schätzwerten. Dementsprechend ermittelt das Neuronale Netz Werte, die mit erheblich größeren Fehlern behaftet sind. Erfahrungsgemäß betrifft dies jedoch die kleinen Verfestigungen, welche aber in der Gesamtspannung nicht ins Gewicht fallen. Hierauf wird bei der Validierung der Identifikationskette in Form von Beispielen konkret eingegangen (siehe Abschnitt 4.6).

Ausgang	$y_1$	$y_2$	$y_3$	$y_4$
Min	0.089	0.905	0.011	0.377
Max	0.984	10.65	3.199	2.990
$err_T$ 90% [%]	5.5	21.6	22.1	5.6
$err_V$ 90% [%]	13.5	27.2	37.8	6.8

Tabelle 4.6: Wertebereiche der Ausgabedaten sowie 90%-Konfidenzintervalle für die Identifikation der Plastizitätsparameter.

### 4.5.6 Parameter der statischen Erholung

Da nicht ausgeschlossen werden kann, daß eine der beiden Verfestigungen bzw. eine der statischen Erholungen nicht vorhanden ist, wird die Lösung in zwei Teilprobleme aufgespalten. Hierzu wurden bereits die tatsächlichen Werte der inneren Variablen  $k$  und  $\xi$  zu Beginn und am Ende der Relaxationen ermittelt. Dabei wurde das Neuronale Netz so trainiert, daß der Verlauf  $\sigma^{(s)} = \xi + k$  mit dem gemessenen Verlauf der Spannung in Einklang zu bringen ist. Dieses Netz befaßt sich somit ausschließlich mit der Aufteilung der Gesamtspannung. Ist kein Erholungseffekt vorhanden, stellt dies bis zu diesem Punkt kein Problem dar.

#### Materialparameter der statischen Erholung für die isotrope Verfestigung

Die Identifikation der Materialparameter der statischen Erholung für die isotrope Verfestigung wird nur dann durchgeführt, wenn die isotrope Verfestigung über der Relaxationsdauer abnimmt. Somit sind die Voraussetzungen gegeben, um sinnvollerweise nur solche Muster zu trainieren, für die eine Bestimmung der Potenz  $\omega$  überhaupt möglich ist. Ist diese Voraussetzung nicht erfüllt, werden die Muster aussortiert, womit die in Tabelle 4.8 angegebene geringere Anzahl von Trainings- und Verifikationsmustern entsteht.

#### Eingabedefinition

Bei dieser Eingabedefinition werden die Werte der inneren Variablen verwendet, wie sie zuvor ermittelt worden sind. Allerdings wird hier die isotrope Verfestigung nun um die Fließspannung reduziert:

$$x_1 := \frac{\xi_7 + k_7}{\sigma_7 - F_7}, \quad (4.169)$$

$$x_2 := \frac{\xi_{7'} + k_{7'}}{\sigma_{7'}}, \quad (4.170)$$

$$x_3 := \frac{\xi_{13'} + k_{13'}}{\sigma_{13'}}, \quad (4.171)$$

$$x_4 := \frac{\xi_{19'} + k_{19'}}{\sigma_{19'}}, \quad (4.172)$$

$$x_5 := \frac{k_7 - k_0}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.173)$$

$$x_6 := \frac{k_{7'} - k_0}{\xi_{7'} + k_{7'}}, \quad (4.174)$$

$$x_7 := \frac{k_{13'} - k_0}{\xi_{13'} + k_{13'}}, \quad (4.175)$$

$$x_8 := \frac{k_{19'} - k_0}{\xi_{19'} + k_{19'}}, \quad (4.176)$$

$$x_9 := \frac{\xi_7}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.177)$$

$$x_{10} := \frac{\xi_{7'}}{\xi_{7'} + k_{7'}}, \quad (4.178)$$

$$x_{11} := \frac{\xi_{13'}}{\xi_{13'} + k_{13'}}, \quad (4.179)$$

$$x_{12} := \frac{\xi_{19'}}{\xi_{19'} + k_{19'}}. \quad (4.180)$$

Die Angabe des Verhaltens der kinematischen Verfestigung ist wichtig, da die beiden Verfestigungsarten während der Erholung über die plastische Deformation gekoppelt sind. Um die mit der Erholung konkurrierende Verfestigung einzubeziehen, werden die bereits identifizierten Verfestigungseigenschaften verwendet (siehe Gleichung (4.74)):

$$x_{13} := \frac{(\gamma - \beta(k_{7'} - k_0))(\varepsilon_{p7'} - \varepsilon_{p7})}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.181)$$

$$x_{14} := \frac{(\gamma - \beta(k_{7'} - k_0))(\varepsilon_{p13'} - \varepsilon_{p13})}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.182)$$

$$x_{15} := \frac{(\gamma - \beta(k_{7'} - k_0))(\varepsilon_{p19'} - \varepsilon_{p19})}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.183)$$

$$x_{16} := \frac{(\frac{3}{2}c - (b-1)\xi_{7'}) (\varepsilon_{p7'} - \varepsilon_{p7})}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.184)$$

$$x_{17} := \frac{(\frac{3}{2}c - (b-1)\xi_{7'}) (\varepsilon_{p13'} - \varepsilon_{p13})}{\xi_7 + k_7}, \quad (4.185)$$

$$x_{18} := \frac{(\frac{3}{2}c - (b-1)\xi_{7'}) (\varepsilon_{p19'} - \varepsilon_{p19})}{\xi_7 + k_7}. \quad (4.186)$$

Um eine Krümmungsinformation zur genaueren Ermittlung der Potenz  $\omega$  bereitzustellen (vgl. Abb. 4.4a), wird mit Hilfe von (4.78) aus dem Anfangswert  $k_7 - k_0$  und dem Endwert  $k_{19'} - k_0$  unter der Annahme eines  $\bar{\omega} = 1$  ein zugehöriges  $\bar{\pi}$  mit

$$\bar{\pi} := \frac{\ln(k_7 - k_0) - \ln(k_{19'} - k_0)}{\Delta t_{r3}} \quad (4.187)$$

berechnet. Unter Verwendung von  $\bar{\pi}$ ,  $\bar{\omega}$  und (4.78) kann wiederum an den Punkten 7' sowie 13' der zugeordnete Wert von  $\bar{k}_{7'}$  und  $\bar{k}_{13'}$  berechnet werden, der sich ergeben würde, wenn  $\omega = \bar{\omega} = 1$  wäre. Das Verhältnis der ermittelten Werte zu den tatsächlich

gemessenen Werten zeigt somit den Einfluß einer Potenz  $\omega > 1$  in Relation zu dem Fall  $\bar{\omega} = 1$ :

$$x_{19} := \frac{k_{7'} - k_0}{\bar{k}_{7'} - k_0}, \quad (4.188)$$

$$x_{20} := \frac{k_{13'} - k_0}{\bar{k}_{13'} - k_0}. \quad (4.189)$$

### Ausgabedefinition

Die Ausgabedefinitionen sind durch die Gleichungen

$$y_1 := \frac{\tilde{k}_{19'} - k_0}{k_7 - k_0}, \quad (4.190)$$

$$y_2 := \omega \quad (4.191)$$

gegeben. Hierbei wird Gebrauch von der Näherungslösung (4.78) gemacht, wobei

$$\tilde{k}_{19'} - k_0 := \left[ (k_7 - k_0)^{1-\omega} - \pi(1-\omega)\Delta t_{r3} \right]^{\frac{1}{1-\omega}}. \quad (4.192)$$

Für bekannte  $y_1, y_2$  kann somit die Ausgabedefinition (4.190) mit Verwendung von (4.192) direkt nach dem gesuchten Parameter  $\pi$  aufgelöst werden.

**Anmerkung:** Das Neuronale Netz hat die Aufgabe, einen fiktiven Wert  $\tilde{k}_{19'}$  zu bestimmen, der sich anhand der vorliegenden Erholung, jedoch unter Abwesenheit der Verfestigung ergeben hätte. Somit werden die Erholungsparameter unabhängig von den Verfestigungseffekten bestimmbar, da für die Auswertung einfach (4.192) nach der verbleibenden Unbekannten  $\pi$  aufgelöst werden kann. Werden Werte  $\omega < 1$  identifiziert, wird davon ausgegangen, daß die statische Erholung zu schwach ist, um signifikante Potenzen  $\omega$  zu identifizieren. In diesem Fall wird von  $\omega = \bar{\omega} = 1$  ausgegangen und das zugehörige  $\pi = \bar{\pi}$  übernommen.

### Materialparameter der statischen Erholung für die kinematische Verfestigung

Zur Bestimmung der Materialparameter der statischen Erholung für die kinematische Verfestigung wird nach exakt demselben Schema vorgegangen, wie im Fall der isotropen Verfestigung. Es unterscheiden sich lediglich die Eingabedefinitionen für die letzten

beiden Eingabeneuronen

$$x_{19} := \frac{\xi_{7'}}{\bar{\xi}_{7'}} , \quad (4.193)$$

$$x_{20} := \frac{\xi_{13'}}{\bar{\xi}_{13'}} , \quad (4.194)$$

wobei zur Berechnung von  $\bar{\xi}$  Gleichung (4.91) verwendet wird. Das benötigte  $\bar{p}$  für  $\bar{w} = 1$  ist durch die Beziehung

$$\bar{p} := \frac{\ln(\xi_7) - \ln(\xi_{19'})}{\Delta t_{r3}} \quad (4.195)$$

zu bestimmen.

Die Ausgabedefinition lautet

$$y_1 := \frac{\tilde{\xi}_{19'}}{\xi_7} , \quad (4.196)$$

$$y_2 := \mathbf{w} . \quad (4.197)$$

Auch hier wurde die Näherungslösung für die statische Erholung (4.91) verwendet, womit  $\tilde{\xi}_{19'}$  aus

$$\tilde{\xi}_{19'} := \left[ \xi_7^{1-w} - p \left( \frac{3}{2} \right)^{\frac{1-w}{2}} (1-w) \Delta t_{r3} \right]^{\frac{1}{1-w}} \quad (4.198)$$

zu berechnen ist. Bei der Auswertung für gegebenes  $y_2$  ist diese Gleichung nach  $p$  aufzulösen. Das Vorgehen für  $w < 1$  entspricht dem bei der Bestimmung der Erholungsparameter der isotropen Verfestigung.

In Tabelle 4.7 sind die Wertebereiche der Ausgabeneuronen sowie die ermittelten Konfidenzintervalle der statischen Erholung für beide Verfestigungen für Trainings- und Verifikationsmuster zusammengefaßt. Da die Ausgabeneuronen  $y_2$  direkt die Potenzen ermitteln, läßt sich der Fehler für  $\omega$  und  $w$  für 90% der Daten kleiner als 24% bzw. 28% angeben. Auch hier gilt wiederum, daß für kleine Erholungseffekte ein Fehler in den Potenzen kein besonderes Gewicht besitzt. Der Erholungsbetrag selbst, welcher durch  $y_1$  repräsentiert wird, kann durchweg sehr genau ermittelt werden. Dies ist auf die sehr gute Abschätzung durch die Näherungslösungen zurückzuführen, was auch durch die kleinen Wertebereiche angedeutet wird.



statische Erholung	isotrope Verf.		kinematische Verf.		
	Ausgang	$y_1$	$y_2$	$y_1$	$y_2$
Min [-]	0.583	1.003	0.424	1.008	
Max [-]	1.438	2.995	1.009	2.997	
$err_T$ 90% [%]	5.0	12.1	4.7	13.0	
$err_V$ 90% [%]	6.8	24.0	5.7	28.0	

Tabelle 4.7: Wertebereiche der Ausgabedaten sowie 90%-Konfidenzintervalle für die Identifikation der Erholungsparameter.

Neuronales Netz	Neuronenzahl				Training			Verifikation	
	$I$	$J$	$K$	$L$	Epochen	$N_T$	$MSE_T$	$N_V$	$MSE_V$
Elastizität	52	25	10	1	500	452	0.00001	48	0.00001
Viskosität	55	30	10	2	4000	452	0.00045	48	0.00065
Innere Variablen ( $k, \xi$ )	117	50	25	9	2000	452	0.00028	48	0.00395
Plastizität	58	25	12	5	5000	390	0.00108	41	0.00671
Erholung ( $\pi, \omega$ )	20	15	10	2	3000	450	0.00449	47	0.00770
Erholung ( $p, \mathbf{w}$ )	20	15	10	2	3000	373	0.00243	40	0.00427

Tabelle 4.8: Struktur der Neuronalen Netze, Anzahl der Muster und MSE-Werte.

## 4.6 Verifikation der Identifikationskette

Die Neuronalen Netze, die in den Abschnitten 4.5.2–4.5.6 definiert wurden, sind in einem Programm zusammengefaßt, welches die Simulationsdaten einliest und daraus mit den Netzen sukzessiv den kompletten Parametersatz ermittelt. Es werden dabei an keiner Stelle der Identifikation die bei der Simulation vorgegebenen Parameter, sondern, soweit erforderlich, die mit den Neuronalen Netzen identifizierten Parameter verwendet.

Zur Beurteilung der Auswirkung von Identifikationsfehlern auf den Spannungsverlauf werden zwei Verifikationsmuster betrachtet, welche ein deutlich unterschiedliches Verhalten zeigen und bisher weder als Trainings- noch als Verifikationsmuster verwendet worden sind. Die mit den ermittelten Materialparametern berechneten Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien sind in Abb. 4.11 dargestellt.

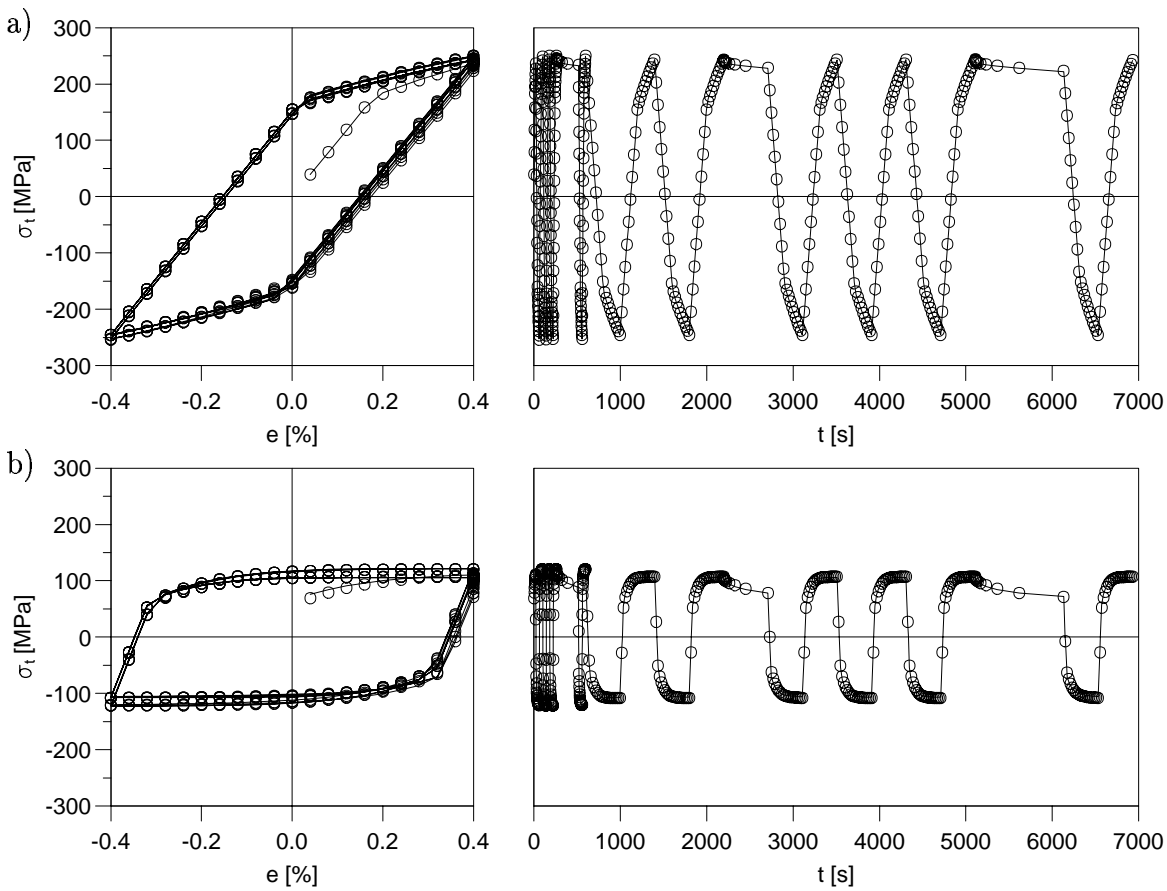


Abbildung 4.11: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien für zwei Verifikationsmuster: — exakter Verlauf;  $\circ$  Simulation mit identifizierten Parametern.

Die den Kurven zugehörigen Parameter sind in Tabelle 4.9 angegeben. Bei einem Vergleich der Zahlenwerte und den Kurvenverläufen ist festzustellen, daß der Elastizitätsmodul sowie die Parameter der Viskosität sehr genau ermittelt werden. Lediglich für Beispiel a) ist die Überspannung etwas zu klein; in Bezug auf die Gesamtspannung ist dieser Fehler aber nur von geringfügiger Bedeutung.

Der Parameter der isotropen Verfestigung  $\gamma$  wird im Fall b) ungenau identifiziert, da durch die starke plastische Verformung die Daten bezüglich des anfänglichen Verhaltens unvollständig werden. Bezüglich des maximalen Verfestigungsbetrags bietet jedoch die Identifikation der isotropen Verfestigung eine gute Qualität. Die Identifikation der kinematischen Verfestigung ist sehr gut und nur für Beispiel a) bedingt durch die sehr schmale Hysterese ungenau bezüglich der Begrenzung.

Die Ermittlung der Materialparameter der statischen Erholung ist in Beispiel a) aufgrund der kleinen plastischen Deformation problematisch. Die geringen Verfestigungs-

beträge zusammen mit der schwachen Erholung erlauben es nicht, die Potenzen zu bestimmen. Daß die Methode bei deutlichen Verfestigungs- und Erholungseffekten auch korrekte Potenzen bestimmt, zeigt die Auswertung für Beispiel b).

Beispiel		Abb. 4.11a		Abb. 4.11b	
Parameter		exakt	identifiziert	exakt	identifiziert
$E$	[GPa]	98.7	99.5	199.7	197.5
$m$	[-]	8.3	8.3	7.20	6.77
$\eta$	[MPa <sup>m</sup> s]	$7.24 \cdot 10^{15}$	$1.49 \cdot 10^{15}$	$8.44 \cdot 10^{12}$	$1.76 \cdot 10^{12}$
$F_0$	[MPa]	35.0	29.3	23.9	23.2
$k_0$	[MPa]	151.	152.	57.2	50.0
$\gamma$	[GPa]	22.4	23.6	3.38	7.98
$\beta$	[-]	596.	631.	168.	319.
$\gamma/\beta$	[MPa]	37.6	37.3	20.2	25.0
$c$	[GPa]	16.2	17.7	15.08	16.97
$b$	[-]	131.	162.	790.	871.
$1.5c/b$	[MPa]	185.	164.	28.6	29.2
$\pi$	[MPa <sup>1-<math>\omega</math></sup> /s]	$1.86 \cdot 10^{-4}$	$1.82 \cdot 10^{-4}$	$4.84 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{-4}$
$\omega$	[-]	1.30	1.42	1.46	1.88
$p$	[MPa <sup>1-<math>w</math></sup> /s]	$1.64 \cdot 10^{-6}$	0.0	$7.81 \cdot 10^{-5}$	$1.16 \cdot 10^{-5}$
$w$	[-]	2.11	1.00	2.44	2.79

Tabelle 4.9: Exakte und identifizierte Materialparameter für die Beispiel in Abb. 4.11.

### Validierung bei Änderung der Dehnungsamplitude

Im allgemeinen ist eine feste Dehnungsamplitude von 0.4%, wie sie für die Entwicklung der Neuronalen Netze benutzt wurde, nicht für jeden Werkstoff sinnvoll. Es kann nicht ausgeschlossen werden, daß das Materialverhalten u.U. nur eine kleine Hysterese zeigt oder im anderen Extremfall bei dieser Dehnung bereits einzuschnüren beginnt.

Die existierenden Neuronalen Netze sind jedoch nicht auf die Dehnungsamplitude von 0.4% beschränkt. Dies ist darin begründet, daß die Eingabe- und Ausgabedefinitionen generell nicht nur dimensionslos sondern auch im Sinne der Evolutionsgleichungen formuliert worden sind. Um eine andere Dehnungsamplitude zu berücksichtigen, muß lediglich die Abtastung gemäß (4.98) proportional zur Änderung der Maximaldehnung berücksichtigt werden.

Für die folgenden Betrachtungen wird angenommen, es läge ein Werkstoff mit einem Verhalten wie in Abb. 4.11a vor. In diesem Fall wäre die Erhöhung der Dehnungsamplitude sinnvoll, um die Begrenzung der kinematischen Verfestigung genauer identifizieren zu können.

Es soll nun anhand dieses Beispiels geprüft werden, inwieweit die bestehenden neuronalen Netze in der Lage sind, die Materialparameter unabhängig von der gewählten Dehnungsamplitude zu ermitteln. Abbildung 4.12 zeigt die Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien bei einer sukzessiven Erhöhung der Dehnungsamplitude bis 1%. Bei Betrachtung der Kurven kann keine Einbuße der Identifikationsqualität festgestellt werden. Für den weiteren Vergleich sind deshalb die ermittelten Materialparameter bzw. Kenngrößen in Tabelle 4.10 aufgeführt.

Bedingt durch die Erhöhung der Dehnungsamplitude wird die Überspannung genauer identifiziert. Wie erwartet, wird der Begrenzungswert der kinematischen Verfestigung bei erhöhter Dehnungsamplitude deutlich besser wiedergegeben. Allerdings verschlechtert sich der Wert von  $\gamma$  infolge der wachsenden Unvollständigkeit bezüglich des anfänglichen Verfestigungsverhaltens und durch den ohnehin geringen Anteil der isotropen Verfestigung.

Durch den stärkeren Einfluß der Verfestigung folgt auch eine genauere Ermittlung des Erholungsbetrages der kinematischen Verfestigung. Wegen der Dominanz der kinematischen Verfestigung tritt nicht nur die isotrope Verfestigung sondern auch deren Erholung in den Hintergrund. Im Hinblick auf die vorliegenden Verhältnisse ist es bemerkenswert, daß das Identifikationsprogramm in der Lage ist, eine Erholung der isotropen Verfestigung festzustellen.

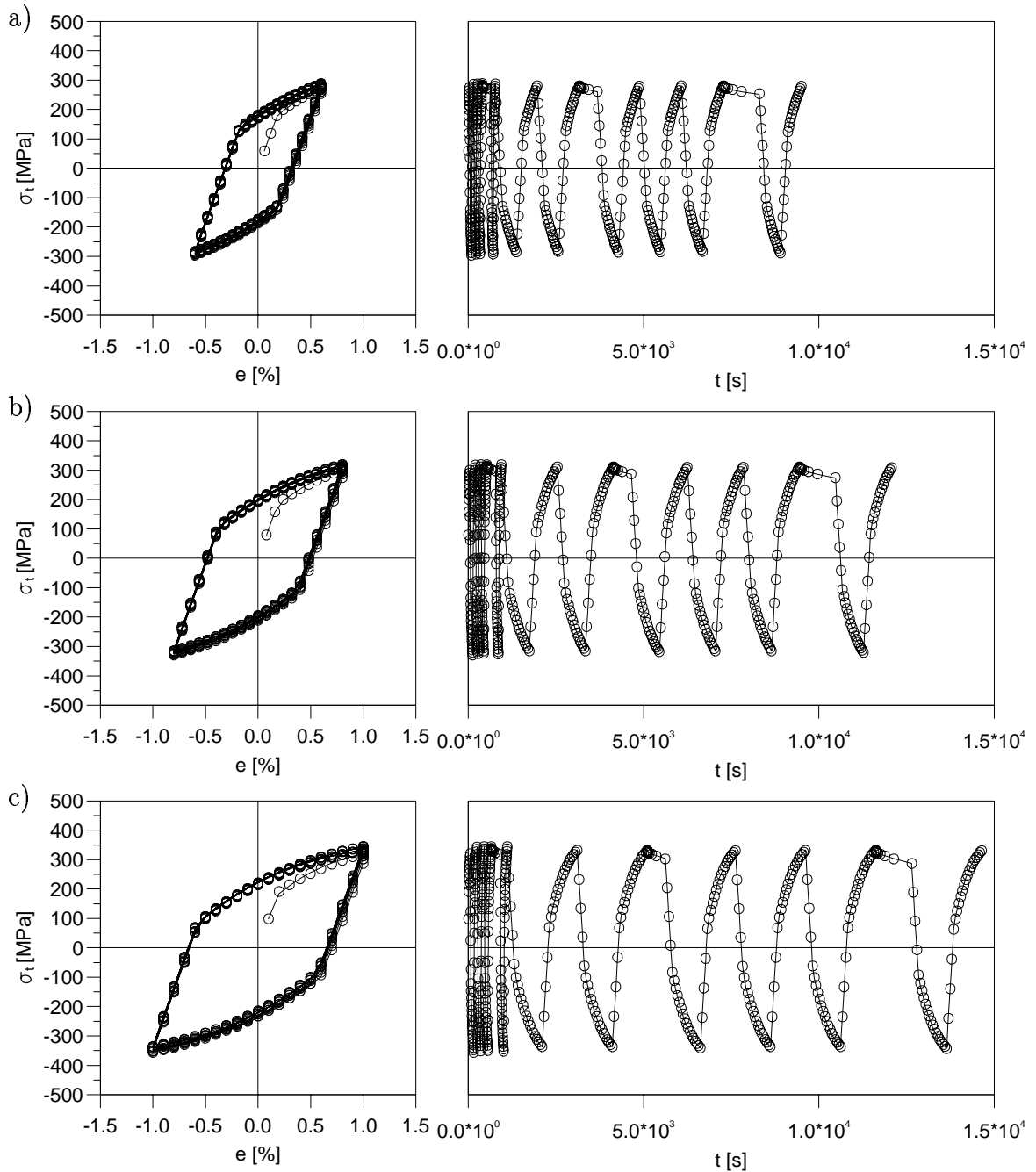


Abbildung 4.12: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien für das Beispiel aus Abb. 4.11a, jedoch für unterschiedliche Dehnungsamplituden: a)  $e_a = 0.6\%$ , b)  $e_a = 0.8\%$ , c)  $e_a = 1.0\%$ ; — exakter Verlauf;  $\circ$  Simulation mit identifizierten Parametern.

Diese Beispiele zeigen, daß die Potenzen der statischen Erholungen am unsichersten identifiziert werden. Die Identifikationsqualität hängt sehr stark von den aktuellen Verfestigungsverhältnissen ab, welche wiederum durch die Dehnungsamplitude und die elastisch-plastischen Eigenschaften gegeben sind.

Parameter	exakt	$e_a = 0.4\%$	$e_a = 0.6\%$	$e_a = 0.8\%$	$e_a = 1.0\%$
$E$ [GPa]	98.7	99.5	99.35	99.58	99.44
$m$ [-]	8.3	8.3	9.24	9.49	7.99
$\eta$ [MPa <sup>m</sup> s]	$7.24 \cdot 10^{15}$	$1.49 \cdot 10^{15}$	$6.24 \cdot 10^{16}$	$2.97 \cdot 10^{17}$	$3.09 \cdot 10^{15}$
$F_0$ [MPa]	35.0	29.3	31.07	33.49	36.54
$k_0$ [MPa]	151.	152.	159.	160.	161.
$\gamma$ [GPa]	22.4	23.6	15.82	11.53	7.60
$\beta$ [-]	596.	631.	523.	404.	275.
$\gamma/\beta$ [MPa]	37.6	37.3	30.3	28.5	27.6
$c$ [GPa]	16.2	17.7	17.13	16.52	15.88
$b$ [-]	131.	162.	136.	130.	120.
$1.5c/b$ [MPa]	185.	164.	188.	191.	199.
$\pi$ [MPa <sup>1-<math>\omega</math></sup> /s]	$1.86 \cdot 10^{-4}$	$1.82 \cdot 10^{-4}$	$2.35 \cdot 10^{-4}$	$5.82 \cdot 10^{-4}$	$7.87 \cdot 10^{-4}$
$\omega$ [-]	1.30	1.42	1.47	1.19	1.10
$p$ [MPa <sup>1-<math>w</math></sup> /s]	$1.64 \cdot 10^{-6}$	0.0	$6.98 \cdot 10^{-7}$	$3.97 \cdot 10^{-6}$	$2.29 \cdot 10^{-5}$
$w$ [-]	2.11	1.00	2.21	1.87	1.49

Tabelle 4.10: Exakte und identifizierte Materialparameter für das Beispiel aus Abb. 4.11a und 4.12a-c bei veränderter Dehnungsamplitude.

## 4.7 Experimente

Die Anwendung von Neuronalen Netzen unter experimentellen Bedingungen wurde bereits in Kapitel 3 für ein bezüglich des Materialmodells vergleichsweise einfaches Problem gezeigt. Bei der hier vorliegenden sehr komplexen Identifikationsaufgabe, die mehrere Schritte erfordert und insgesamt zwölf Materialparameter bestimmen soll, ist die erfolgreiche Auswertung von Experimenten nicht selbstverständlich. In den folgenden Abschnitten soll exemplarisch demonstriert werden, daß die Neuronalen Netze durchaus der harten Realität standhalten und sogar über bestehende Grenzen hinaus neue Möglichkeiten eröffnen können.

### 4.7.1 Experimentelle Realisierung

Die Experimente wurden mit einem ferritischen Stahl 20 Mn Mo Ni 55 durchgeführt, der im Reaktorbau verwendet wird. Hierfür wurden aus einer Platte Rundproben mit Abmessungen im Gleichmaßbereich von 5 mm Durchmesser und 30 mm Länge gefertigt. Die Versuche werden mit einer servohydraulischen Zugprüfmaschine der Firma MTS durchgeführt, welche einen Meßbereich von 100 kN aufweist. Für die Aufbringung der Temperatur wird ein geregelter Strahlungssofen verwendet, mit dem Temperaturen bis 650 °C realisierbar sind. Die Temperatur wird hierzu mit einem auf der Probe aufgeschweißten Thermoelement gemessen. Die Maschinensteuerung und die Datenerfassung werden durch einen Computer mit geeigneter Steuerungssoftware realisiert. Die Datenerfassungsrate wird mit 0.25 s gewählt.

Abbildung 4.13 zeigt analog zu der Lastgeschichte gemäß Abb. 4.1 (Zyklierung mit konstantem  $e_a$  und drei Haltezeiten unterschiedlicher Dauer) jeweils zwei Vorversuche bei einer Temperatur von 400 °C und 450 °C sowie ein Vorversuch bei 500 °C. Anhand der sehr guten Übereinstimmung zwischen den Experimenten bei gleicher Temperatur kann auf eine hohe Reproduzierbarkeit geschlossen werden.

### 4.7.2 Aufbereitung der Meßdaten

Für die Ansteuerung der Maschine müssen die einzelnen Prozeßphasen durch Rampen realisiert werden. Hierbei ist eine Rampe beendet, wenn der vorgegebene Sollwert (Dehnung bzw. Zeit) im Rahmen der Regelgenauigkeit erreicht wird. Dies bedeutet, daß der Steuerrechner in jedem Abschnitt auf die Beendung durch die Prüfmaschine wartet, wodurch es zu kleinen zeitlichen Verschiebungen kommen kann. Bis zum Ende eines Experimentes entsteht somit eine Differenz von bis zu etwa einer Sekunde in der Zeitskala. Aus diesem Grund ist es nicht möglich, die betreffenden Spannungs- und Dehnungswerte zu fest vorgegebenen Zeitpunkten auszulesen. Vielmehr muß in jedem Abschnitt die Zeitskala neu abgeglichen werden. Hierfür eignen sich am besten die Nulldurchgänge der Dehnung, da im Gegensatz zu den Umkehrpunkten in diesem Bereich keine Beschleunigungen vorhanden sind.

Die Verbesserung, die mit diesem Zeitabgleich erreicht wird, ist in Abb 4.14 dargestellt. Anhand des Fehlers in Abb 4.14a wird deutlich, daß die Differenz zwischen Istwert und Sollwert bei ansteigenden Rampen negativ ist und umgekehrt. Der Fehlerbetrag während einer Belastungsphase ist jedoch annähernd konstant. Dies bedeutet, die Maschine folgt dem Sollwert zeitlich verzögert. Wird diese Verzögerung nicht berücksichtigt, so werden

insbesondere die Werte an den Umkehrpunkten und zu Beginn der Relaxation nicht korrekt erfaßt (s. Abb. 4.14a). Die korrekte Arbeitsweise der Auswertesoftware wird in Abb. 4.15 demonstriert.

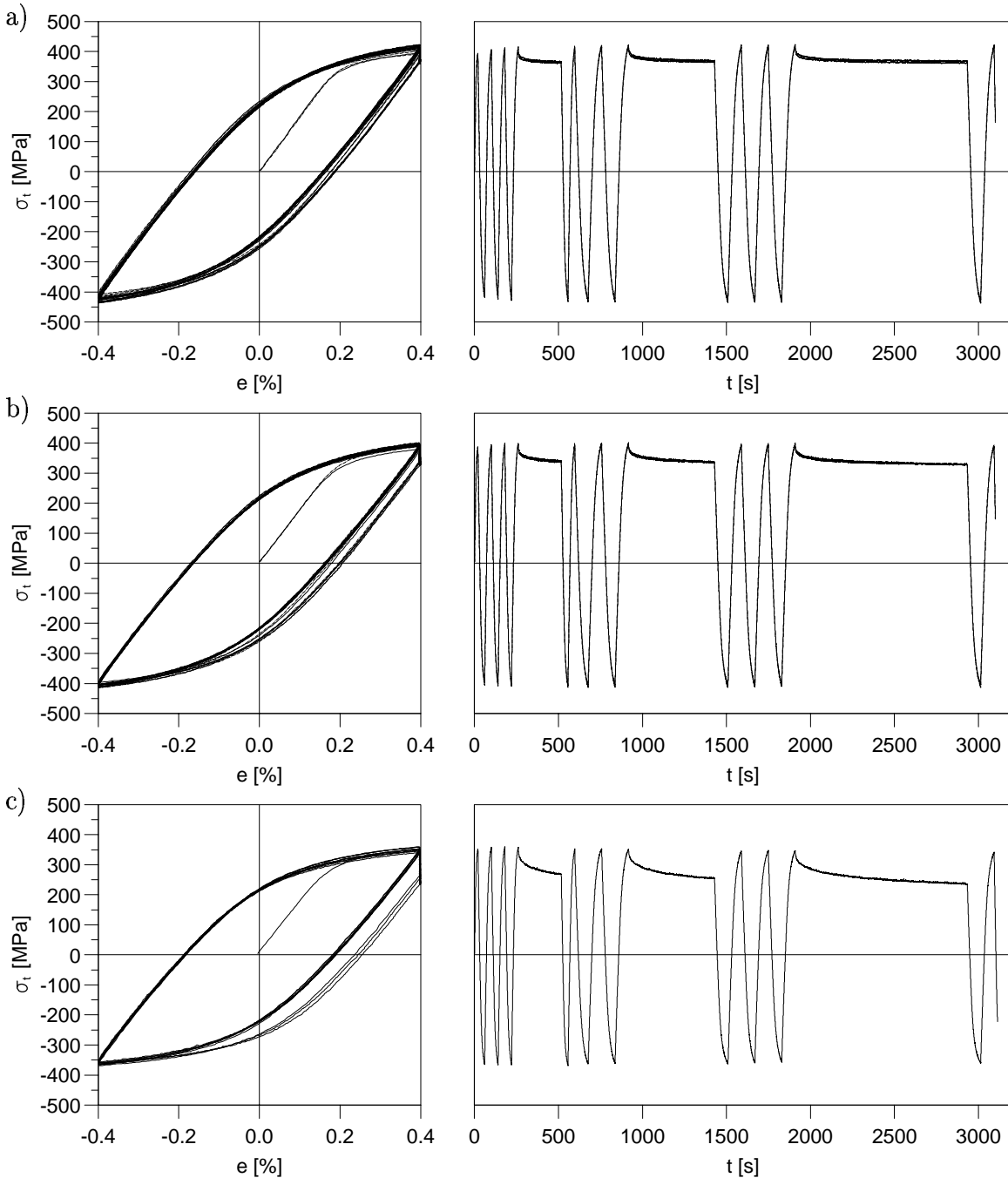


Abbildung 4.13: Experimentell gemessene Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien: a)  $T = 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; b)  $T = 450\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; c)  $T = 500\text{ }^{\circ}\text{C}$ .



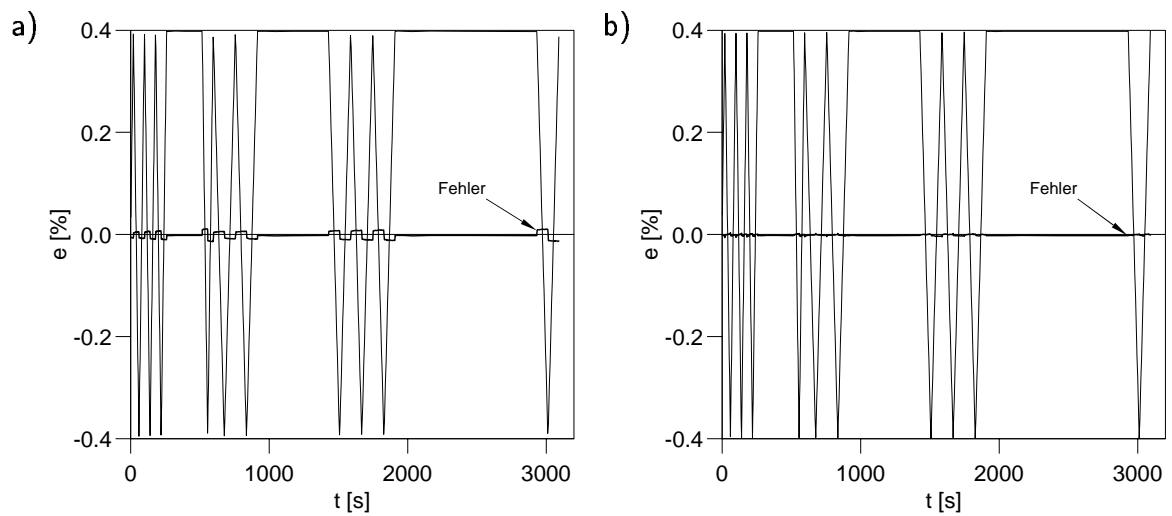


Abbildung 4.14: Verlauf der gemessenen Dehnung: a) Abtastung bei festen Zeitpunkten; b) Abtastung für abschnittsweise abgegliche Zeitskala.

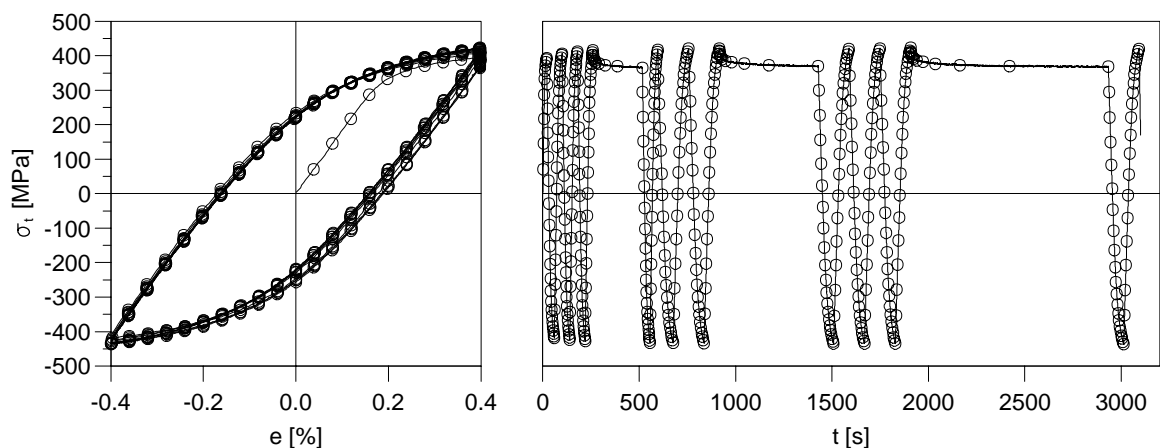


Abbildung 4.15: Experimentell gemessene Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorie für  $T = 400$  °C (—) und für die Neuronalen Netze extrahierten Daten (o).

### 4.7.3 Auswertung der Experimente

Wie Abb. 4.13 zeigt, ist es besonders interessant, den Temperaturbereich zwischen  $400$  °C und  $500$  °C zu betrachten, da hier die Effekte der statischen Erholung einsetzen. Zunächst sollen die Materialparameter für die beiden Temperaturen  $400$  °C und  $500$  °C identifiziert werden. Auf diese Weise wird geprüft, ob die Neuronalen Netze robust sind und für verschiedene Experimente zuverlässige Identifikationen liefern.

Die experimentell gemessenen Verläufe und die aus den identifizierten Materialparametern berechneten Verläufe (s. Tabelle 4.11) sind in Abb. 4.16 dargestellt.

Wie man es erwarten würde, nehmen der Elastizitätsmodul und die Fließspannung sowie die kinematische Verfestigung mit zunehmender Temperatur ab. Dagegen ist ein Anwachsen der Überspannung sowie der isotropen Verfestigung zu beobachten. Ebenso gegenläufig verhalten sich die statischen Erholungen. Bei 400 °C kann offensichtlich wegen der kleinen isotropen Verfestigung die zugehörige Erholung nicht identifiziert werden. Bei 500 °C übernimmt die Erholung der isotropen Verfestigung den anfänglich schnellen Abfall der Spannung infolge der hohen Potenz  $\omega$ , während die kinematische Verfestigung linear abgebaut wird.

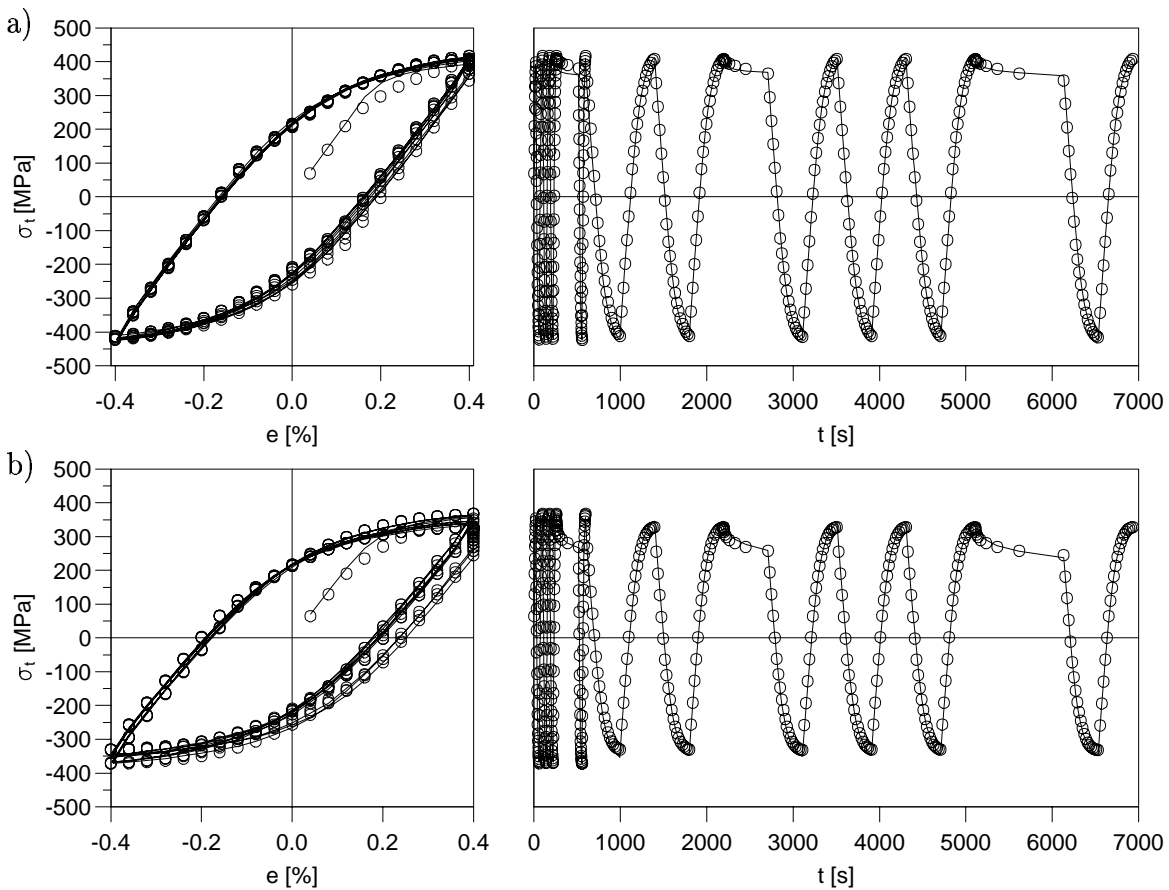


Abbildung 4.16: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien (— gemessener Verlauf;  $\circ$  Simulation mit identifizierten Parametern) der Experimente bei a) 400 °C; b) 500 °C.

Parameter	Identifikation		Interpolation auf $T = 450^\circ\text{C}$	
	$T = 400^\circ\text{C}$	$T = 500^\circ\text{C}$	Neuronale Netze	gemittelt
$E$ [GPa]	175.	161.	169.	168.
$m$ [-]	44.9	6.98	13.6	25.9
$\eta$ [ $\text{MPa}^m \text{s}$ ]	$1.45 \cdot 10^{99}$	$4.83 \cdot 10^{18}$	$1.46 \cdot 10^{33}$	$8.37 \cdot 10^{58}$
$F_0$ [MPa]	139.	176.	167.	144.
$k_0$ [MPa]	109.	74.	85.	91.5
$\gamma$ [GPa]	119.6	223.7	149.2	171.7
$\beta$ [-]	8774.	5397.	6800.	7086.
$\gamma/\beta$ [MPa]	13.6	41.5	21.9	24.2
$c$ [GPa]	115.6	86.4	103.5	101.
$b$ [-]	983.	1090.	1062.	1037.
$1.5c/b$ [MPa]	176.	119.	146.	146.1
$\pi$ [ $\text{MPa}^{1-\omega} / \text{s}$ ]	0.	$3.83 \cdot 10^{-6}$	$1.44 \cdot 10^{-5}$	$1.96 \cdot 10^{-3}$
$\omega$ [-]	1.	2.97	2.83	1.99
$p$ [ $\text{MPa}^{1-w} / \text{s}$ ]	$4.05 \cdot 10^{-7}$	$9.71 \cdot 10^{-5}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$	$6.27 \cdot 10^{-6}$
$w$ [-]	2.51	1.	1.	1.76

Tabelle 4.11: Identifizierte Materialparameter bei  $400^\circ\text{C}$  und  $500^\circ\text{C}$  sowie auf  $450^\circ\text{C}$  interpolierte Materialparametersätze.

#### 4.7.4 Temperaturinterpolation

Soll das Verhalten bei veränderlichen Temperaturen berechnet werden, stellt sich das Problem, wie von zwei Materialparametersätzen, bestimmt bei zwei unterschiedlichen Temperaturen, auf einen möglichst realistischen Parametersatz bei einer beliebigen Zwischentemperatur geschlossen werden kann. Hierzu wird in der Literatur mit wenigen Ausnahmen eine lineare Interpolation zwischen den einzelnen Materialparametern vorgeschlagen (s. z.B. [98, S. 110 ff.]). Aus dem Mangel einer allgemeingültigen Vorschrift wird z.B. in dem Finite Elemente Programm ABAQUS [41, Abschnitt 9.1.2] ebenfalls jeder Materialparameter separat linear interpoliert. Es besteht hier zwar die Möglichkeit, einen Materialparameter in Abhängigkeit von einem anderen Materialparameter oder einer Feldgröße anzugeben, allerdings ebenfalls in Form diskreter Werte über der Temperatur, die linear interpoliert werden.

Aufgrund der Erfahrungen aus der vorliegenden Arbeit sollten zumindest die Materialparameter  $(\eta, m)$ ,  $(c, b)$ ,  $(\gamma, \beta)$  paarweise und nicht unabhängig interpoliert werden. Im

Fall der Erholungsparameter kommt noch die betreffende Anfangsverfestigung hinzu, so daß hier z.B. Kombinationen von  $(\pi, k_7, \omega)$  bzw.  $(p, \xi_7, w)$  sinnvolle Interpolationen ergeben. Mit anderen Worten bedeutet dies, daß es angestrebt werden sollte, Spannungen zu interpolieren, die in natürlicher Weise mit der Physik des Problems verbunden sind. Hierfür könnten z.B. die erarbeiteten Ausgabedefinitionen verwendet werden.

Führt man diesen Gedankengang konsequent weiter, erscheint es am sinnvollsten, die Spannungen der Identifikationsexperimente selbst zu interpolieren. Auf diese einfache Weise ergibt sich ein fiktives Identifikationsexperiment bei jeder beliebigen Zwischentemperatur. Die dieser Temperatur zugeordneten Materialparameter ergeben sich schließlich durch die Anwendung der Neuronalen Netze auf dieses fiktive Experiment.

Die Tauglichkeit dieser Vorgehensweise soll im folgenden überprüft werden. Hierzu werden die Experimente bei 400 °C und 500 °C gemittelt, womit sich ein fiktives Experiment bei 450 °C ergibt. Die gewonnenen Verläufe sind in Abb. 4.17a dargestellt, wobei die berechneten Verläufe für die daraus identifizierten Materialparameter mit Hilfe der Kreise hinzugefügt wurden. Mit den so ermittelten Materialparametern wird der in Abb. 4.13b gezeigte Vorversuch vorausgesagt, welcher sich infolge der zwischenzeitlichen Modifikation der Prozeßführung von dem aktuellen Identifikationsexperiment unterscheidet. Die sehr gute Übereinstimmung sowohl der Hysteresen als auch der Relaxationsverläufe zeigt, daß der Weg über die Spannungsinterpolation sinnvoll ist.

Abbildung 4.17c zeigt die Voraussage für dasselbe Experiment, jedoch mit linear interpolierten Materialparametern. Die Materialparameter sind in Tabelle 4.11 im Vergleich zu den aus der Spannungsinterpolation bestimmten Parametern angegeben. Um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten, wurden die Materialparameter  $\eta$ ,  $p$  und  $\pi$ , die als Vorfaktoren mit Potenzen verbunden sind, nicht linear sondern logarithmisch interpoliert. Beide Interpolationsvorschriften führen zu sehr guten Ergebnissen. Im folgenden werden die Kurven auf der Basis von linear (bzw. logarithmisch) interpolierten Materialparametern mit Kreuzen (+) markiert.

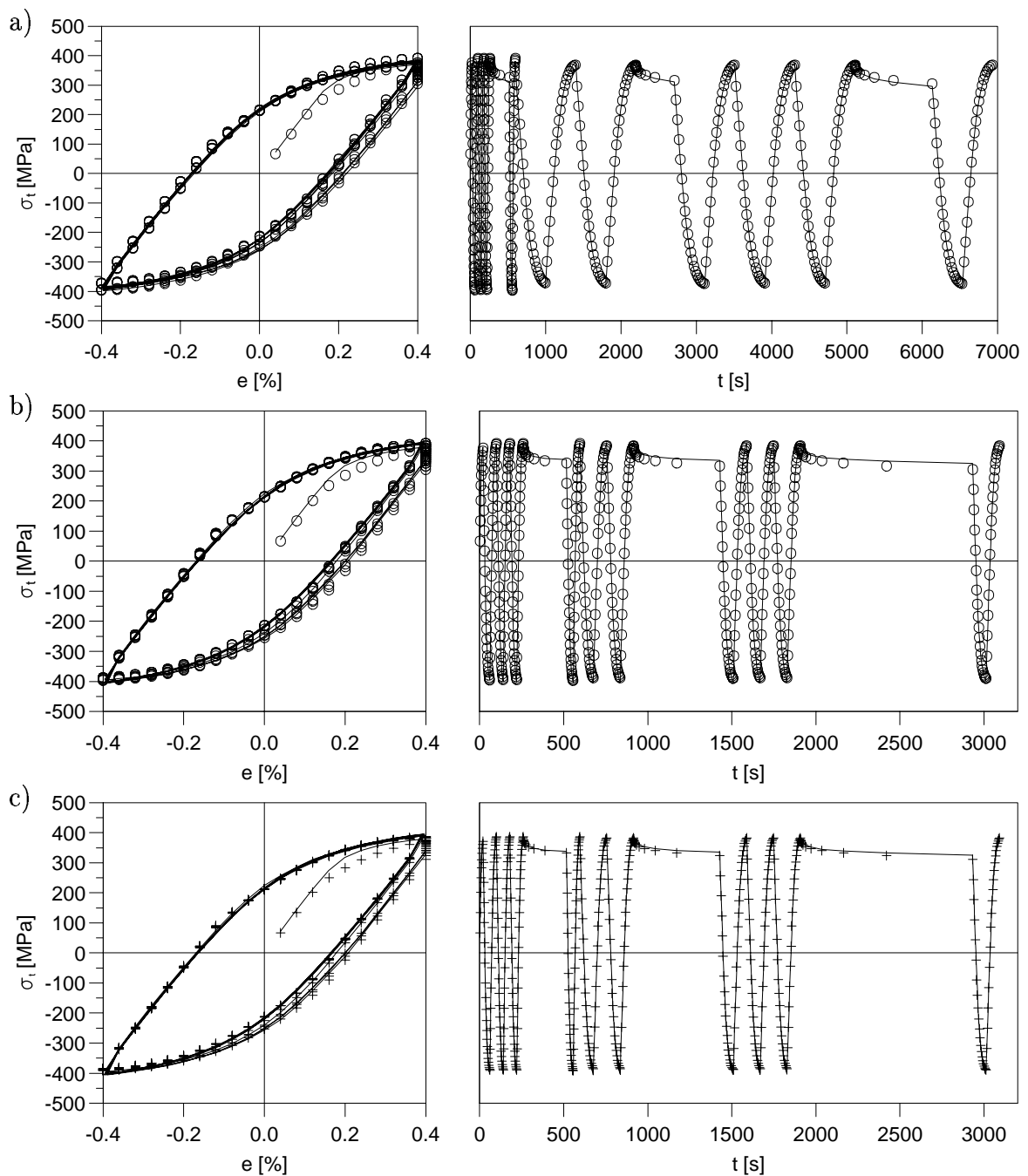


Abbildung 4.17: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien bei 450 °C: (—) gemessener Verlauf; (○) Simulation mit identifizierten Parametern a) gemittelter Verlauf aus den Experimenten bei 400 °C und 500 °C und Identifikation; b) Voraussage des Vorversuchs aus Abb. 4.13b mit durch Spannungsinterpolation identifizierten Materialparametern; c) Voraussage mit linear ( $E$ ,  $m$ ,  $k_0$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$ ,  $c$ ,  $b$ ,  $\omega$ ,  $w$ ) bzw. logarithmisch ( $\eta$ ,  $p$ ,  $\pi$ ) interpolierten Materialparametern.

### 4.7.5 Validierung der Temperaturinterpolation

Die auf 450 °C interpolierten Materialparametersätze werden einer Validierung unterzogen. Hierfür ist eine Lastgeschichte gewählt worden, die zeigt, inwieweit der jeweilige Materialparametersatz zuverlässige Aussagen für nahezu monotone Belastung mit deutlich verschiedenen Dehngeschwindigkeiten liefern kann. Zur Überprüfung der Korrektheit der identifizierten Verfestigungsverhalten wurden an verschiedenen Stellen kleine Lastzyklen eingefügt. Für die in Abb. 4.18 dargestellten Kurven gelten die Dehnraten von  $\dot{e} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  bis  $e = 1\%$ , nach erstmaligem Erreichen von  $e = 1\%$   $\dot{e} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  und nach erstmaligem Erreichen von  $e = 1.3\%$   $\dot{e} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Zusätzlich werden vor jeder Dehnratenänderung Relaxationen von jeweils einer Stunde Dauer und am Ende des Experiments eine Druckphase bis auf null Prozent Dehnung mit einer Dehnrade von  $\dot{e} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  eingefügt.

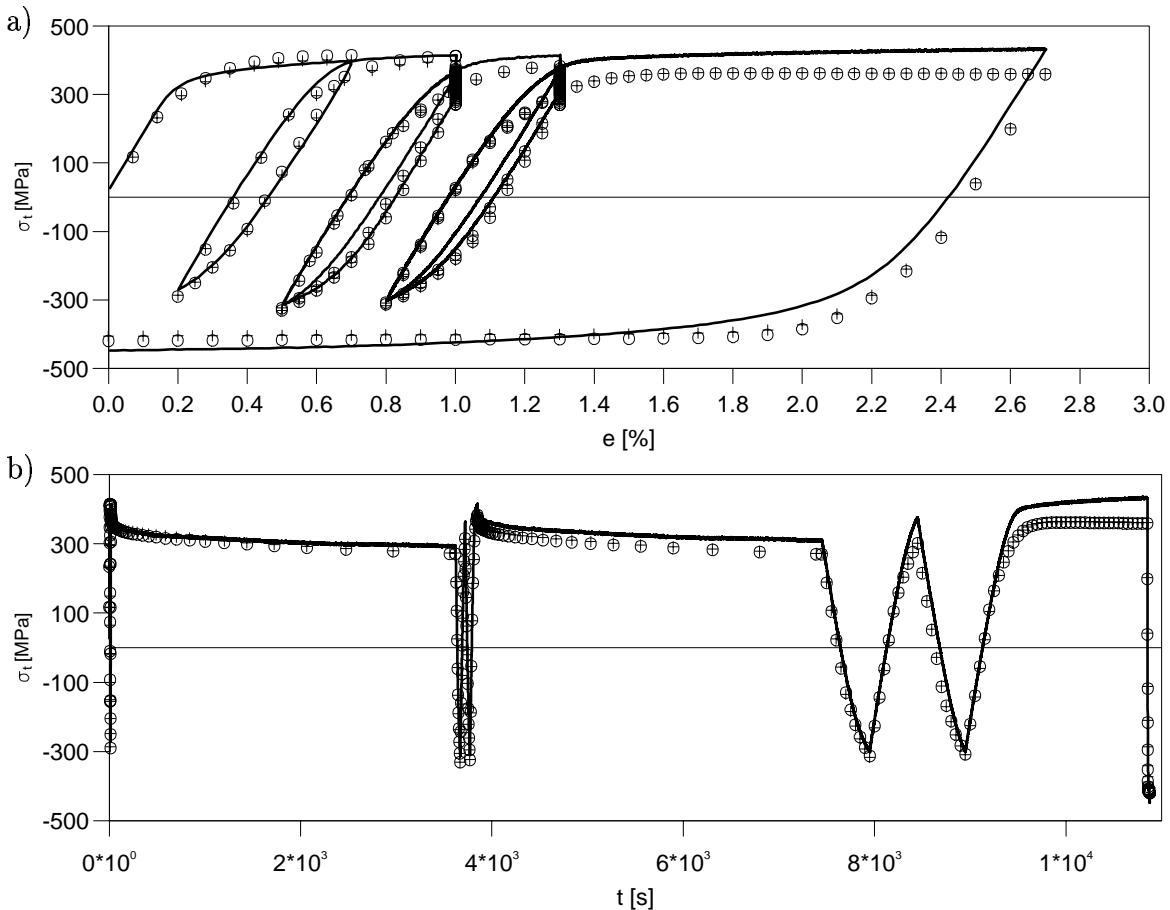


Abbildung 4.18: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien bei 450 °C: (—) gemessener Verlauf; (○, +) Simulation mit interpolierten Parametern.

Die resultierenden Spannungswerte in Abhängigkeit von Dehnung und Zeit sind in Abb. 4.18 zu sehen. Insgesamt ist eine sehr gute Übereinstimmung sowohl für die Belastungsphasen als auch für die Relaxationen festzustellen. Lediglich für große Dehnungen ergeben sich für die Voraussage zu kleine Spannungen, was jedoch auf das Fehlen einer zweiten kinematischen Verfestigung zurückzuführen ist.

### Hinweise zum Vorgehen für zwei kinematische Verfestigungen

Der Grund, warum lediglich eine kinematische Verfestigung identifiziert wurde, resultiert aus dem Umstand, daß das Materialmodell (4.33)–(4.38) ebenfalls nur mit einer kinematischen Verfestigung in dem Finite Elemente Programm ABAQUS implementiert wurde.

Die in dieser Arbeit vorgeschlagene Methode kann jedoch ohne weiteres auch für eine zweite kinematische Verfestigung erweitert werden, indem einfach am Ende der Zyklisierung bis Erreichen von  $R_m$  gezogen wird. Aus dem Verlauf der Zugkurve für große Dehnungen, bei denen die erste Verfestigung bereits vollständig gesättigt ist, kann die zweite Verfestigung ohne besonderen Aufwand ermittelt werden, wie dies bereits von SCHWERTEL gezeigt wurde [98]. Die zugehörigen Erholungsparameter sind jedoch in diesem Fall, nicht mehr eindeutig zu bestimmen. Eine Möglichkeit zur Umgehung dieses Problems besteht darin, die für die erste kinematische Verfestigung identifizierten Erholungsparameter auch für die zweite Verfestigung zu übernehmen.

Um dies exemplarisch zu demonstrieren, wurde eine solche zweite kinematische Verfestigung im Materialmodell analog zur ersten Verfestigung (4.37) ergänzt gemäß

$$\dot{\mathbf{Z}}_1 = \left( \sqrt{\frac{3}{2}} c_1 \mathbf{N} - b_1 \mathbf{Z}_1 \right) \dot{s} - p \|\mathbf{Z}_1\|^{w-1} \mathbf{Z}_1, \quad (4.199)$$

$$\dot{\mathbf{Z}}_2 = \left( \sqrt{\frac{3}{2}} c_2 \mathbf{N} - b_2 \mathbf{Z}_2 \right) \dot{s} - p \|\mathbf{Z}_2\|^{w-1} \mathbf{Z}_2, \quad (4.200)$$

$$\mathbf{Z} = \mathbf{Z}_1 + \mathbf{Z}_2. \quad (4.201)$$

Aus dem Validierungsexperiment in Abb. 4.18 kann für die letzte Zugphase zwischen 1.4% und 2.6% Dehnung der Tangentenmodul zu 4050 MPa ermittelt werden. Unter der Annahme einer annähernd linearen Verfestigung ergeben sich die Materialparameter der zweiten kinematischen Verfestigung zu  $c_2 = 2700$  MPa,  $b_2 = 0$  (wäre bis  $R_m$  gezogen worden, könnte auch die Begrenzung einfach bestimmt werden).

Durch Hinzufügen der so bestimmten zweiten Verfestigung ohne Änderung der zuvor identifizierten Materialparameter ergeben sich schließlich die Kurven, wie sie in Abb. 4.19

zu sehen sind. Aufgrund der so erreichten sehr guten Übereinstimmung kann geschlossen werden, daß die hier beschriebene etwas pragmatische Vorgehensweise zur Bestimmung der zweiten kinematischen Verfestigung für einen ersten Anhaltswert durchaus vernünftig ist.

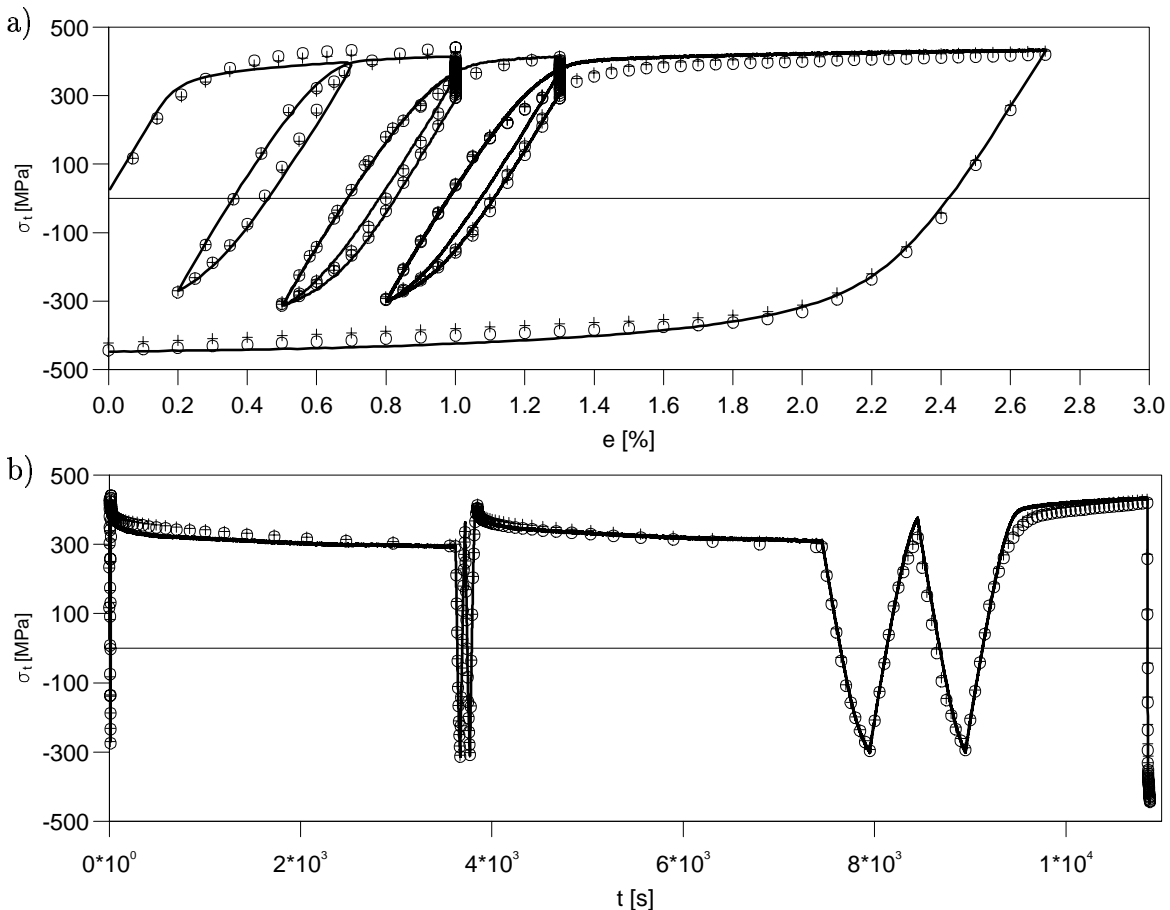


Abbildung 4.19: Dehnungs-Spannungs- und Zeit-Spannungs-Trajektorien bei 450 °C: (—) gemessener Verlauf; ( $\circ$ , +) Simulation mit identifizierten Parametern für zwei kinematische Verfestigungen.

## 4.8 Zusammenfassende Bemerkungen

Die in diesem Kapitel entwickelte Methode erlaubt es, den vollständigen Materialparametersatz (mit Ausnahme der Querkontraktionszahl) mit einer einzigen Probe anhand der Daten eines innerhalb von zwei Stunden abgeschlossenen Experimentes und mit einer in wenigen Sekunden explizit auswertbaren inversen Funktion zu ermitteln. Der



hierfür einmalig zu investierende Trainingsaufwand beläuft sich bei vorgegebenen Ein- und Ausgabedefinitionen auf etwa vier Stunden.

Dabei wird durch die Prozeßführung gewährleistet, daß der Materialparametersatz eindeutig ermittelt werden kann. Die hohe Genauigkeit und Allgemeingültigkeit der Neuronalen Netze wurde durch die Einarbeitung von Näherungslösungen erzielt. Die physikalisch sinnvolle Identifikation wurde anhand einer Validierung bei einer Zwischentemperatur demonstriert, für welche die Voraussagen auf der Basis von zwei unterschiedlichen Interpolationsverfahren nahezu deckungsgleiche Verläufe lieferten.

In Tabelle 4.12 sind zum Vergleich die charakteristischen Eckdaten von in der Literatur beschriebenen Methoden sowie der hier vorgeschlagenen Vorgehensweise unter Beschränkung auf einachsige homogene Experimente übersichtlich dargestellt. Die im oberen Teil dieser Tabelle enthaltenen eingeklammerten Belastungsphasen ( ) deuten an, daß diese in einem der nicht eingeklammerten Experimente enthalten sind.

		MAHNKEN		YAGAWA		SCHWERTEL		diese Arbeit
Experiment	Zug	1	-	-	1	4	4	-
	Wechselverfestigung	-	1	1	1	3	-	1
	Sättigungshysterese	-	-	-	-	8	-	(3)
	Kriechkurve	-	-	-	-	8	8	-
	Relaxation	-	-	-	(1)	6	-	(3)
	Anz. Proben	1	1	1	2	29	23	1
Identifikationsmethode		GV, ES		NN		NL	GV	NL+NN
Modell	Elastizität	-	-	-	-	E	E	E
	Viskosität	N	N	N	E	E	E	E
	Isotrope Verf.	N	E	E	E	E	E	E
	Erholung Iso. Verf.	-	-	-	-	-	-	E
	Kinematische Verf. 1	N	E	E	E	E	E	E
	Erholung Kin. Verf. 1	-	-	-	-	N	N	E
	Kinematische Verf. 2	-	-	-	-	E	E	-
	Erholung Kin. Verf. 2	-	-	-	-	N	N	-
Anz. Parameter		7	7	7	7	14	14	12

Tabelle 4.12: Vergleich der Identifikationsverfahren: (E/N: eindeutig/nicht eindeutig identifiziert; GV: Gradientenverfahren, ES: Evolutionsstrategie, NN: Neuronale Netze, NL: Näherungslösungen).

## 5 Identifikation der Materialparameter der Plastizität aus Kugeleindrücken in homogene Materialien

Das Kugeleindruckexperiment, abgeleitet aus der Brinellhärtemessung, wird oft zur Bestimmung mechanischer Eigenschaften eingesetzt, wenn konventionelle Experimente (z.B. Zugexperimente) nicht durchführbar sind. Der Vorteil des Eindruckexperiments ist die lokale begrenzte Deformation, womit kleine Volumina untersucht werden können. Auf diese Weise ist es z.B. möglich, die Variation der mechanischen Eigenschaften in Abhängigkeit von der Position zu bestimmen. Dies ist vor allem dort interessant, wo z.B. das Material durch die thermische Belastung oder durch ein Umgebungsmedium über dem Querschnitt allmählich verändert wird (z.B. chemische Reaktoren, Behälter). Eine weitere wichtige Anwendung ist die Ermittlung der mechanischen Eigenschaften von Bauteilen mit kleinen Abmessungen. Hierfür wurden in den letzten 15 Jahren spezielle Prüfgeräte, sogenannte Nanoindenter, entwickelt, mit denen sehr kleine Eindrücke mit Tiefen im nm-Bereich und Kräften von wenigen  $\mu\text{N}$  erzielt werden.

Für elastisch-plastische Materialien wurden grundlegende Untersuchungen bereits in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts von MEYER [81] und TABOR [107] durchgeführt. In diesen Arbeiten wurden als Meßgrößen die aufgebrachte Last  $P$  sowie die bei dieser Last erzielte projizierte Kontaktfläche  $A$  verwendet. Die Kontaktfläche wurde hierbei nach Wegnehmen der Kugel durch optische Vermessung des Abdrucks ermittelt. Mit diesen einfachen Mitteln konnte bereits gezeigt werden, daß ein Zusammenhang zwischen der Last-Kontaktradius-Kurve und der Spannungs-Dehnungs-Kurve besteht.

Mit der Arbeit von LOUBET [71] wurde dieses Experiment auf die Ermittlung der elastischen Eigenschaften erweitert. Dies wurde möglich durch die Einführung der sogenannten registrierenden Härtemessung, bei der die aufgebrachte Last  $P$  und die dabei erzielte Eindringtiefe  $h$  kontinuierlich gemessen werden. In Wirklichkeit ist die gemessene Eindringtiefe die Verschiebung des Gestänges an einer Position oberhalb des Prüfkörpers. Die tatsächliche Eindringtiefe an der Spitze des Prüfkörpers muß durch eine Korrektur unter Berücksichtigung der Maschinensteifigkeit und der Prüfkörperdeformation aus dem gemessenen Wert ermittelt werden (siehe z.B. die Arbeiten von DOERNER & NIX [17] und HUBER & TSAKMAKIS [48]).

Mit dieser Technik können die elastischen Eigenschaften aus der Entlastungssteifigkeit  $S$  ermittelt werden, wobei  $S$  aus der Tangente an die Entlastungskurve im Punkt maximaler Last gebildet wird. Hierzu wurde eine große Anzahl von Methoden vorgeschlagen, welche sich in der verwendeten Prüfkörpergeometrie und der Berücksichtigung der plastischen Deformation unterscheiden. So basiert die Methode von LOUBET [71] auf der absoluten Last während DOERNER & NIX [17] erstmals die Entlastungssteifigkeit verwendeten. Beide Methoden beschränken sich auf pyramidenförmige Prüfkörper.

OLIVER & PHARR [90] zeigten für elastisches Material, daß der Zusammenhang zwischen dem reduzierten Modul

$$E_r := \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (5.1)$$

und der Entlastungssteifigkeit  $S$  eindeutig durch den Kontaktradius  $A$ , unabhängig von der Geometrie des Prüfkörpers, gegeben ist. Die hier zugrunde gelegte Theorie von SNEDDON [33, 102, 103] setzt kleine Deformationen voraus, womit die so bestimmten Werte in Verbindung mit großen plastischen Deformationen zu Fehlern von bis zu 20% führen können [47].

Neben der Ermittlung des reduzierten Moduls aus der Entlastungskurve wurden verschiedene Verfahren von FIELD & SWAIN [25] sowie TALJAT ET AL. [109] zur Bestimmung der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie in Form eines Potenzgesetzes  $\sigma_i = K \varepsilon_p^n$  vorgeschlagen. Der Koeffizient  $K$  wurde hierbei anhand der Beziehung  $K = \sigma_y / (\sigma_y / E + 0.002)^n$  ermittelt.

Für pyramidenförmige Prüfkörper haben ATKINS & TABOR [4] gezeigt, daß die gesamte Information der Belastungskurve infolge der geometrisch ähnlichen Eindrücke auf einen Punkt der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie degeneriert. Um dies zu vermeiden, wird in der vorliegenden Arbeit ein kugelförmiger Prüfkörper gewählt. Die Kugelform ermöglicht es, einen großen Teil der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie in der Belastungskurve des Eindruckexperimentes abzubilden, wie es vielfach in der Literatur gezeigt wurde [81, 107, 109]. Für ein Materialmodell mit linearer isotroper Verfestigung wurde bereits von HUBER ET AL. [47] gezeigt, daß mit Hilfe des kugelförmigen Prüfkörpers die Materialparameter der Plastizität eindeutig zu ermitteln sind. Das dort verwendete bilineare Modell eignet sich jedoch nur zur geeigneten Berücksichtigung des Einflusses der plastischen Deformation auf die Entlastungssteifigkeit.

Die Identifikation der Materialparameter für ein Materialmodell der Viskoplastizität mit nichtlinearer isotroper Verfestigung anhand von inhomogenen Deformationen wurde bereits von MAHNKEN & STEIN [74] mit Hilfe von Optimierungsverfahren, gekoppelt mit Finite Elemente Simulationen erfolgreich durchgeführt. Allerdings wird bei dem in dieser

Arbeit vorgeschlagenen Verfahren das gesamte Verformungsfeld an der Probenoberfläche benötigt, welches mit Hilfe eines phototechnisch aufgetragenen Gitters und einem aufwendigen Bildverarbeitungsprogramm ermittelt wird.

Die interessanten Deformationen beim Kugeleindruckexperiment finden jedoch in der Kontaktfläche und im Inneren des Probenvolumens statt, womit diese für ein optisches Verfahren nicht zugänglich sind. Selbst die Verwendung der zurückbleibenden Oberflächengeometrie nach Beendigung des Experiments ist nicht sinnvoll, wenn die Eindrücke mit einem Nanoindenter durchgeführt werden sollen. Obwohl es mit Hilfe der Raster-Kraftmikroskopie möglich ist, die Eindrücke zu vermessen (s. z.B. [93]), wird das gesamte Verfahren zeitraubend und unwirtschaftlich.

Im folgenden soll gezeigt werden, wie die Materialparameter für ein Materialmodell der Plastizität mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung aus dem Eindruckversuch identifiziert werden können. Das vorgeschlagene Lösungsverfahren, wie es auch in [51, 52, 53, 54] beschrieben ist, weist mehrere Besonderheiten auf:

- Die gesamte Identifikation soll ausschließlich anhand der leicht meßbaren globalen Größen, der Kraft und der Eindrucktiefe, erfolgen.
- Statt der klassischen Werkstoffkenngrößen, der Härte und des reduzierten Moduls, wird ein vollständiger Satz an Materialparametern identifiziert.
- Es wird die Existenz nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung angenommen, wodurch die Notwendigkeit entsteht, die gesamte Verfestigung in eindeutiger Art und Weise in die beiden Anteile aufzuspalten.
- Die Querkontraktionszahl wird aus dem Eindruckexperiment explizit ermittelt und nicht, wie sonst üblich, als bekannt vorausgesetzt (siehe Kapitel 6).
- Für dünne Schichten auf Substraten wird erstmals ein Lösungsweg vorgeschlagen, der es ermöglicht, die Substrateffekte zu eliminieren und den Materialparametersatz für das reine Schichtmaterial zu ermitteln (siehe Kapitel 7).

Damit ist es möglich, auch für mikrostrukturierte Bauteile aus Metall, die u.U. zyklischen elastisch-plastischen Deformationen unterworfen werden, einen Materialparametersatz zur Verfügung zu stellen. Mit Hilfe eines Finite Elemente Programms kann somit das Verhalten des Bauteils im Betrieb realistisch vorausgesagt werden (vgl. Kapitel 3).

## 5.1 Das verwendete Materialmodell

In diesem Kapitel wird ein Materialmodell der Plastizität verwendet, ähnlich demjenigen, wie es in Abschnitt 4.2 bereits eingeführt wurde. Der Unterschied liegt in der

Beschränkung auf ein geschwindigkeitsunabhängiges Materialmodell der Plastizität, wodurch die Ermittlung von  $\dot{s}$  nach (4.38) durch die Konsistenzbedingung  $\dot{F} = 0$  für Belastung ersetzt wird und auch keine Erholungseffekte berücksichtigt werden. Das Materialmodell der Plastizität mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung ist somit gegeben durch den Satz an Evolutionsgleichungen (5.2) – (5.7), welcher als benutzerdefinierte Materialroutine in das Finite Elemente Programm ABAQUS von JANSON [62] und DIEGELE ET AL. [15] implementiert wurde. Der Integrationsalgorithmus für die lokalen Iterationen basiert auf der Methode von HUGHES & WINGET [58] und einem elastischen Prädiktor-plastischen Korrektor.

$$\overset{\vee}{\mathbf{S}} = \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{L}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathbf{L}^T = \mathcal{C}[\mathbf{D} - \mathbf{D}_p] , \quad (5.2)$$

$$F = \sqrt{\frac{3}{2}(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D - k_0} , \quad (5.3)$$

$$\mathbf{D}_p = \dot{s} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D}{\|(\mathbf{S} - \mathbf{Z})^D\|} , \quad (5.4)$$

$$\dot{k} = (\gamma - \beta(k - k_0))\dot{s} \quad (5.5)$$

$$\overset{\vee}{\mathbf{Z}} = \dot{\mathbf{Z}} - \mathbf{L}\mathbf{Z} - \mathbf{Z}\mathbf{L}^T = c\mathbf{D}_p - b\dot{s}\mathbf{Z} , \quad (5.6)$$

$$\dot{s} = \sqrt{\frac{2}{3}\mathbf{D}_p \cdot \mathbf{D}_p} \begin{cases} > 0 & \text{für } F = 0 \ \& \ L = [\dot{F}]_{\mathbf{F}_p = \text{konst.}} > 0 \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (5.7)$$

Die im folgenden verwendeten Kenngrößen zur Charakterisierung der Verfestigungseffekte wurden in Abschnitt 4.3 erläutert.

Die aufgrund der inhomogenen Deformationen, des Kontaktproblems und der nichtlinearen Materialgleichungen notwendigen Finite Elemente Simulationen machen eine wirtschaftliche Identifikation mit Optimierungsverfahren unmöglich. Eine Finite Elemente Simulation des Kugeleindrucks benötigt mit den zur Verfügung stehenden Rechnern abhängig von den Materialparametern zwischen einer halben und zwölf CPU-Stunden.

Das vorliegende inverse Problem kann in seiner Komplexität auch mit Neuronalen Netzen nur dann gelöst werden, wenn alle denkbaren Methoden zur Beschränkung der Anzahl an Simulationen ausgenutzt werden. Hierbei kommt der Formulierung der Eingabe- und Ausgabedefinitionen unter Verwendung der Dimensionsanalyse sowie des verfügbaren Vorwissens eine zentrale Bedeutung zu.

## 5.2 Plastizität mit nichtlinearer kinematischer Verfestigung

Bei der mechanischen Charakterisierung elastisch-plastischer Materialien mit Eindruckexperimenten wird üblicherweise isotrope Verfestigung angenommen. Von MURAKAMI wurden jedoch mit Hilfe von Finite Elemente Simulationen Unterschiede in der Entlastungskurve festgestellt, wenn isotrope bzw. kinematische Verfestigung angenommen wird [85]. Diese bei kinematischer Verfestigung verstärkte Rückverformung, die von dem elastischen Charakter der Entlastungskurve abweicht, wurde bereits früher experimentell beobachtet, aber als vernachlässigbar bewertet (s. z.B. [89]). Bezüglich der Ermittlung des Elastizitätsmoduls ist dies durchaus gerechtfertigt, solange keine Daten aus dem unteren Teil der Entlastung verwendet werden. Wie im folgenden gezeigt wird, kommt diesem Effekt bei der Ermittlung der Verfestigungseigenschaften jedoch eine besondere Bedeutung zu.

Die Grundlagen zur Identifikation kinematischer Verfestigung wurden mit qualitativen Untersuchungen der Effekte beim Eindruckversuch mit kugelförmigen Prüfkörpern geschaffen [46]. Es konnte unter der Annahme linearer kinematischer Verfestigung gezeigt werden, daß aus einer Entlastung und einer anschließenden erneuten Belastung bis zur maximalen Eindrucktiefe eine Hysterese entsteht, deren Geometrie von der Fließspannung und dem Tangentenmodul abhängt. Im weiteren ist in dieser Arbeit gezeigt worden, daß die verstärkte Rückverformung durch plastische Deformationen im unteren Bereich der Entlastung verursacht wird. Dieses Verhalten stellt somit eine Analogie zum Bauschinger-Effekt dar (s. Abb. 5.1). Liegt reine isotrope Verfestigung vor, so ist die Entlastung vollkommen reversibel, weshalb keine Hysteresenbildung erfolgt.

Im weiteren konnte gezeigt werden, daß dieses Verhalten auch bei nichtlinearer Verfestigung, z.B. für einen Armstrong-Frederick Ansatz, auftritt. Die Begrenzung der Verfestigung bewirkt eine Verkleinerung der Hysterese, was zeigt, daß die Daten der Eindrucktiefe-Last-Trajektorie bezüglich der Begrenzung der Verfestigung ebenfalls vollständig sind. Der entsprechende experimentelle Nachweis wurde an Stählen und Aluminium erbracht [46, S. 47].

Abbildung 5.2a zeigt eine Skizze einer solchen Hysterese, welche sich aus der Entlastungskurve  $P_u(h)$  und der Wiederbelastungskurve  $P_r(h)$  zusammensetzt und durch die Eckpunkte  $(h_r, 0)$  sowie  $(h_t, P_t)$  begrenzt wird. Hierbei bezeichnet  $h_t$  und  $P_t$  die maximale Eindrucktiefe und die dabei erreichte Last am Ende der Belastungsphase. Die verbleibende Eindrucktiefe nach Entlastung sowie der Radius des Prüfkörpers werden

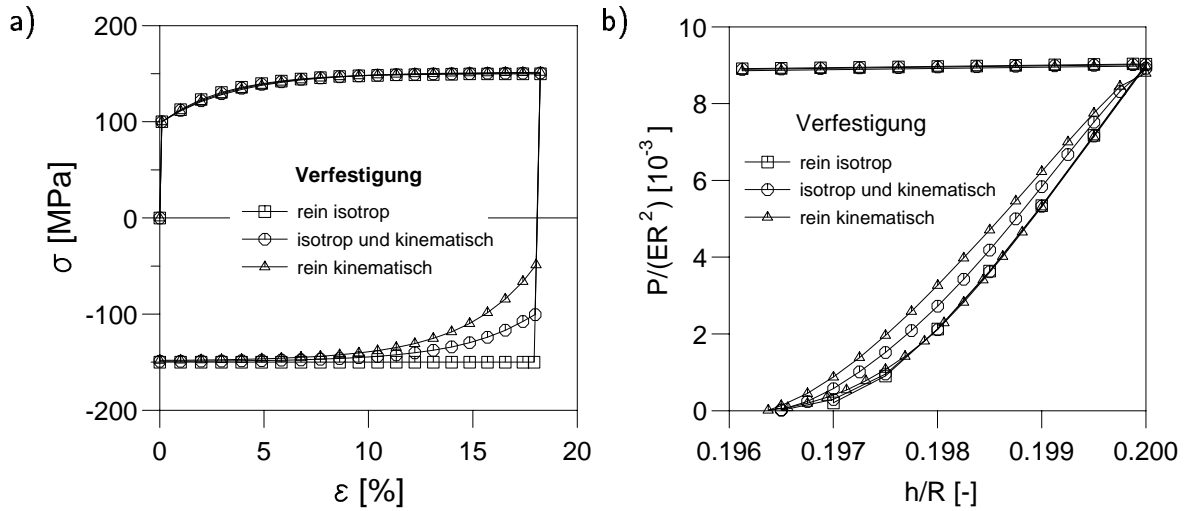


Abbildung 5.1: Hysteresebildung infolge kinematischer Verfestigung: a) einachsiges Zug-Druck-Verhalten; b) Simulation des Kugeleindrucks.

mit  $h_r$  bzw.  $R$  bezeichnet. Mit diese Größen wird eine dimensionslose Eindringtiefe

$$\delta^* := \frac{h - h_r}{h_t - h_r}, \quad 0 \leq \delta^* \leq 1 \quad (5.8)$$

sowie die dimensionslose Last

$$P^* := \frac{P}{P_t}, \quad 0 \leq P^* \leq 1 \quad (5.9)$$

eingeführt. Mit der Transformation  $h \rightarrow \delta^*, P \rightarrow P^*$  kann jede Hysterese in ein Quadrat mit den Diagonalepunkten  $(0,0)$  und  $(1,1)$  abgebildet werden. Somit ist es möglich, verschiedene Hysteresen untereinander zu vergleichen.

Wie aus Abb. 5.1 zu erkennen ist, wird zur Identifikation der kinematischen Verfestigungseffekte lediglich die Differenz zwischen der Wiederbelastungs- und der Entlastungskurve benötigt, während die Entlastungskurve selbst für  $P^* > 0.2$  bezüglich der kinematischen Verfestigung nahezu invariant ist. Somit ist es sinnvoll, die Entlastungskurve als Bezug für die Öffnung der Hysterese heranzuziehen, womit die Abhängigkeit von den elastischen Eigenschaften zumindest in der ersten Ordnung eliminiert wird.

Die resultierenden Maße zur Beschreibung der Hysteresengeometrie werden definiert mit der dimensionslosen Öffnung in Lastrichtung [50]

$$\Delta P^* := \Delta P / P_t, \quad \Delta P := P_r(\delta^*) - P_u(\delta^*) \quad (5.10)$$

und der dimensionslosen Weite in Eindringtiefenrichtung [51]

$$\Delta h^* := \Delta h / h_t, \quad \Delta h := h_u(P^*) - h_r(P^*). \quad (5.11)$$

Der qualitative Zusammenhang zwischen der kinematischen Verfestigung und der Hystereseöffnung wurde mit der Gegenüberstellung von zyklischen einachsigen Experimenten und den Eindruckhysteresen aus Kugeleindruckexperimenten für Stähle und Aluminium bereits von HUBER in [46, S. 47] gezeigt.

Der Vergleich der Hysteresegeometrien anhand eines  $\Delta P^*(\delta^*)$ -Diagramms wurde erstmals in [50] vorgenommen. Bei dem härtbaren Aluminium AlMgSi1 konnte die Erhöhung des Verfestigungsvermögens bezüglich der kinematischen Verfestigung infolge einer Glühbehandlung in der Form größerer Hysteresegeometrien nachgewiesen werden (s. Abb. 5.2b, [50]).

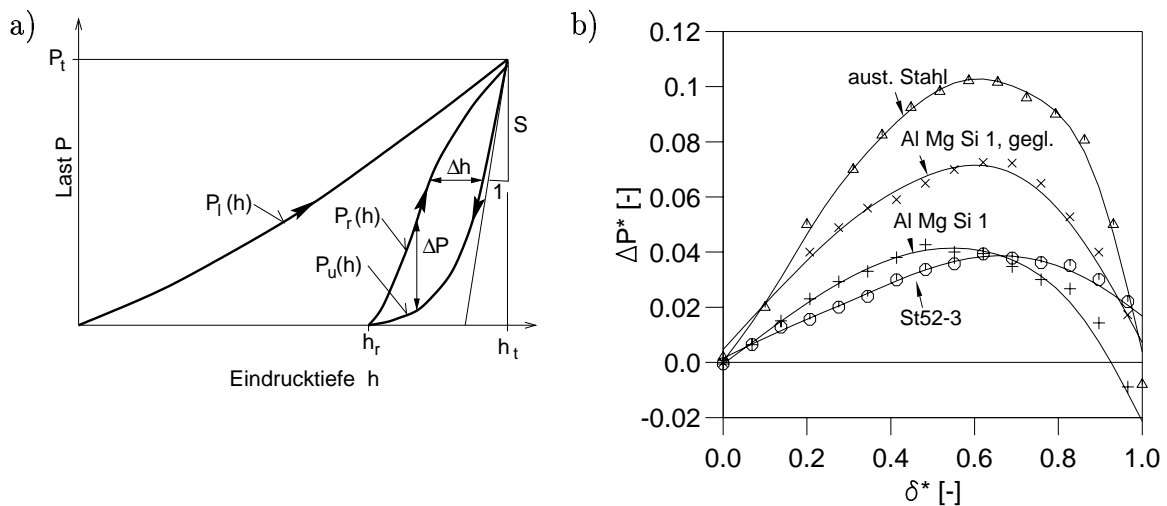


Abbildung 5.2: Charakterisierung der Hysterese aus Entlastung  $P_u(h)$  und Wiederbelastung  $P_r(h)$ : a) Weite  $\Delta h$  und Öffnung  $\Delta P$ ; b) experimentell ermittelte Öffnung für verschiedene Werkstoffe.

Für die Ermittlung des Verfestigungsverhaltens ist es naheliegend, die Belastungskurve  $P_i(h)$  heranzuziehen. Dies ist jedoch nur dann möglich, solange nur eine Verfestigung vorliegt. Da die Belastungskurve die Summe aller Verfestigungen enthält, ist eine eindeutige Aufspaltung in isotrope und kinematische Verfestigung alleine anhand der Belastungskurve nicht möglich.

Aus diesem Grund werden zunächst grundlegende Untersuchungen zur Identifikation der Materialparameter für reine kinematische Verfestigung auf der Basis der Hysteresebildung durchgeführt. Im Anschluß daran wird das Problem mit Hilfe der zusätzlichen Information aus der Belastungskurve auf die Identifikation isotroper und kinematischer Verfestigung verallgemeinert.



### 5.2.1 Finite Elemente Simulationen

Für die qualitativen Untersuchungen, welche keinen Anspruch auf Allgemeingültigkeit haben sollen, wird die Anzahl der zu variierenden Parameter durch Festlegen von  $\nu = 0.3$ ,  $E = 200$  GPa sowie  $R = 5$  mm reduziert. Als frei wählbare Größen kommen somit die Eindringtiefe  $h$  sowie die Materialparameter  $k_0$ ,  $c$  und  $b$  in Betracht.

Die Finite Elemente Simulationen in diesem Abschnitt basieren auf dem Finite Elemente Netz in Abb. 5.3 (siehe hierzu auch [49]).

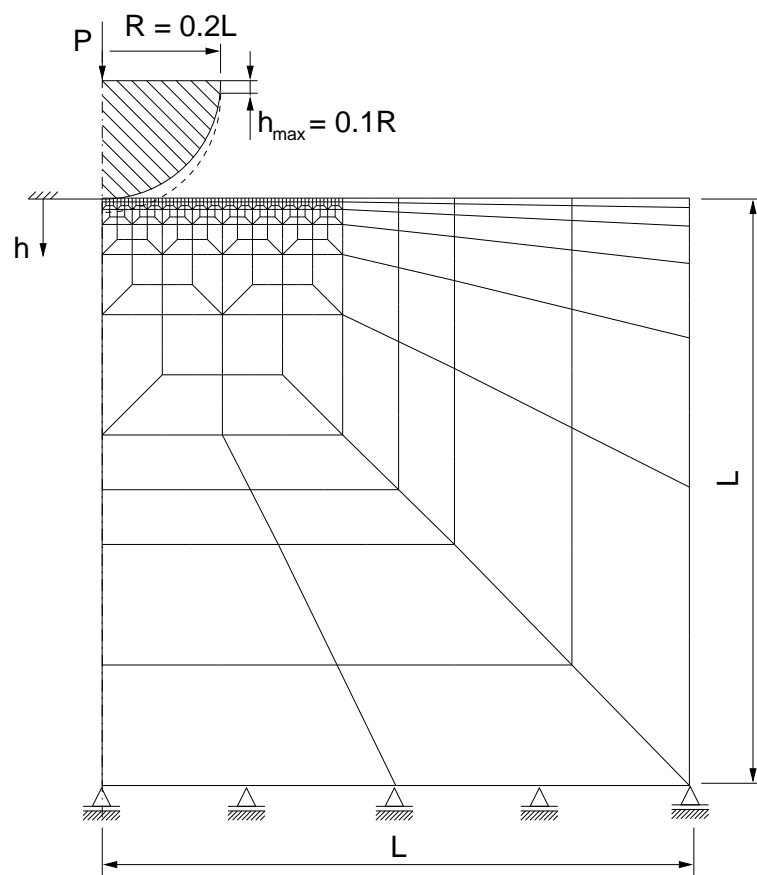


Abbildung 5.3: Das verwendete Finite Elemente Netz.

#### Wahl des Simulationsbereichs

Die Datenbasis für die Erstellung der Trainings- und Verifikationsmuster wurde wie oben beschrieben mit Hilfe von Finite Elemente Simulationen erzeugt. Die hierfür angenommenen Parameterkombinationen sind in Tabelle 5.1 angegeben.

Parameter		Werte der Stützpunkte							
$k_0$	[MPa]	50.	100.	200.	300.	400.	500.	-	-
$c$	[GPa]	0.5	1.	2.	4.	8.	16.	-	-
$c/(bk_0)$	[-]	0.1	0.4	0.8	1.1	1.2	1.4	1.8	2.6

Tabelle 5.1: Stützpunkte für die Finite Elemente Simulationen.

### Reduktion der Simulationszahl

Experimentell ist es schwierig, ein Eindruckexperiment durchzuführen, das einen Entlastungs-Wiederbelastungs-Zyklus bei einer vorgegebenen Eindringtiefe ausführt. Um dieses Problem zu umgehen, sollte das Neuronale Netz in der Lage sein, die Materialparameter aus einer Hysterese mit einer beliebigen Eindringtiefe  $h_t/R$  zu identifizieren. Somit ist das Neuronale Netz für jeden in Tabelle 5.1 angegebenen Parametersatz bei verschiedenen Eindringtiefen zu trainieren, so daß dieses in der Lage ist, die Abhängigkeit von der Eindringtiefe zu erlernen.

Zur Vermeidung einer Multiplikation der Simulationszahl mit der Anzahl der Eindringtiefen, werden in jeder Simulation Entlastungs-Wiederbelastungs-Zyklen an den Eindringtiefen

$$h_t/R \in \{0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1\} \quad (5.12)$$

eingeführt (s. Abb. 5.4). Man kann zeigen, daß die so ermittelten  $\Delta P^*(\delta^*)$ -Verläufe durch die vorangegangenen Zyklen nicht beeinflußt werden. Die Abbildungen 5.4a und 5.4b zeigen Beispiele, welche auf den willkürlich gewählten Materialparametersätzen in Tabelle 5.2 basieren. Für jeden dieser Parametersätze wurden zwei Simulationen durchgeführt. Im ersten Fall wurde bis  $h_t/R = 0.1$  belastet gefolgt von einem Entlastungs-Wiederbelastungs-Zyklus. Im zweiten Fall wurde bei jeder Eindringtiefe aus (5.12) ein Entlastungs-Wiederbelastungs-Zyklus eingefügt. Die manchmal während der Belastung auftretende Wellenbildung (s. z.B. Abb. 5.4b) resultiert aus Konvergenzproblemen im Zusammenhang mit den Kontaktelementen bei sehr duktilen Materialien.

Anhand der Ergebnisse in Abb. 5.5 ist für die gewählten Abstände der Hysterese eine nahezu exakte Übereinstimmung des  $\Delta P^*(\delta^*)$ -Verlaufs für Fall 1 mit einer Hysterese und Fall 2 mit vier vorgelagerten Hysterese festzustellen.

Insgesamt wurden somit entsprechend der Kombinationsmöglichkeiten der Materialparameter 268 Simulationen durchgeführt, was bei der verfügbaren Rechenleistung etwa zwei Wochen in Anspruch nahm.

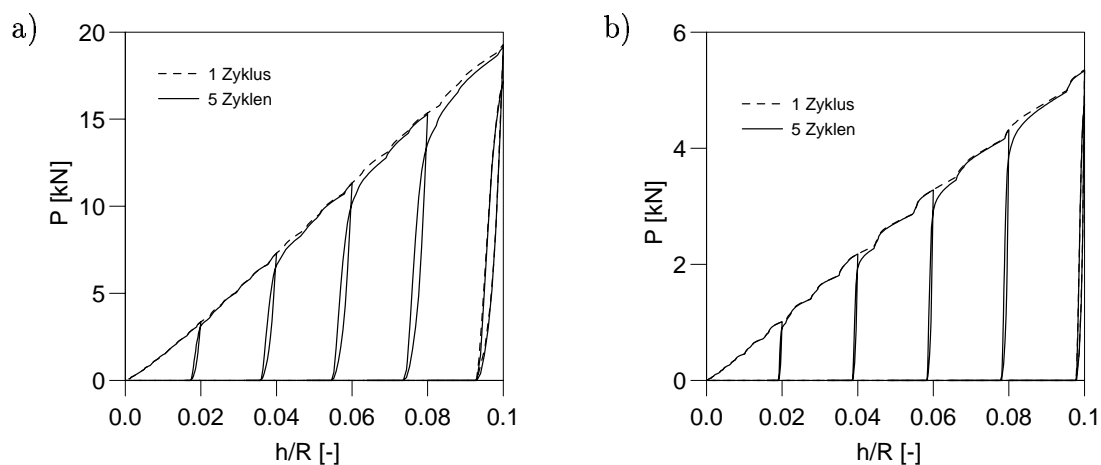


Abbildung 5.4: Vergleich einer Lastgeschichte mit einem Zyklus und fünf Zyklen für die Materialparametersätze Nr. 3 (a) und Nr. 4 (b) aus Tabelle 5.2.

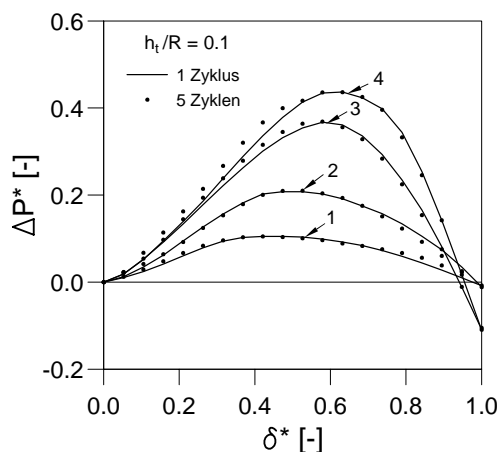


Abbildung 5.5: Vergleich der Öffnungsverläufe für einen Zyklus und vier vorangegangene Zyklen. Die zugehörigen Parametersätze sind in Tabelle 5.2 angegeben.

Nr.	$R$ [mm]	$E$ [GPa]	$\nu$ [-]	$k_0$ [MPa]	$c$ [MPa]	$c/b$ [MPa]
1	5	200	0.3	500	1000	367
2	5	200	0.3	200	500	240
3	5	200	0.3	200	8000	160
4	5	200	0.3	50	4000	37

Tabelle 5.2: Parameter für die Beispiele in den Abbildungen 5.4 und 5.5.

## 5.2.2 Identifikation auf der Basis der Hysteresenöffnung

Beispiele von  $\Delta P^*(\delta^*)$ -Verläufen für eine maximale Eindringtiefe von  $h_t/R = 0.1$  sind in Abb. 5.6a–c dargestellt. Es ist anhand dieser Diagramme zu erkennen, daß jeder der variierten Materialparameter  $k_0$ ,  $c$  und  $c/b$  einen individuellen Effekt in den Kurven zeigt. Der unterschiedliche Charakter im Kurvenverlauf gibt Anlaß zu der Annahme, daß die Materialparameter auf der Basis solcher Meßdaten eindeutig identifiziert werden können.

Aufgrund der hochgradigen Nichtlinearität hat es sich als hilfreich erwiesen, neben der Ausnutzung von Vorwissen auch die GSL-Transformation nach YOSHIMURA ET AL. zu verwenden (siehe Abschnitt 2.14).

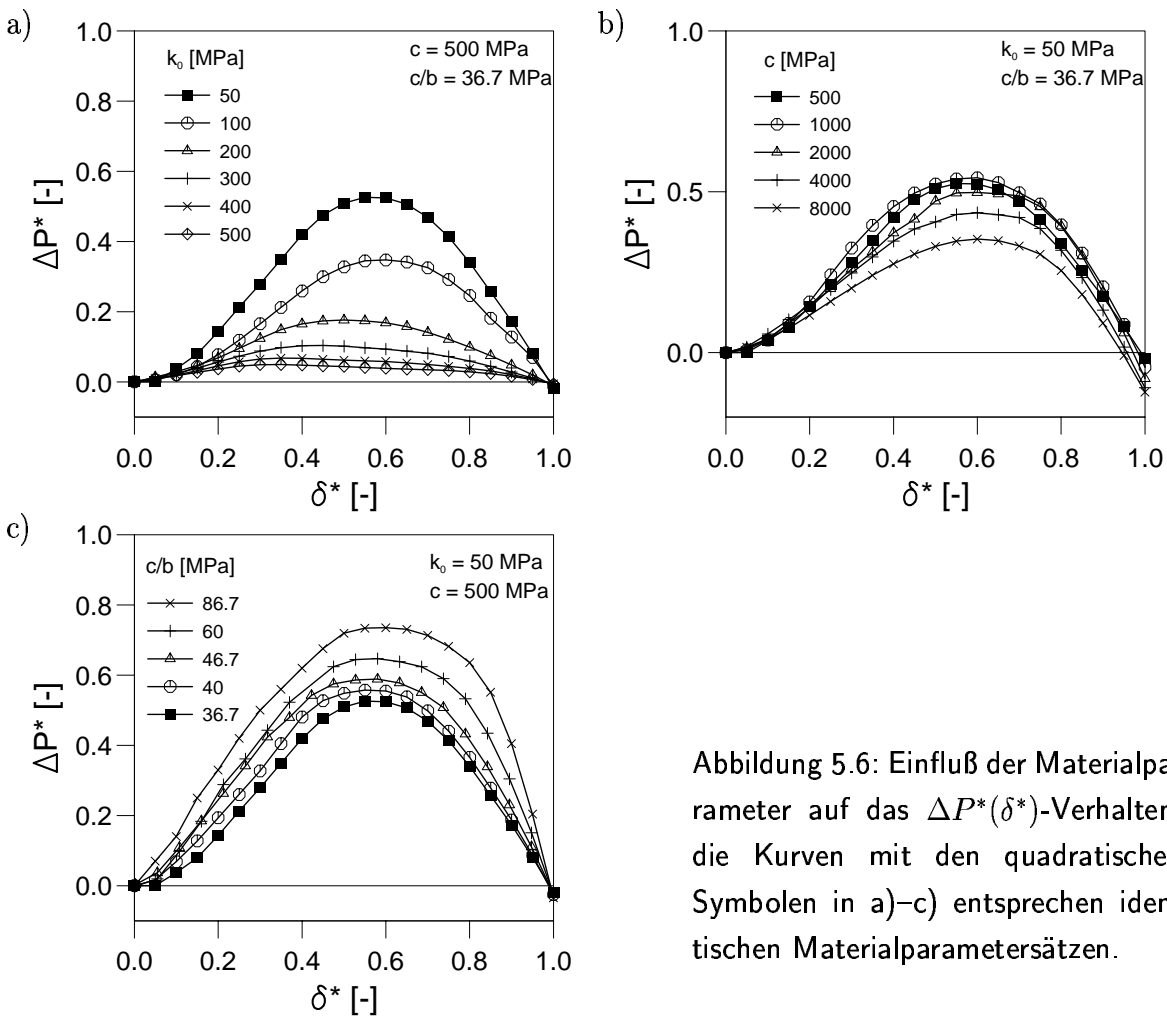


Abbildung 5.6: Einfluß der Materialparameter auf das  $\Delta P^*(\delta^*)$ -Verhalten; die Kurven mit den quadratischen Symbolen in a)–c) entsprechen identischen Materialparametersätzen.

### Eingabedefinition

Sinnvollerweise wird die Eingabedefinition zunächst so einfach wie möglich gestaltet. Neben der Information über die maximale Eindrucktiefe

$$x_1 := \frac{h_t}{R} \quad (5.13)$$

werden lediglich die dimensionslosen Öffnungswerte

$$x_2 \dots x_5 := \Delta P^*(\delta_i^*), \quad \delta_i^* := \frac{i}{4}, \quad i = 1 \dots 4 \quad (5.14)$$

zur Verfügung gestellt. Eine deutliche Erhöhung der Zahl an Eingaben würde nur unwesentlich mehr unabhängige Information liefern. Die resultierenden GSL-Transformationsfunktionen sind in Abb. 5.7 dargestellt. Aus diesen Kurven ist zum einen zu erkennen, daß die Häufigkeit für große Öffnungen sehr stark abnimmt. Zum anderen ist interessant, daß  $\Delta P^*(\delta^* = 1) < 0$  gilt, d.h. die Wiederbelastungskurve verläuft immer unterhalb von  $P_t$ .

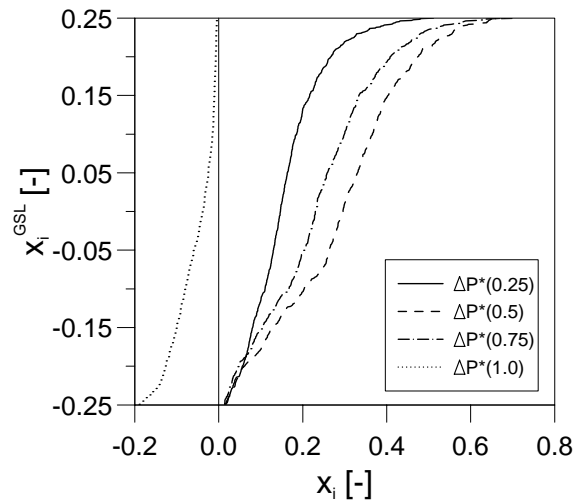


Abbildung 5.7: GSL-Transformationsfunktionen für die dimensionslose Öffnung  $\Delta P^*$ .

### Ausgabedefinition

Im Prinzip könnten direkt die Werte von  $k_0$ ,  $c$  und  $b$  als Ausgabedaten benutzt werden. Um jedoch eine Unabhängigkeit des Neuronalen Netzes vom Prüfkörperradius  $R$  zu erreichen, müssen die Ausgabedaten dimensionslos dargestellt werden. Zusätzlich ist es zweckmäßig, für die Entdimensionierung Gebrauch von Vorwissen zu machen. Zu diesem Zweck werden die Erfahrungen ausgenutzt, die auf TABOR zurückgehen. In [107] wurde

mit experimentellen Mitteln gezeigt, daß der mittlere Druck unter der Kontaktfläche  $P_m$ , aufgetragen als Funktion des Kontaktradius  $a/R$ , mit der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie korreliert.

Zur Vereinfachung wird das Aufwölben oder Einsinken des Kontaktradiuses außer Acht gelassen und ein geschätzter Kontaktdruck

$$\tilde{P}_m := \frac{P}{\pi(2Rh - h^2)} \quad (5.15)$$

verwendet, der leicht aus den geometrischen Verhältnissen herzuleiten ist. Da insbesondere die Parameter  $k_0$  und  $c/b$  die Verfestigung in Form von Spannungsbeträgen charakterisieren, wird die Entdimensionierung dieser Parameter mit dem Kontaktdruck Vorteile bringen. Im Fall des Parameters  $c$ , der Steigungscharakter hat, besitzt die Entdimensionierung mit  $\tilde{P}_m$  eher formalen Charakter. Die resultierenden Ausgabedefinitionen lauten somit

$$y_1 := k_0^* := \frac{k_0}{\tilde{P}_{mt}}, \quad (5.16)$$

$$y_2 := c^* := \frac{c}{\tilde{P}_{mt}}, \quad (5.17)$$

$$y_3 := (c/b)^* := \frac{c/b}{\tilde{P}_{mt}}, \quad (5.18)$$

wobei  $\tilde{P}_{mt}$  der maximale Kontaktdruck ist, welcher sich nach (5.15) für die Eindringtiefe  $h_t$  und die Last  $P_t$  berechnet.

Abbildung 5.8 zeigt die zugehörigen GSL-Transformationsfunktionen der Ausgabedefinitionen  $y_1 \dots y_3$ . Tatsächlich überstreichen die dimensionslosen Parameter  $k_0^*$  und  $(c/b)^*$  weniger als eine Größenordnung mit nahezu linearer Verteilung, während  $c^*$ , genau wie  $c$  selbst, fast zwei Größenordnungen einnimmt. Dies zeigt die Wirksamkeit der Entdimensionierung mit dem Kontaktdruck zur Reduktion des Identifikationsaufwandes für  $k_0$  und  $c/b$ .

## Training und Verifikation

Bereits während des Trainings zeigte sich, daß die Materialparameter nicht gut ermittelt werden können. Insbesondere bereiteten Eindringtiefen bis  $h_t/R \leq 0.04$  Schwierigkeiten, was auf die schmalen Hysteresen in diesem Bereich zurückzuführen ist (vgl. Abb. 5.4). Der verbleibende Eindringtiefenbereich wurde somit auf  $0.06 \leq h_t/R \leq 0.1$  beschränkt. Das resultierende Neuronale Netz besteht aus drei Schichten mit fünf Eingabeneuronen,

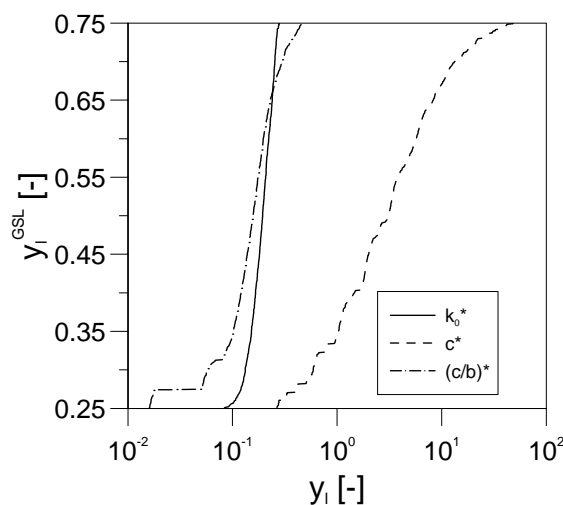


Abbildung 5.8: GSL-Transformationsfunktionen für die Ausgabedaten  $k_0^*$ ,  $c^*$  und  $(c/b)^*$ .

vier Neuronen in der verdeckten Schicht und drei Ausgabeneuronen (5-4-3). Die Anzahl der Trainingsmuster ist  $N_T = 668$  und der Verifikationsmuster ist  $N_V = 29$ .

Die Verteilung des relativen Fehlerbetrages ist in Abb. 5.9 dargestellt. Es ist zu erkennen, daß lediglich  $k_0$  ein akzeptables 90%-Konfidenzintervall von 10% Abweichung aufweist, während für  $c$  und  $c/b$  lediglich 55% der ausgewerteten Muster einen Fehler kleiner als 20% zeigen. Die ungenügenden Identifikationsqualität weist jedoch auf Nichteindeutigkeit oder unvollständige Eingabedaten hin. Um dies zu beheben, muß mindestens eine weitere linear unabhängige Information am Eingang zur Verfügung gestellt werden.

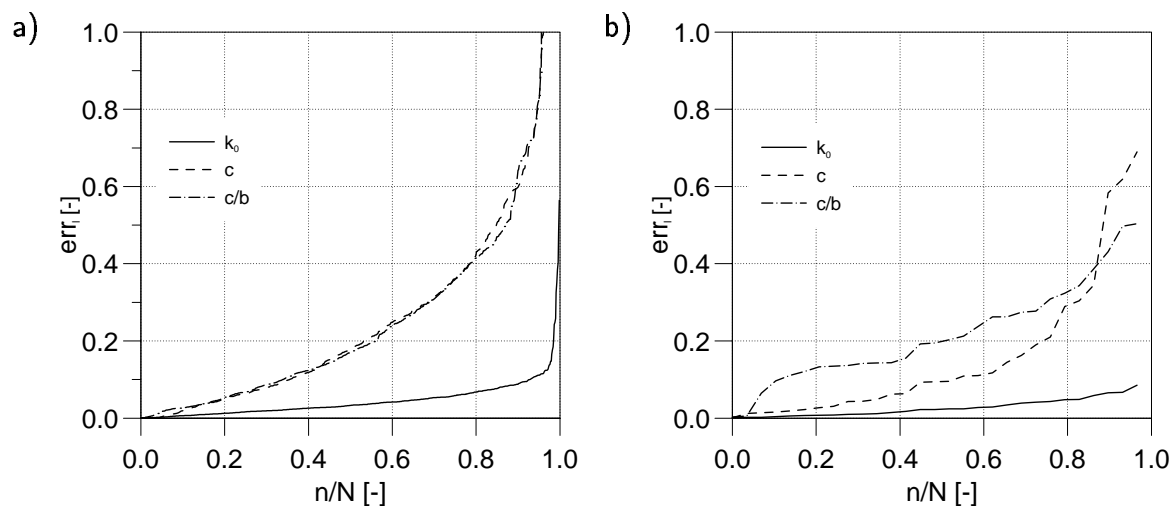


Abbildung 5.9: Verteilung des relativen Fehlers  $err_l$  für das (5-4-3)-Netz: a) Trainingsmuster ( $N = 668$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 29$ ).

### 5.2.3 Identifikation auf der Basis der Hysteresenöffnung und Hysteresenweite

Mit der Verwendung des Öffnungsverlaufs wird die Hysterese ausschließlich in Lastrichtung beschrieben. Durch die Weite der Hysterese nach (5.11) kann die Hysterese zusätzlich in die Eindrucktiefenrichtung beschrieben werden. Inwieweit diese zusätzliche Information unabhängig von der Öffnung ist, kann von vorneherein nicht beurteilt werden. Die Erweiterung des bestehenden Neuronalen Netzes ist jedoch kein besonderer Aufwand, so daß der Vergleich der Ergebnisse darüber Aufschluß gibt.

#### Eingabedefinition

Die resultierende Eingabedefinition in der erweiterten Form ergibt sich durch die bereits existierenden Definitionen

$$x_1 := h_t^*, \quad (5.19)$$

$$x_2 \dots x_5 := \Delta P^*(\delta_i^*), \quad \delta_i^* := \frac{i}{4}, \quad i = 1 \dots 4 \quad (5.20)$$

und die zusätzlichen Weiten

$$x_6 \dots x_8 := \Delta h^*(P_i^*), \quad P_i^* := \frac{i}{4}, \quad i = 1 \dots 3. \quad (5.21)$$

#### Ausgabedefinition

Die Ausgabedefinition wird von dem vorigen Netz unverändert übernommen:

$$y_1 := k_0^* := \frac{k_0}{\tilde{P}_{mt}}, \quad (5.22)$$

$$y_2 := c^* := \frac{c}{\tilde{P}_{mt}}, \quad (5.23)$$

$$y_3 := (c/b)^* := \frac{c/b}{\tilde{P}_{mt}}. \quad (5.24)$$

#### Training und Verifikation

Das neue Neuronale Netz besitzt vier Schichten (8-6-4-3), d.h. neben den acht Eingabeneuronen und den drei Ausgabeneuronen sind zwei verdeckte Schichten mit sechs bzw. vier Neuronen eingefügt worden. Die zugehörigen GSL-Transformationsfunktionen sind in Abb. 5.10 dargestellt.

Die resultierenden Fehlerverteilungen zeigen eine deutliche Verbesserung der Identifikationsqualität (s. Abb. 5.11).



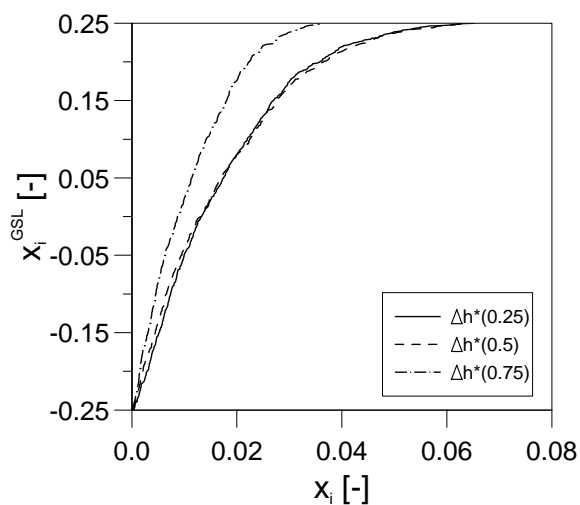


Abbildung 5.10: GSL-Transformationsfunktionen für die Hysteresenöffnung  $\Delta h^*$ .

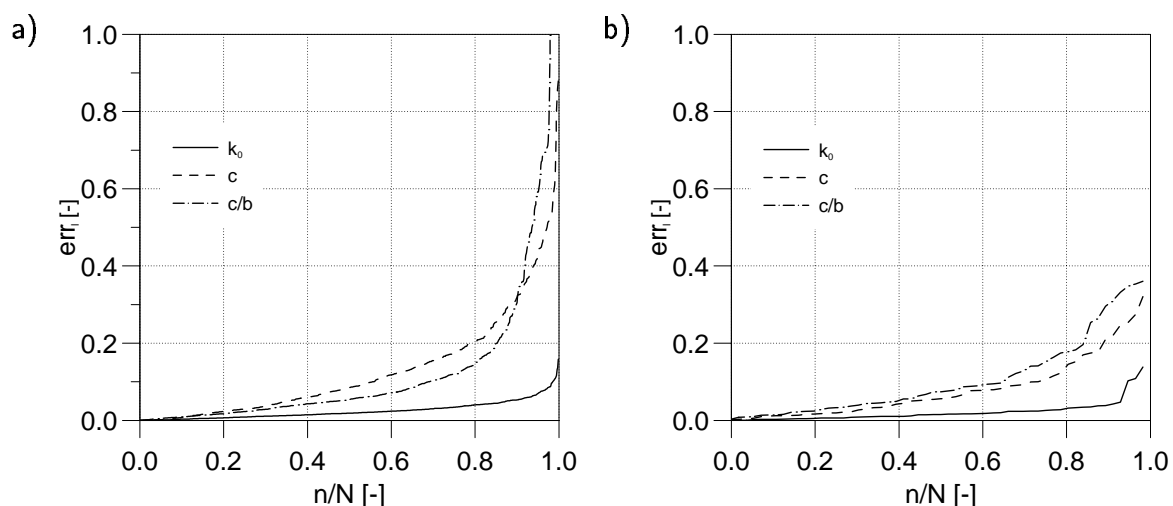


Abbildung 5.11: Verteilung des relativen Fehlers  $err_l$  für das (8-6-4-3)-Netz: a) Trainingsmuster ( $N = 668$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 29$ ).

Um die Identifikationsfähigkeit zu demonstrieren, ist es zweckmäßig, die Verläufe der Spannung für einachsigen homogenen Zug als Funktion der plastischen Dehnung nach (4.70) mit  $F = 0$  zu berechnen. Abbildung 5.12 zeigt die resultierenden Verläufe von Verifikationsmustern für die exakten und die aus den Eindringtiefe-Last-Trajektorien ermittelten Parametersätze. In Abb. 5.12a wurden die Hysteresen exakt an den Eindringtiefen positioniert, die für das Training verwendet wurden. Die zusätzlich geforderte Interpolationsfähigkeit für die Eindringtiefe wird in Abb. 5.12b demonstriert. Hier wurden die Hysteresen genau zwischen den trainierten Eindringtiefen positioniert.

In beiden Fällen wird eine ausgezeichnete Identifikation erzielt. Zur Verdeutlichung muß erwähnt werden, daß für jede der Hysteresen ein Parametersatz identifiziert wird, so daß mehrere durch Kreise markierte Verläufe pro Parametersatz in den Diagrammen eingezeichnet sind. Die Übereinstimmung mit den exakten Verläufen zeigt, daß das Neuronale Netz in der Lage ist, aus eindrucktiefenabhängigen Hysteresedaten die eindrucktiefenunabhängigen Materialparameter zu gewinnen.

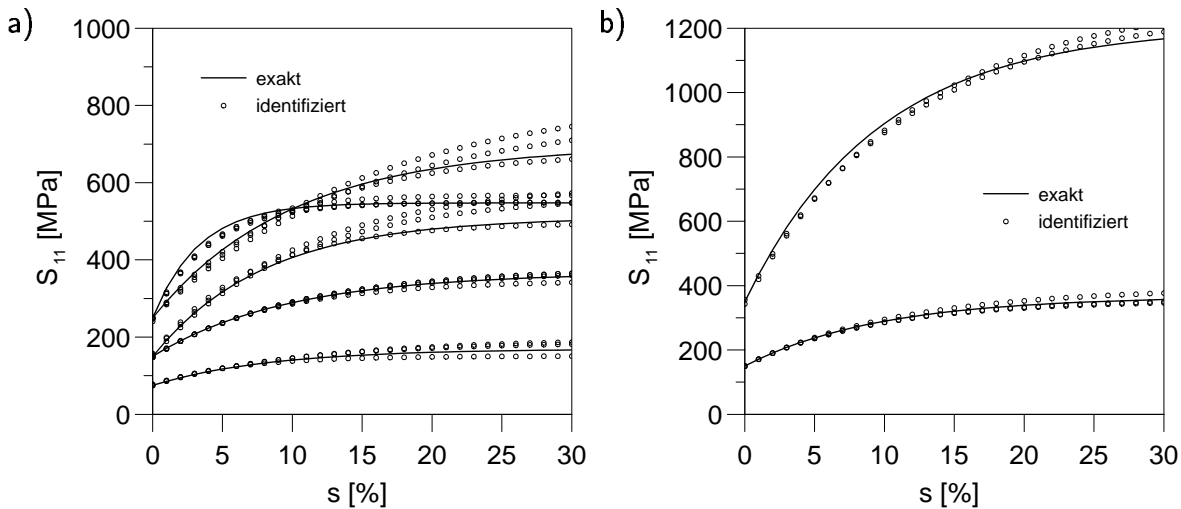


Abbildung 5.12: Spannungs-Dehnungs-Verläufe für Verifikationsmuster: a)  $h_t/R \in \{0.6, 0.8, 1.0\}$ ; b)  $h_t/R \in \{0.7, 0.9\}$ .

### 5.3 Plastizität mit nichtlinearer isotroper und kinematischer Verfestigung

Die Ergebnisse des vorigen Abschnitts belegen, daß die Materialparameter der nichtlinearen kinematischen Verfestigung eindeutig anhand einer Hysterese des Kugeleindruckexperimentes zu ermitteln sind. Das reale Experiment unterscheidet sich von dem akademischen Fallbeispiel in Abschnitt 5.2 durch das Hinzukommen von isotroper Verfestigung und einem beliebigen Elastizitätsmodul. Außerdem wurde durch Experimente mit Kriech- sowie Relaxationsphasen nachgewiesen, daß bereits bei Raumtemperatur viskose Effekte zu beobachten sind (siehe [46, S. 55, S. 81–82]).

Es muß nun gezeigt werden, daß auch für diesen realistischen Fall die Identifikation der Verfestigungsparameter sowie des reduzierten Moduls möglich ist. Zu diesem Zweck steht als weitere Informationsquelle die Belastungskurve sowie die Entlastungssteigung

zur Verfügung (vgl. Abb. 5.2a).

Das Konzept, das bereits in [52] umgesetzt worden ist, sieht die Identifikation der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie aus der Belastungskurve sowie der kinematischen Verfestigung aus der Hysterese vor. Der reduzierte Modul kann aus einer Entlastung ermittelt werden.

Die Anwesenheit der isotropen Verfestigung, eines beliebigen Elastizitätsmoduls sowie von viskoser Effekte kann jedoch zusätzliche Einflüsse auf die Hysterese und die Belastungskurve zur Folge haben, welche aufgrund der bisherigen Vereinfachungen nicht beobachtet werden konnten. Deshalb ist es von großer Bedeutung für die spätere Wahl der Eingabedefinition, zunächst zu studieren, welche Materialparameter sich auf welche Weise in der Belastungskurve bzw. in der Hysterese niederschlagen.

Obwohl das zu entwickelnde Identifikationsverfahren auf die Materialparameter der Plastizität beschränkt sein soll, ist es für die Auswertung realer Experimente notwendig, Effekte aufgrund von Viskosität zu diskutieren. Daher werden in den folgenden beiden Abschnitten zusätzlich einige Finite Elemente Simulationen mit dem Materialmodell der Viskoplastizität (4.33)–(4.38) durchgeführt.

### 5.3.1 Effekte bezüglich der Belastungskurve

#### Verfestigungen

Die Effekte isotroper und kinematischer Verfestigung wurden bereits in [49, 50] qualitativ untersucht. Bei Betrachtung der Belastungskurve  $P_l(h)$  (siehe Abb. 5.2a), kann aufgrund dieser Arbeiten das Folgende festgestellt werden. Wie bereits in Abb. 5.1 demonstriert wurde, können im wesentlichen identische Spannungs-Dehnungs-Kennlinien mit unterschiedlichen Beiträgen kinematischer Verfestigung erzeugt werden. Das gleiche gilt für die zugeordneten Belastungskurven des Kugeleindrucks.

Dies wird nochmals in Abb. 5.13a verdeutlicht, wobei die Belastungskurven für drei verschiedene Gesamtverfestigungsverläufe dargestellt sind. Für jedes Beispiel A, B, C wurde der Beitrag der kinematischen Verfestigung von 0% über 50% bis 100% variiert. Die Ergebnisse zeigen, daß die resultierenden Verläufe in allen drei Fällen praktisch deckungsgleich sind.

#### Elastizitätsmodul

Im Gegensatz zum Anteil der kinematischen Verfestigung hat der Elastizitätsmodul vor allem für härtere Materialien einen signifikanten Einfluß auf den Verlauf der Belastungs-

kurve (s. Abb. 5.13b). Deshalb ist es wichtig, den Einfluß des Elastizitätsmoduls bei der Ermittlung des Gesamtverfestigungsverhaltens aus der Belastungskurve zu berücksichtigen.

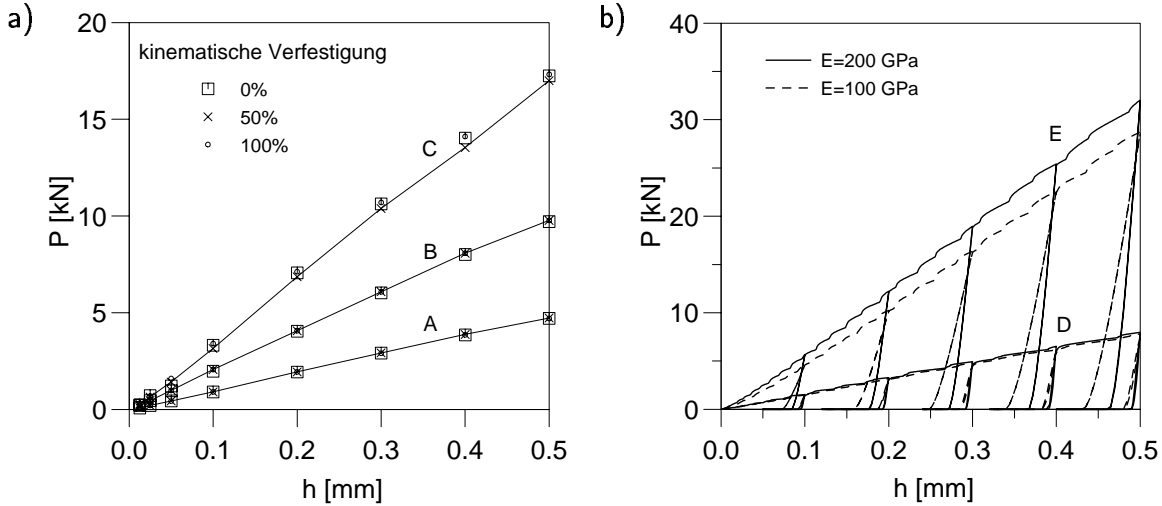


Abbildung 5.13: Einfluß des E-Moduls auf die Belastungskurve für weiche und harte Materialien; die verwendeten Materialparameter sind in Tabelle 5.3 angegeben.

No.	$k_0$	$\sigma'$	$\Delta\Sigma$
[–]	[MPa]	[GPa]	[MPa]
A	30	16.5	60
B	165	0.3	17
C	300	3.0	30
D	43	43.2	109
E	368	33.4	321

Tabelle 5.3: Charakteristische Parameter zur Festlegung des Gesamtverfestigungsverhaltens für die Beispiele in den Abbildungen 5.13a und b.

### Viskosität

Zunächst wurde für den Parametersatz der Plastizität ( $\eta = 0$ ) mit  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 165$  MPa,  $c = 10$  GPa,  $b = 90.91$ ,  $\gamma = 8.25$  GPa und  $\beta = 50$  eine Finite Elemente Simulation des Eindruckversuchs durchgeführt. Anschließend wurde mit dem Viskoplastizitätsmodell (4.33)–(4.38) für  $m = 3$  sowie  $\eta = 10^{10}$  MPa<sup>m</sup>s und den

gleichen Plastizitätsparametern wie zuvor ein Eindruck gerechnet, bei dem an verschiedenen Punkten Relaxationsphasen ( $h = konst$ ) von 1000 s eingefügt wurden. Die Wahl der Viskositätsparameter wurde dabei so vorgenommen, daß die Verhältnisse in etwa den experimentellen Beobachtungen für den Werkstoff AlMgSi 1 in [46, S. 55] entsprechen. Die Ergebnisse der Simulationen sind in Abb. 5.14 dargestellt. Es ist erkennbar, daß die Relaxationsendpunkte mit guter Genauigkeit auf der Belastungskurve für reine Plastizität liegen.

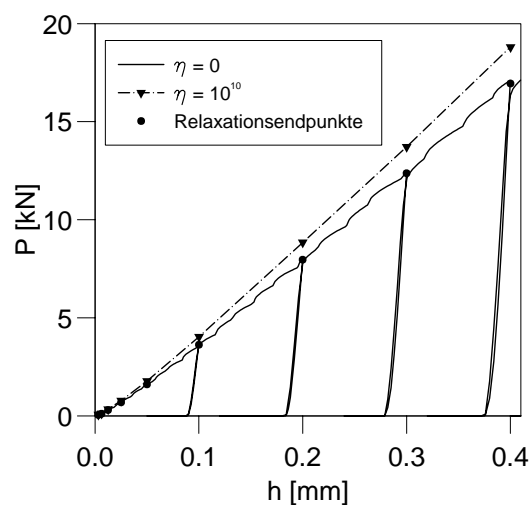


Abbildung 5.14: Vergleich der Belastungskurven für Plastizität und Viskoplastizität.

An dieser Stelle ist anzumerken, daß die Endpunkte aufgrund der inhomogenen Deformation im Gegensatz zu einachsigen Experimenten nach genügend langer Relaxationszeit unter der Belastungskurve des plastischen Materials liegen (siehe [46, S. 53]). Dies ist dadurch zu erklären, daß die Relaxation (global tiefengesteuert) nicht gleichzeitig eine Relaxation auf lokaler Ebene darstellt, wodurch es zu Spannungsumlagerungen kommt. Dies hat zur Folge, daß eine Belastung mit unendlich langsamer Geschwindigkeit nicht dasselbe Ergebnis liefert, als eine Belastung endlicher Geschwindigkeit mit einer anschließenden unendlich lange andauernden Relaxation. Damit dies jedoch als meßbarer Effekt sichtbar ist, muß der Anteil der Last aufgrund der viskosen Überspannung in etwa gleich groß sein wie die Last, die aus der Verfestigung resultiert. Für praxisrelevante Fälle, insbesondere für Metalle, kann in guter Näherung davon ausgegangen werden, daß der Endpunkt der Relaxation dem Ergebnis einer rein plastischen Deformation entspricht.

### 5.3.2 Effekte bezüglich der Hysterese

#### Isotrope Verfestigung

Auf der Grundlage der Erfahrung in Abschnitt 5.2 können die Maße der Öffnung und der Weite der Hysterese herangezogen werden, um den Beitrag der kinematischen Verfestigung zur gesamten Verfestigung zu ermitteln.

Finite Elemente Simulationen zeigen jedoch, daß die isotrope Verfestigung die Hysterese in diesen Abmessungen verkleinert. Dies wird in Abb. 5.15 anhand von Simulationsergebnissen gezeigt. Die Kurve F repräsentiert ein Material mit reiner kinematischer Verfestigung. Wird diesem eine isotrope Verfestigung hinzugefügt, entsteht die deutlich schlankere Hysterese G. Die für diese Beispiele verwendeten Materialparameter sind in Tabelle 5.4 angegeben.

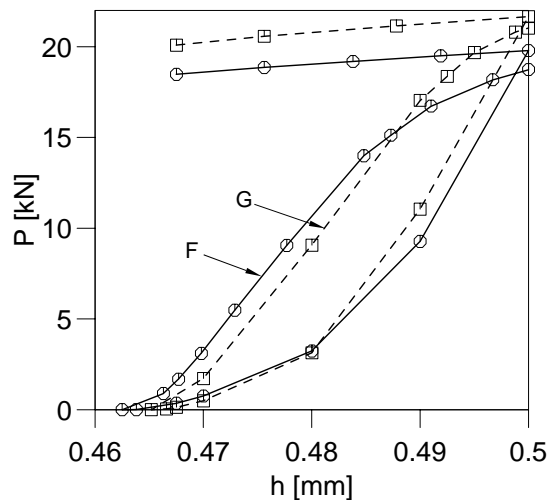


Abbildung 5.15: F: Hysterese für reine kinematische Verfestigung, G: mit zusätzlicher isotroper Verfestigung, (vgl. Tabelle 5.4).

Beispiel	$k_0$ [MPa]	$\gamma$ [MPa]	$\beta$ [-]	$c$ [MPa]	$b$ [-]
F	250	0	0	3000	13.85
G	250	1000	10	3000	13.85

Tabelle 5.4: Materialparameter für die Beispiele in Abb. 5.15;  $R = 5$  mm,  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ .

## Viskosität

Für das Beispiel in Abb. 5.14 wurden ebenfalls Hysteresen mit verschiedenen Werten von  $\eta$  berechnet. Die resultierenden Hysteresen wurden mit den Daten  $P_t$ ,  $h_t$  sowie  $h_r$  des plastischen Materials entdimensioniert und in Abb. 5.16 dargestellt. Dabei wird, ausgehend von der Belastungskurve, eine Relaxation von 1000 s eingefügt und dann mit der Entlastung und Wiederbelastung fortgefahren. Es zeigt sich, daß die Entlastungskurven im untersten Bereich leicht voneinander abweichen. Hier beginnt die plastische Rückverformung und somit sind auch viskose Effekte sichtbar. Ebenso weichen die Wiederbelastungskurven im oberen Bereich bei erneutem einsetzen plastischer Deformation voneinander ab. Im großen mittleren Bereich ist die Form der Hysterese jedoch invariant gegenüber viskosen Effekten, d.h. die plastische Dehnrage ist genügend klein.

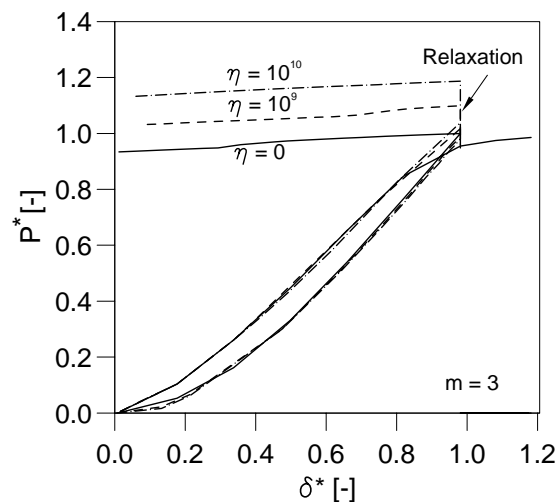


Abbildung 5.16: Vergleich der Hysteresen für Plastizität und Viskoplastizität.

Aufgrund dieser Untersuchungen wird deutlich, daß die Verwendung der Öffnung  $\Delta P(\delta^* = 1)$  stark durch die viskosen Effekte beeinflusst wird. Hier ergeben sich Werte größer Null, die für plastisches Materialverhalten ausgeschlossen sind (vgl. Abb. 5.7). Somit kann zum Zweck der experimentellen Anwendbarkeit die Öffnung an der Eindringtiefe  $h_t$  nicht weiter verwendet werden. Die anderen Öffnungswerte und Weiten werden durch die viskosen Effekte praktisch nicht beeinträchtigt.

### 5.3.3 Generierung der Muster

Die Anzahl der relevanten Materialparameter, die bei der Generierung der Muster variiert werden müssen ist sechs ( $E, k_0, \gamma, \beta, c, b$ ), wenn isotrope und kinematische Verfesti-

gung betrachtet wird. Die Betrachtung viskoser Effekte entfällt infolge einer geeigneten Prozeßführung sowie der Wahl von diesbezüglich invarianten Maßen. Zur Reduzierung des Simulationsaufwands muß die Anzahl zu variierender Parameter so weit wie möglich verringert werden. Zu diesem Zweck wird von der Dimensionsanalyse in Verbindung mit dem PI-Theorem Gebrauch gemacht (s. Abschnitt 2.3.5).

Zum Beispiel gilt für die dimensionslose Eindrucktiefen-Last-Trajektorie die Beziehung

$$\frac{P(h^*)}{k_0 R^2} = f \left( h^*, \frac{k_0}{E}, \nu, \frac{\gamma}{E}, \frac{\gamma}{\beta E}, \frac{c}{E}, \frac{3c}{2bE} \right), \quad (5.25)$$

wobei

$$h^* := \frac{h}{R}. \quad (5.26)$$

Die dimensionslose Eindrucktiefe  $h^*$  ist die einzige geometrische Kenngröße in (5.25). Entsprechend den Argumenten der rechten Seite von (5.25) reicht es aus, die Parameter  $h$ ,  $\nu$ ,  $k_0$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$ ,  $c$  und  $b$  zu variieren, um jede Kenngröße unabhängig wählen zu können. Das heißt,  $E$  und  $R$  können konstant gehalten werden und dennoch sind alle denkbaren Verläufe  $P(h^*)/(k_0 R^2)$  erzeugbar. Im folgenden werden für die Querkontraktionszahl, den Elastizitätsmodul sowie den Kugelradius die Werte  $\nu = 0.3$ ,  $E = 200$  GPa sowie  $R = 5$  mm gewählt. Einige Simulationen wurden jedoch zum Zweck der Verifikation mit einem Elastizitätsmodul von 100 GPa durchgeführt.

Würden nun wie in Abschnitt 5.2 je Parameter fünf oder mehr Stützpunkte berechnet, ergäben sich hier mindestens 3125 Finite Elemente Simulationen mit einer Dauer von im Mittel je 6 CPU-Stunden, d.h. es müßte bei der Verfügbarkeit von 4 Knoten einer Cray-J916 Workstation für ca. ein halbes Jahr rund um die Uhr gerechnet werden. Wird die Auflösung der Stützpunkte ohne die Ergreifung besonderer Maßnahmen reduziert, besteht die Gefahr einer schlechten Generalisierung bis hin zur reinen Klassifikation durch das Neuronale Netz.

Um diese unangenehmen Effekte zu vermeiden, wurden neben den Mustern mit wenigen äquidistant verteilten Stützpunkten zusätzlich etwa gleich viele Muster erzeugt, deren Stützpunkte im Parameterraum (s. Tabelle 5.5) zufällig statistisch gleichverteilt gewählt wurden.

Werden dem Neuronalen Netz nun alle Muster während des Trainings präsentiert, besteht aufgrund der Zufallsmuster keine Möglichkeit, bestimmte Ausgabewerte zu klassifizieren. Das Netz wird gezwungen, im gesamten Trainingsbereich aussagefähig zu bleiben. Für jedes Muster wurden fünf Lastzyklen an den Eindrucktiefen  $h_i^* \in \{0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1\}$  durchgeführt. Einige Simulationen wurden nicht innerhalb von 12 CPU Stun-



Parameter		Äquidistant			Statist. Gleichverteilt		
$E$	[GPa]	200	–	–	100	,	200
$k_0$	[MPa]	30	165	300	50	–	300
$\Delta\Sigma/k_0$	[-]	0.1	1.05	2.0	0.2	–	3.0
$\gamma/(\beta\Delta\Sigma)$	[-]	0.0	0.5	1.0	0.0	–	1.0
$\gamma$	[MPa]	1500	8250	15000	3000	–	30000
$c$	[MPa]	1000	5500	10000	2000	–	20000

Tabelle 5.5: Parameter Basis für die Finite Elemente Simulationen (äquidistante Muster und Zufallsmuster).

den abgeschlossen, so daß schließlich durch die Multiplikation mit der Hysteresenzahl 1182 Trainingsmuster verfügbar waren.

### 5.3.4 Gesamtverfestigungsverhalten

Als erster Schritt zur Entwicklung einer Identifikationsmethode wird jeder Belastungskurve eine Reihe von Spannungs-Dehnungs-Punkten ( $(s, \sigma)$ -Punkten) zugeordnet, die für den betrachteten Parametersatz durch homogenen einachsigen Zug resultieren würden. Diese Punkte werden später herangezogen, um die Genauigkeit des identifizierten Parametersatzes anhand von Gleichung (4.70) zu beurteilen.

Für diese Aufgabe wird Gebrauch von der empirischen Beziehung von TABOR [107]

$$\sigma_r = \frac{P_m}{2.8}, \quad (5.27)$$

$$\varepsilon_r = 0.2 \frac{a}{R}, \quad (5.28)$$

gemacht, welche einem  $P(a)$ -Verlauf (Last-Kontaktradius-Verlauf) einen  $\sigma_r(\varepsilon_r)$ -Verlauf zuordnet. In den Gleichungen (5.27) und (5.28) bezeichnen  $\sigma_r$  und  $\varepsilon_r$  die repräsentative Spannung und Dehnung, die aus dem mittleren Druck in der Kontaktfläche  $P_m := P/A = P/(\pi a^2)$  und dem Radius der Kontaktfläche gebildet werden.  $A$  bezeichnet hierbei die projizierte Kontaktfläche. Aufgrund der experimentellen Beobachtungen von TABOR muß die Deformation vollständig plastisch sein, d.h. das Material innerhalb des Kontaktgebietes muß plastischer Deformation unterliegen. Die Grenze, wann dieser Zustand erreicht ist, hängt jedoch von den Materialeigenschaften selbst ab, wodurch der anfängliche Bereich der so ermittelten Spannungs-Dehnungs-Kennlinie bis zu einer

nicht bekannten Dehnung vom korrekten Verlauf abweicht. Die genauere Ermittlung dieses Anfangsbereiches ist nach wie vor Gegenstand von Forschungsarbeiten. So verwendet z.B. TALJAT ET AL. [109] ein einfaches Plastizitätsmodell mit Verfestigung nach einem Potenzgesetz in Verbindung mit Finite Elemente Analysen und Methoden aus der Literatur.

Ein weiteres Problem ist die Ermittlung des tatsächlichen Kontaktradius  $a$ . Auf der Grundlage der Arbeit von HILL ET AL. [42] wurde eine sehr genaue Methode von FIELD & SWAIN [25] vorgeschlagen. Allerdings benötigt diese Methode eine Regressionsanalyse der Belastungskurve (s. auch [46, S. 32]) und stellt für die Aufbereitung der Eingabedaten einen zu großen Aufwand dar.

Im folgenden werden die Gleichungen (5.27) und (5.28) geeignet modifiziert, so daß durch ein Neuronales Netz gültige Spannungs-Dehnungs-Punkte im gesamten Dehnungsbereich ermittelt werden können.

Hierzu wird eine sogenannte effektive Kontaktfläche definiert

$$A_e := \frac{P}{\sigma_r(s)}. \quad (5.29)$$

Analog zu (5.28) wird die akkumulierte plastische Bogenlänge in Relation zu der Eindringtiefe gebracht

$$s := 0.2 \frac{\tilde{a}}{R}, \quad (5.30)$$

wobei

$$\tilde{a} := \sqrt{2Rh - h^2} \quad (5.31)$$

den geschätzten Kontaktradius bezeichnet, der unter Vernachlässigung von Aufwölbung oder Einsinken des Kontaktrandes zu ermitteln ist.

Die effektive Kontaktfläche kann dimensionslos gemacht werden, indem diese durch die geschätzte Kontaktfläche  $\tilde{A}$  dividiert wird:

$$\tilde{A} := \pi \tilde{a}^2, \quad (5.32)$$

$$A_e^* := \frac{A_e}{\tilde{A}} = \frac{P}{\sigma_r(s) \tilde{A}}. \quad (5.33)$$

Für gegebene Werte von  $P$ ,  $h$ ,  $R$  und  $A_e^*$  können somit die repräsentative Spannung  $\sigma_r$  sowie die zugehörige plastische Dehnung  $s$  berechnet werden. Um die hierzu benötigten  $A_e^*(h/R)$ -Punkte für eine gegebene  $P(h/R)$ -Trajektorie zu ermitteln, wurde ein Neuronales Netz, bezeichnet mit *AeNet*, generiert.

### Eingabedefinition

Natürlich hängen die Werte  $A_e^*$  von den Verfestigungseigenschaften des Materials und der betrachteten Eindringtiefe ab. Die Verfestigungseigenschaften werden durch die Form der Belastungskurve am Eingang des Netzes gegeben. Diese Daten ersetzen die Regressionsparameter, die bei der Methode von FIELD & SWAIN verwendet werden.

Die Eingabedefinition für AeNet besteht aus sechs Lastverhältnissen

$$x_i := \frac{P(h_i^*)}{P(h^* = 0.04)}, \quad h_i^* = 0.04 \cdot 2^{i-7}, \quad i = 1..6. \quad (5.34)$$

Abbildung 5.17a zeigt die zugehörigen GSL-Transformationsfunktionen.

### Ausgabedefinition

Die Eindringtiefenabhängigkeit des ( $A_e^*$ )-Wertes wird bei diesem Netz durch die Nummer des Ausgabeneurons repräsentiert. Die Ausgabedefinition umfaßt sieben Werte der effektiven Kontaktfläche  $A_e^*$

$$y_l := A_e^*(h_l^*), \quad h_l^* = 0.04 \cdot 2^{l-7}, \quad l = 1..7. \quad (5.35)$$

Die  $y_l$ -Werte, die in Abb. 5.17b dargestellt sind, treten an die Stelle der von TABOR empirisch ermittelten Konstanten 2.8 in der Relation (5.27). Anhand der GSL-Transformationsfunktionen ist erkennbar, daß für die Neuronen, die den größten Eindringtiefen zugeordnet sind, der Wert von TABOR in etwa dem Mittelwert entspricht.

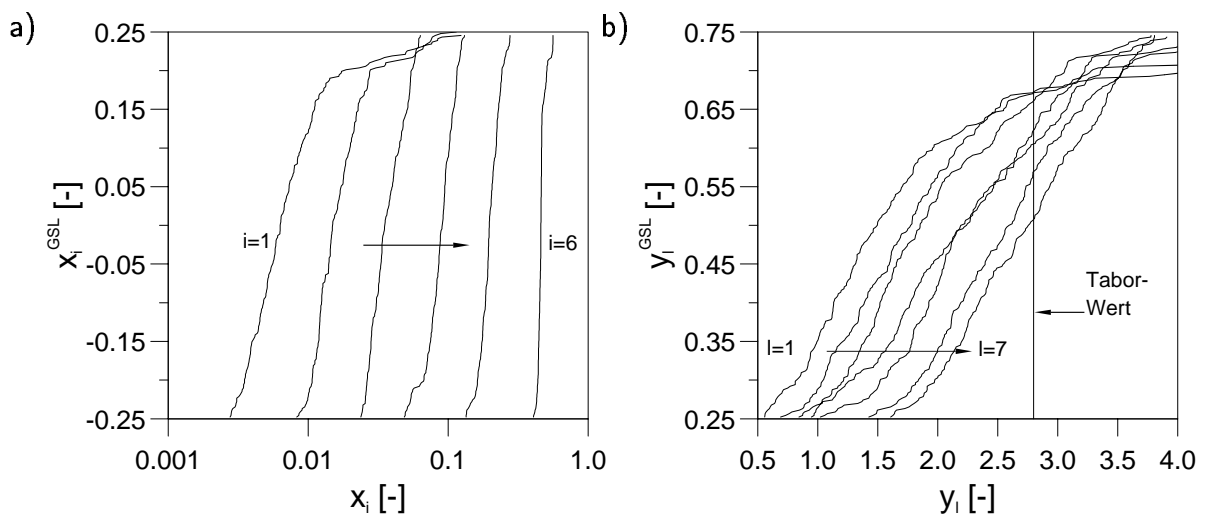


Abbildung 5.17: GSL-Transformationsfunktionen für a)  $x_i = P_i^*$ ; b)  $y_l = (A_e^*)_l$ .

## Training und Verifikation

Das trainierte AeNet besteht aus sechs Eingabeneuronen, sechs Neuronen in der ersten verdeckten Schicht, sieben Neuronen in der zweiten verdeckten Schicht sowie sieben Neuronen in der Ausgabeschicht. Das Training dauerte 10000 Epochen, wobei ein MSE-Wert von 0.005 für die Trainingsmuster und 0.0085 für die Verifikationsmuster erzielt wurde.

Einige der ausgewerteten Verifikationsmuster sind in Abb. 5.18 zu sehen. Die Genauigkeit der so ermittelten Spannungs-Dehnungs-Punkte erlaubt es, die Daten von AeNet als Basis für ein Fehlermaß

$$E_\sigma = \frac{1}{7} \sum_{l=1}^7 \frac{|\sigma(s_l) - (\sigma_r)_l|}{(\sigma_r)_l} \quad (5.36)$$

heranzuziehen, wobei  $\sigma(s)$  nach (4.70) aus den identifizierten Materialparametern zu berechnen ist.

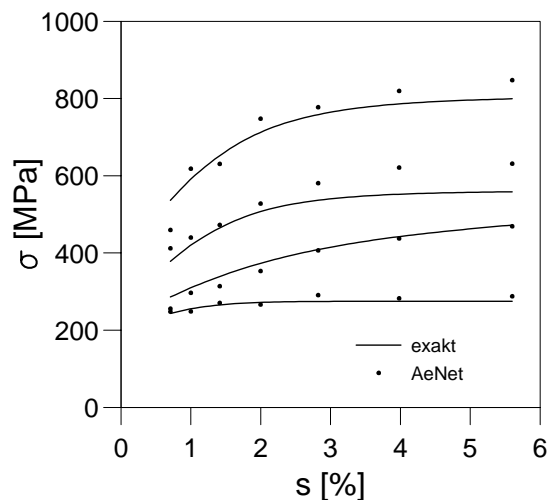


Abbildung 5.18: Exakte und mit AeNet identifizierte Spannungs-Dehnungs-Punkte für einige Verifikationsmuster.

An dieser Stelle ist anzumerken, daß AeNet benutzt werden kann, um den tatsächlichen Kontaktradius sowie die vertikale Aufwölbung oder Absenkung des Kontaktrandes abzuschätzen. Wie die GSL-Transformationsfunktionen bestätigten, gilt die TABOR-Beziehung in guter Näherung für die größten Eindrücktiefen.

Somit kann die tatsächliche Kontaktfläche  $A$  unter Verwendung von (5.27), der Definition  $P_m := P/A$  sowie (5.33) nach

$$A \approx \frac{P}{2.8\sigma} = \frac{A_e}{2.8} = \frac{A_e^* \tilde{A}}{2.8} \quad (5.37)$$

abgeschätzt werden. Wird im weiteren Gebrauch von (5.31) gemacht, kann die vertikale Verschiebung  $w$  der materiellen Punkte entlang des Kontaktrandes ermittelt werden, indem

$$A = \pi a^2 = \pi \{2Rh(h+w) - (h+w)^2\} \quad (5.38)$$

in (5.37) eingesetzt wird:

$$A \approx \pi(2Rh - h^2) \frac{A_e^*}{2.8}. \quad (5.39)$$

Werden die quadratischen Terme in (5.38) und (5.39) vernachlässigt, folgt schließlich die Beziehung

$$\frac{w}{h} \approx \frac{A_e^*}{2.8} - 1. \quad (5.40)$$

In Abb. 5.19 sind die Ergebnisse, berechnet nach (5.40), für alle Zufallsmuster dargestellt. Es ist zu erkennen, daß alle Werte von  $w/h$  über  $-0.5$  liegen, welches der untere Grenzwert für das Einsinken darstellt. Dieser ist gegeben durch die analytische Lösung für elastisches Materialverhalten von HARDING & SNEDDON [33]. Die obere Grenze liegt etwa bei  $w/h \rightarrow 0.45$  und entspricht dem Ergebnis für ideale Plastizität NORBURY & SAMUEL (s. HILL ET AL. [42]).

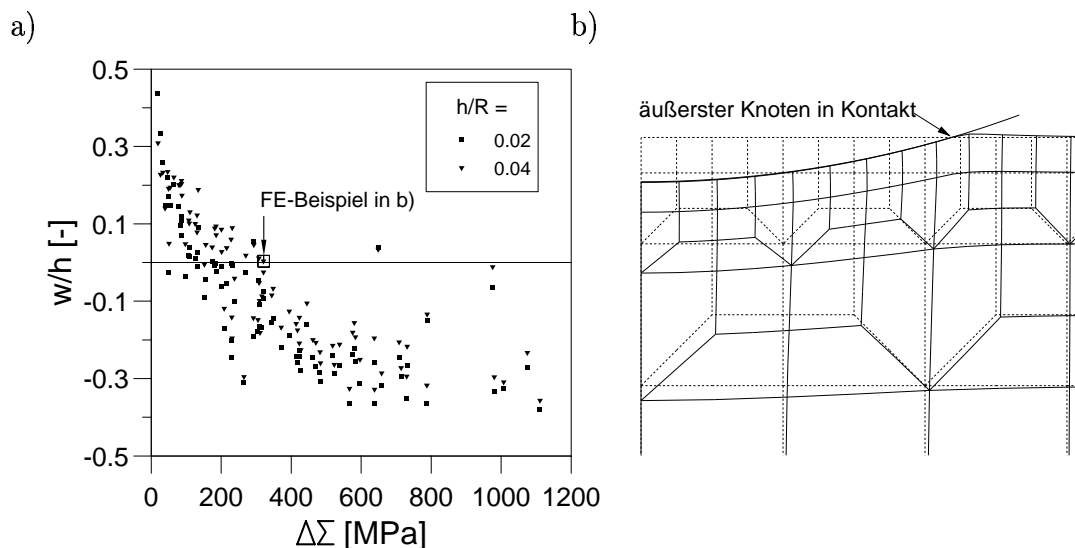


Abbildung 5.19: Auswertung der vertikalen Verschiebung: a)  $w/h$  in Abhängigkeit der maximalen Verfestigung  $\Delta\Sigma$ ; b) Beispiel einer Finite Elemente Simulation ohne vertikale Verschiebung des Knotens am Kontaktrand, gekennzeichnet in a).

Die Genauigkeit von (5.40) kann durch ein Finite Elemente Beispiel, welches eine vertikale Verschiebung  $w/h \approx 0$  aufweist, auf einfache Weise verdeutlicht werden (s. Abb. 5.19a). Abbildung 5.19b zeigt die Referenzkonfiguration sowie das verformte Finite Elemente Netz bei der Eindrucktiefe  $h^* = 0.04$ . Die Parameter sind  $R = 5$  mm,  $h = 0.2$  mm,  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 368$  MPa,  $c = 6532$  MPa,  $b = 168$ ,  $\gamma = 23600$  MPa,  $\beta = 90$ . Die ermittelte Lage des äußersten Knotens, der noch in Kontakt ist, ist deckungsgleich mit der Lage der unverformten Oberfläche, was die vorigen Überlegungen bestätigt.

### 5.3.5 Identifikation des reduzierten Moduls $E_r$ sowie der Spannungen $k_0$ , $\Delta\Sigma$ und $(3c)/(2b)$

Im folgenden werden zwei Neuronale Netze generiert. Das erste Netz wird in diesem Abschnitt behandelt und mit *StressNet* bezeichnet. Es hat die Aufgabe, den reduzierten Modul  $E_r = E/(1-\nu^2)$  sowie die Spannungen  $k_0$ ,  $\Delta\Sigma$  und  $(3c)/(2b)$  zu identifizieren. Die Ermittlung der Moduli  $\sigma'$  und  $3c/2$  wird Gegenstand des darauf folgenden Abschnitts sein, in welchem das zweite Netz *ModuliNet* entwickelt wird.

#### Eingabedefinition

Die dimensionslose Eindrucktiefe

$$x_1 := h_t^* = \frac{h_t}{R} \quad (5.41)$$

gibt dem Neuronalen Netz die aktuelle Position der Hysterese an. Die Entlastungssteifigkeit  $S := dP/dh|_{h_t}$  als Eingabegröße hat den Zweck, den Einfluß der elastischen Eigenschaften auf die Belastungskurve zu berücksichtigen (vgl. Abb. 5.13b).  $S$  wird zweckmäßig in der Form

$$x_2 := S^* = \frac{Sh_t}{P_t} \quad (5.42)$$

entdimensioniert. Die zugehörigen GSL-Transformationsfunktionen sind in Abb. 5.20 dargestellt. In diesem Fall ist eine stark nichtlineare Verteilung zu erkennen, welche durch die GSL-Transformationsfunktion regularisiert wird. Die Hysteresengeometrie wird entsprechend Abschnitt 5.2.3 beschrieben mit

$$x_3 \dots x_5 := \Delta P^*(\delta_i^*), \quad \delta_i^* := \frac{i}{4}, \quad i = 1 \dots 3 \quad (5.43)$$

$$x_6 \dots x_8 := \Delta h^*(P_i^*), \quad P_i^* := \frac{i}{4}, \quad i = 1 \dots 3. \quad (5.44)$$

Im Gegensatz zu Abschnitt 5.2.3 wurde hier darauf verzichtet, die Öffnung bei  $\delta^* = 1$  zu liefern. Diese geringfügige Änderung hat eine Unempfindlichkeit des Neuronalen Netzes gegenüber viskosen Effekten zur Folge.

Aus den beobachteten Abhängigkeiten in den Abschnitten 5.3.1 und 5.3.2 folgt, daß für die Ermittlung der Werte von  $E_r$ ,  $k_0$ ,  $\Delta\Sigma$  und  $(3c)/(2b)$  neben den Daten der Hysterese die Belastungskurve einbezogen werden muß. Die Belastungsdaten für die Eingabedefinitionen werden auf die Eindrucktiefen  $h^* \geq 2.5 \cdot 10^{-3}$  beschränkt, da für kleinere Eindrucktiefen zum Teil unsinnige Lastverhältnisse aufgrund der Diskretisierung der Oberfläche vorkommen. Dies ist an den GSL-Transformationsfunktionen für  $i = 1, 2$  in Abb. 5.17a zu erkennen, welche die Kurven höherer Eindrucktiefen schneiden. Das heißt, in diesem Eindrucktiefenbereich ist ein Auf- und Abschwingen der Last mit Erhöhung der Eindrucktiefe infolge der diskreten Kontaktelemente sichtbar. Selbst wenn eine Verfeinerung des Netzes prinzipiell kein Problem darstellt, ist es sinnvoll, diese Eindrucktiefen nicht zu verwenden, da im Experiment dasselbe Phänomen infolge von Rauigkeit auftreten kann. Die Eingabedefinitionen lauten

$$x_9 \dots x_{12} := \frac{P(h^* = 0.02 \cdot 2^{i-4})}{P(h^* = 0.06)}, \quad i = 1 \dots 4. \quad (5.45)$$

### Ausgabedefinition

Der geeigneten Entdimensionierung des reduzierten Moduls wurde eine frühere Veröffentlichung gewidmet (s. HUBER ET AL.[47]), womit die dort gewonnene Erfahrung hier genutzt werden kann. Es konnte gezeigt werden, daß die Entdimensionierung

$$\frac{E_r \sqrt{h_t R}}{S} = \frac{1}{2c_t} \quad (5.46)$$

bereits die wesentlichen Abhängigkeiten von Eindrucktiefe und Entlastungssteifigkeit enthält und die notwendige Korrektur bezüglich der Effekte plastischer Deformation einem Faktor  $1 \leq c_t \leq 1.8$  entspricht. Die Vergrößerung des  $c_t$ -Wertebereichs auf  $1 \leq c_t \leq 2.2$  in Abb. 5.20b entsteht durch die im Gegensatz zu [47] hier verwendete nichtlineare Verfestigung. Dadurch wird das Material duktiler und die Effekte der plastischen Deformation auf die Kontaktsteife sind etwas stärker. Auch bei der in [47] beschriebenen Methode wird die Belastungskurve durch Parameter einer Regressionsanalyse beschrieben, was im Zusammenhang mit der Eingabedefinition zu vermeiden ist. Das Neuronale Netz ersetzt die komplizierte iterative Methode in [47] durch einen expliziten Zusammenhang.

Die absoluten Spannungsdaten werden sinnvollerweise durch die in Tabelle 4.1 angegebene Kenngrößen beschrieben, welche in direktem Zusammenhang mit der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie stehen. Für die Entdimensionierung der Spannungsgrößen wird die Korrelation (5.27) im Sinne der Analogie zwischen Belastungskurve und Spannungs-Dehnungs-Kennlinie nach TABOR ausgenutzt. Mit Hilfe des mittleren Drucks  $\tilde{P}_m$  werden die spannungsartigen Materialparameter auf eine bestimmte Spannung der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie bezogen. Somit resultiert die Ausgabedefinition

$$y_1 := \frac{E_r \sqrt{h_t R}}{S}, \quad (5.47)$$

$$y_2 := \frac{k_0}{\tilde{P}_m(h^* = 0.06)}, \quad (5.48)$$

$$y_3 := \frac{k_0 + \Delta\Sigma}{\tilde{P}_m(h^* = 0.06)}, \quad (5.49)$$

$$y_4 := \frac{(3c)/(2b)}{\tilde{P}_m(h^* = 0.06)}. \quad (5.50)$$

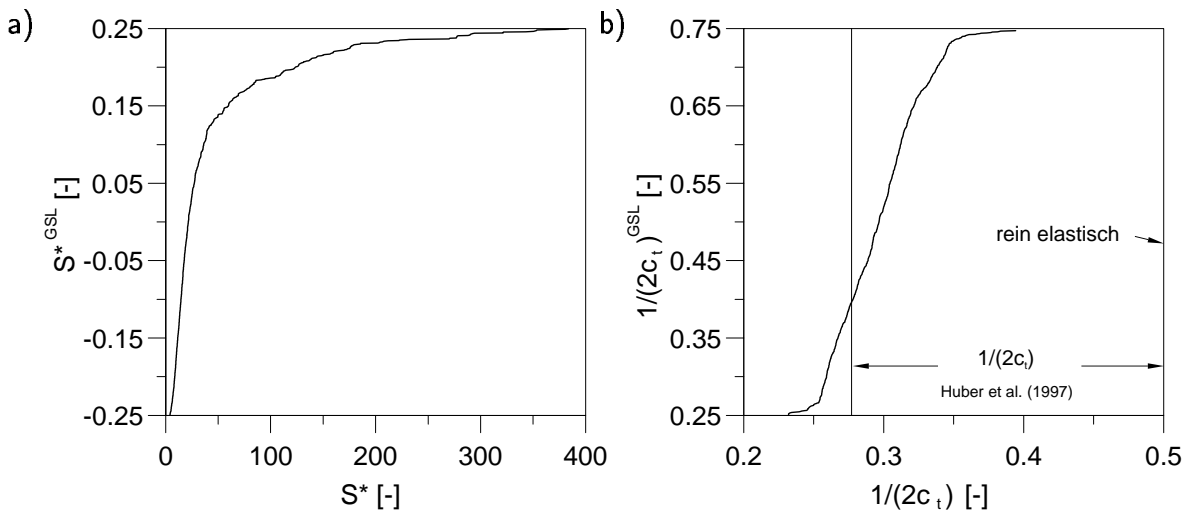


Abbildung 5.20: GSL-Transformationsfunktionen für a)  $S^*$ ; b)  $1/(2c_t)$ ; die Pfeile markieren den Bereich von  $1/(2c_t)$  für lineare Verfestigung von HUBER ET AL.[47].

## Training und Verifikation

StressNet besteht aus zwölf Eingabeneuronen, zwei verdeckten Schichten mit zehn bzw. acht Neuronen sowie vier Ausgabeneuronen. Die kurze Trainingsdauer von 3000 Epochen und die an der Komplexität des Problems gemessenen kleinen MSE-Werte von



0.00974 für die Trainingsmuster und 0.00978 für die Verifikationsmuster deuten an, daß das Problem eindeutig formuliert ist und die Entdimensionierungen der Ausgabedaten sinnvoll sind.

Wie aus den Verläufen des Fehlerbetrags für Trainings- und Verifikationsmuster zu erkennen ist, ist die Ermittlung des reduzierten Moduls am einfachsten. Die Ermittlung der oberen Schranke für die kinematische Verfestigung fällt am ungenauesten aus. Dazwischen liegen die Kurven für die Fließspannung sowie die maximale Gesamtverfestigung. Die Übereinstimmung der Identifikationsqualität für die Trainings- und Verifikationsmuster zeigt, daß das Problem eindeutig gelöst worden ist.

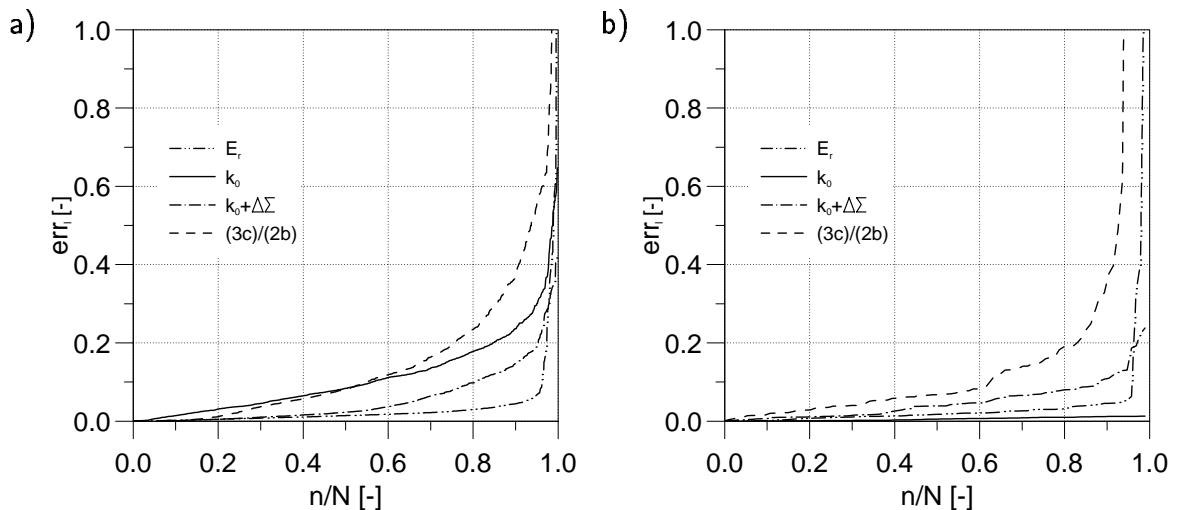


Abbildung 5.21: Verteilung des relativen Fehlers  $err_i$  für StressNet: a) Trainingsmuster ( $N = 1091$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 91$ ).

### 5.3.6 Plastische Moduli $3c/2$ und $\sigma'$

Nachdem die Parameter  $E_r$ ,  $k_0$ ,  $\Delta\Sigma$  und  $(3c)/(2b)$  mit StressNet ermittelt werden können, verbleibt die Bestimmung der plastischen Moduli  $3c/2$  und  $\sigma'$  mit ModuliNet. In diesem Zusammenhang besteht bezüglich der Anfangssteigung das Problem einer Unvollständigkeit der Daten. Dies wird bei Betrachtung von Abb. 5.18 ersichtlich. Die erste Information über den Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie aus den Belastungsdaten ist erst bei  $s = 1\%$  plastischer Dehnung verfügbar (vgl. z.B. Abb. 4.11).

### Eingabedefinition

Um diese Unvollständigkeit etwas zu dämpfen, kann die bereits mit StressNet ermittelte Fließspannung  $k_0$  als Eingabeinformation geliefert werden, womit für  $\sigma'$  die Information vervollständigt wird. Selbstverständlich wurde der Wert von  $k_0$  aus genau den selben Daten gewonnen, die ebenfalls für dieses Netz zur Verfügung stehen. Es ist allerdings von Vorteil, einen Wert explizit zur Verfügung zu stellen, anstatt diesen im Netz intern erneut ermitteln zu lassen. Dies entspricht genau der Situation zwischen ID1 und ID2, wie sie in Abb. 2.15 dargestellt ist.

Für die Einbringung der Information über die Fließspannung werden die zur Verfügung stehenden Drücke auf  $k_0$  bezogen, wodurch die Form der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie, bezogen auf die Fließspannung, resultiert. Die erweiterte Eingabedefinition für ModuliNet entspricht somit dem Satz

$$x_1 := h_t^* , \quad (5.51)$$

$$x_2 := S^* , \quad (5.52)$$

$$x_3 \dots x_5 := \Delta P^*(\delta_i^*) , \quad \delta_i^* := \frac{i}{4} , \quad i = 1 \dots 3 , \quad (5.53)$$

$$x_6 \dots x_8 := \Delta h^*(P_i^*) , \quad P_i^* := \frac{i}{4} , \quad i = 1 \dots 3 , \quad (5.54)$$

$$x_9 \dots x_{12} := \frac{P(h^* = 0.02 \cdot 2^{i-4})}{P(h^* = 0.06)} , \quad i = 1 \dots 4 , \quad (5.55)$$

$$x_{13} \dots x_{17} := \frac{\tilde{P}_m(h^* = 0.04 \cdot 2^{j-5})}{k_0} , \quad i = 1 \dots 5 . \quad (5.56)$$

Abbildung 5.22 zeigt die GSL-Transformationsfunktionen der zusätzlichen Eingabedaten. In diesem Fall zeigen die Kurven für die kleinsten Eindrucktiefen eine teilweise Übereinstimmung mit dem TABOR-Wert, da diese der Fließspannung am nächsten sind. Allerdings ist anzumerken, daß selbst diese Kurven den TABOR-Wert bis zu einem Faktor vier überschreiten. Dies ist abhängig davon, wieviel Verfestigung bereits bei der kleinsten betrachteten Eindrucktiefe aufgebaut wurde, was wiederum mit  $\sigma'$  korreliert.

### Ausgabedefinition

Aufgrund der Unvollständigkeit der Daten bezüglich der Steigungsgrößen lassen sich auch keine robusten Korrelationen finden. Daher werden die gesuchten Parameter formal mit dem mittleren Druck entdimensioniert. Es ergeben sich zwei Ausgabedefinitionen der

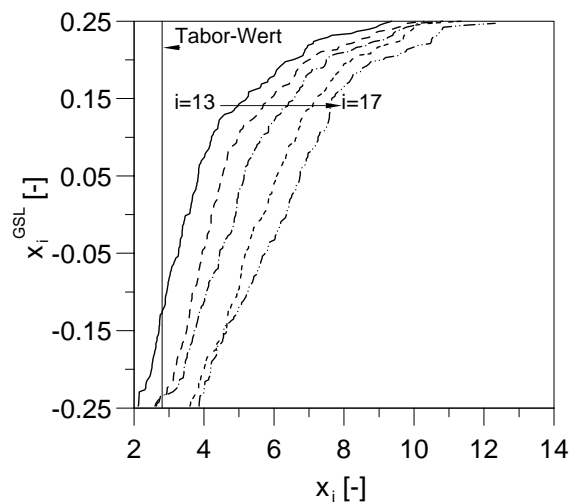


Abbildung 5.22: GSL-Transformationsfunktionen der zusätzlichen Eingabedaten.

Form

$$y_1 := \frac{\sigma'}{\tilde{P}_m(h^* = 0.06)}, \quad (5.57)$$

$$y_2 := \frac{3c/2}{\tilde{P}_m(h^* = 0.06)}. \quad (5.58)$$

### Training und Verifikation

Das Training dauerte 6000 Epochen und führte zu MSE-Werten von 0.00572 für die Trainingsmuster sowie 0.00910 für die Verifikationsmuster. Der nicht konventionelle Aufbau von ModuliNet ist in Abb. 5.23 dargestellt und besteht aus zwei Subnetzen für die getrennte Ermittlung von  $\sigma'$  bzw.  $3c/2$ .

Um die mangelhafte Information bezüglich der Ausgabegröße  $y_2$  etwas zu verbessern hat es sich durch vergleichende Trainingsläufe als hilfreich erwiesen, den im Netz ermittelten Wert von  $y_1$  zurückzuführen und den Neuronen für  $y_2$  einzuspeisen. Diese Entlastung führt zu einer drastischen Reduzierung der Beträge der synaptischen Gewichte, womit eine bessere Generalisierungsfähigkeit erzielt wird.

Die Genauigkeit von ModuliNet ist in Abb. 5.24 dargestellt. Im Vergleich zu StressNet ist der Fehler etwas mehr als verdoppelt. Der ebenso fast doppelt so hohe MSE-Wert der Verifikationsmuster bezüglich dem der Trainingsmuster unterstreicht die Anmerkungen bezüglich der Unvollständigkeit des Problems. Theoretisch könnte die Vollständigkeit ohne weiteres durch die Verwendung der Daten bei kleinsten Lasten sowie einer höheren Auflösung der Hysteresengeometrie hergestellt werden. In der Praxis würde dies jedoch

zu genau dem gegenteiligen Effekt führen, da die Empfindlichkeit gegenüber Meßrauschen und Rauigkeiten extrem erhöht würde.

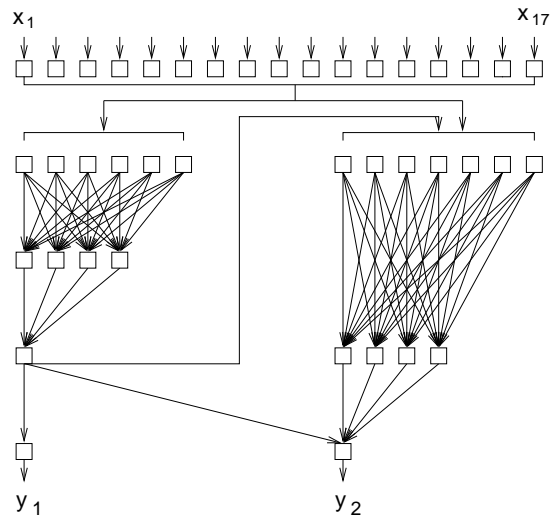


Abbildung 5.23: Anordnung der Neuronen und der synaptischen Verbindungen in ModuliNet; der einfacher zu trainierende Ausgabewert  $y_1$  wird benutzt, um die Eingabedaten für  $y_2$  zu unterstützen.

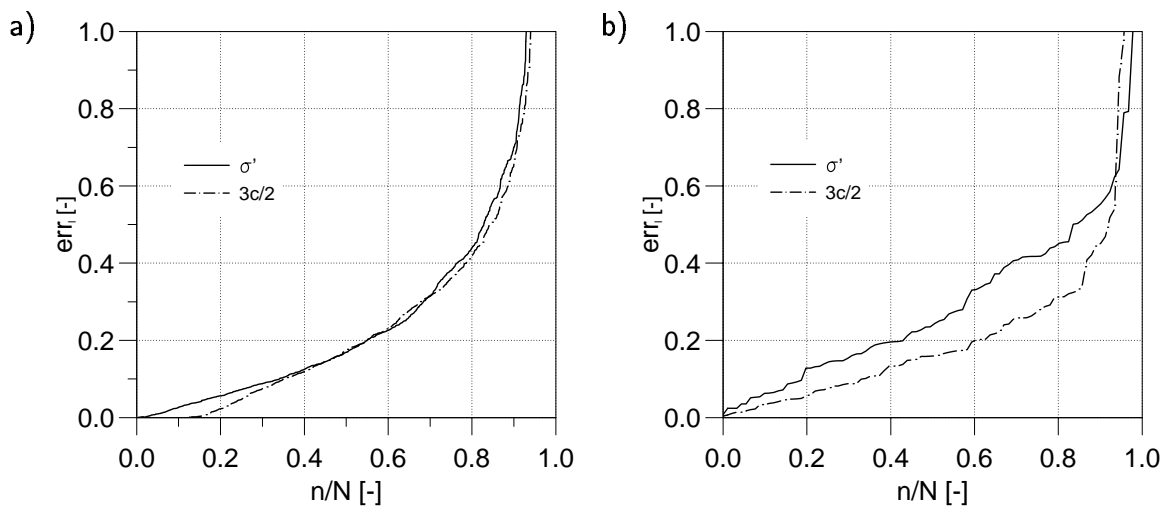


Abbildung 5.24: Verteilung des relativen Fehlers  $err_i$  für ModuliNet: a) Trainingsmuster ( $N = 1091$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 91$ ).

### 5.3.7 Verifikation der Identifikationskette

Das Zusammenspiel der Neuronalen Netze AeNet, StressNet und ModuliNet ist in Abb. 5.25 skizziert. Mit den Definitionen von  $\Delta\Sigma$  und  $\sigma'$  in Tabelle 4.1 (S. 103) können alle Materialparameter anhand der Ausgabedaten bestimmt werden. Werden die so ermittelten Materialparameter in (4.69) sowie (4.70) eingesetzt, können die Verläufe der kinematischen Verfestigungen sowie der Gesamtspannung für einachsigen Zug in Abhängigkeit von der plastischen Dehnung  $s$  berechnet werden. Zusätzlich erhält man einen Fehler  $E_\sigma$  für jeden Parametersatz unter Verwendung von (5.36).

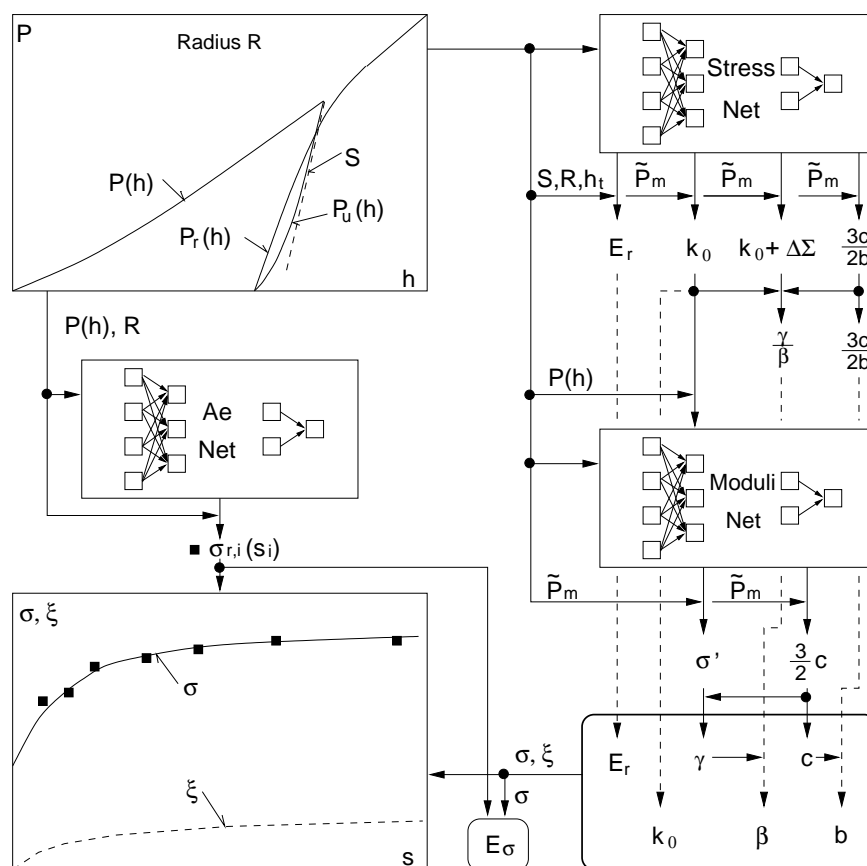


Abbildung 5.25: Zusammenspiel der Neuronalen Netze für die Identifikation der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie sowie der Materialparameter im Programm IDENTIFY.

Diese Operationen wurden in Form eines Programms mit dem Namen IDENTIFY realisiert. Für die Analyse einer Eindrucktiefe-Last-Trajektorie mit fünf Hysteresen (d.h. für jede Hysterese wird ein Parametersatz identifiziert) benötigt IDENTIFY 2.5 CPU-Sekunden auf einer IBM RS/6000 SP Workstation. Diese Rechenzeit beinhaltet

außerdem die Extraktion der relevanten Daten aus der Eindringtiefe-Last-Trajektorie sowie die GSL-Transformationen für die Datenaufbereitung.

Es wird darauf hingewiesen, daß die Identifikationsqualität in nahezu jedem betrachteten Beispiel zufriedenstellend war. Dies wird durch die Auftragung der  $E_\sigma$ -Werte über der Eindringtiefe für alle Verifikationsmuster in Abb. 5.26 verdeutlicht. Zunächst ist festzustellen, daß die Genauigkeit von der Eindringtiefe unabhängig ist. Für die weitere Beurteilung zeigen die Abbildungen 5.27a und b jeweils ein Beispiel der ausgewerteten Verifikationsmuster mit guter bzw. schlechter Identifikationsqualität. Die zugehörigen Parametersätze sind  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 187$  MPa,  $c = 10966$  MPa,  $b = 87.8$ ,  $\gamma = 15702$  MPa,  $\beta = 128$  für das Beispiel in Abb. 5.27a sowie  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 144$  MPa,  $c = 7958$  MPa,  $b = 650$ ,  $\gamma = 4167$  MPa,  $\beta = 15.1$  für das Beispiel in Abb. 5.27b. Entsprechend der Verläufe können solche Parametersätze mit einem Fehler  $E_\sigma < 15\%$  als akzeptabel eingestuft werden.

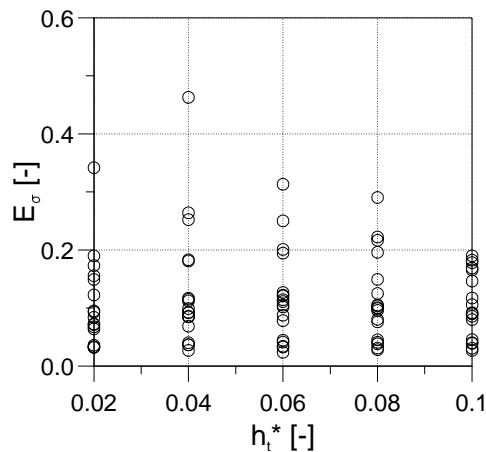


Abbildung 5.26: Fehler der  $\sigma(s)$ -Punkte für alle Verifikationsmuster ( $h_t^* = h_t/R$ ).

Zur Kontrolle des Identifikationsvermögens für verschiedene Werte des Elastizitätsmoduls wurden schließlich die Beispiele E aus Abb. 5.13b mit INDENTIFY ausgewertet. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Kennlinien sind in Abb. 5.28 dargestellt. Es ist zu erkennen, daß die Identifikation in jedem Fall sehr genau ist. Die ermittelten Werte des reduzierten Moduls (für  $\nu = 0.3$ ) bei allen fünf Eindringtiefen sind  $213 \leq E_r \leq 217$  GPa für  $E = 200$  GPa sowie  $105 \leq E_r \leq 108$  GPa für  $E = 100$  GPa.

### 5.3.8 Validierung für viskoplastisches Materialverhalten

Die Auswertung der Plastizitätsparameter sowie des reduzierten Moduls sollte invariant bezüglich moderater viskoser Effekte sein, die bei Experimenten mit unterschiedlichen

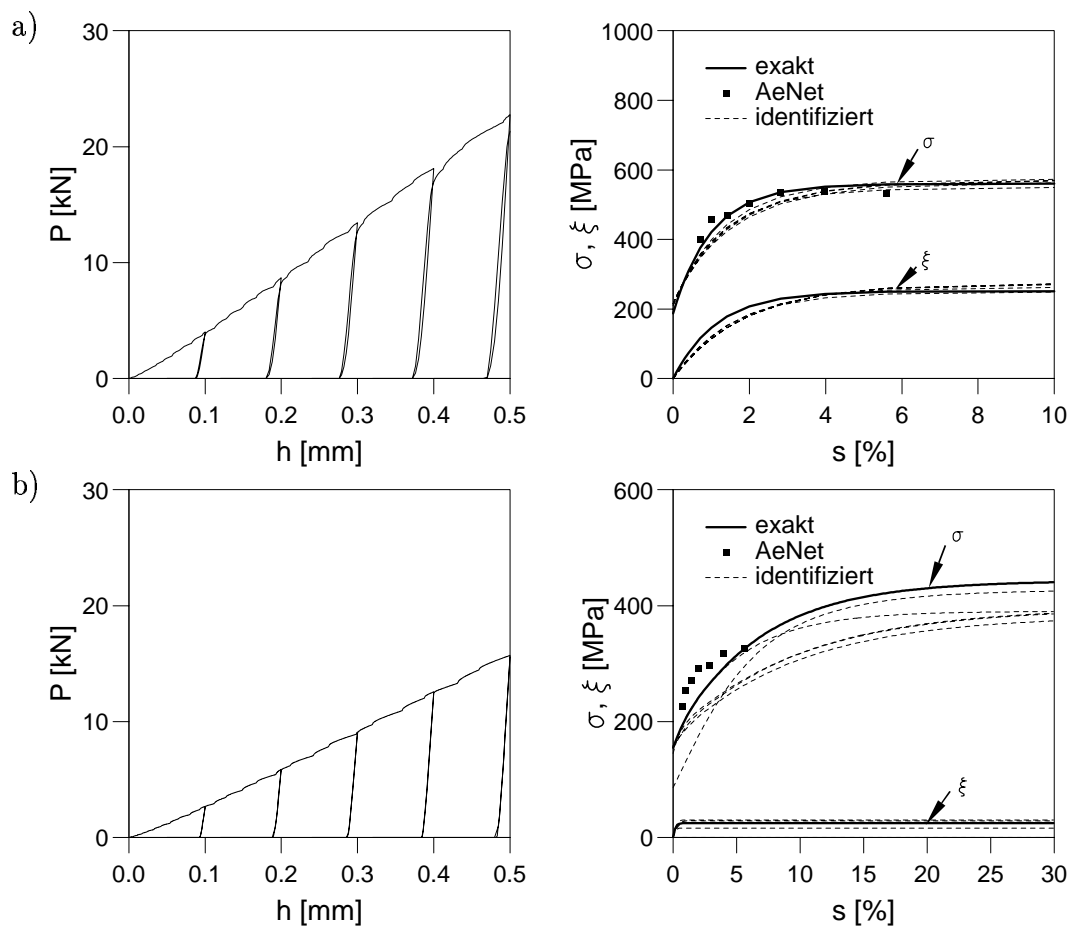


Abbildung 5.27: Ein Beispiel guter und schlechter Identifikation: a)  $8.6\% \leq E_\sigma \leq 11.5\%$ ; b)  $17.8\% \leq E_\sigma \leq 46.3\%$ .

Metallen beobachtet wurden. Die Invarianz der Belastungskurve sowie der Entlastungssteigung kann erreicht werden, indem vor der Entlastung eine Relaxation angemessener Dauer eingefügt wird (vgl. Abb. 5.14 und 5.16) oder indem die Be- und Entlastung genügend langsam durchgeführt wird. Die Invarianz der Hysteresengeometrie wurde durch Weglassen der Öffnung  $\Delta P(\delta^* = 1)$  bei der Netzdefinition erreicht.

Die Auswertung des Beispiels in den Abbildungen 5.14 und 5.16 ist in Abb. 5.29 dargestellt. Die Verläufe zeigen bei Eliminierung des viskosen Lastanteils mit Relaxationen eine sehr gute Übereinstimmung mit der Identifikation des zugeordneten plastischen Materials ( $\eta = 0$ ). Wird hingegen die Belastungskurve inklusive des viskosen Lastanteils ohne Relaxationen ausgewertet, ergeben sich durchgehend erhöhte Spannungen.

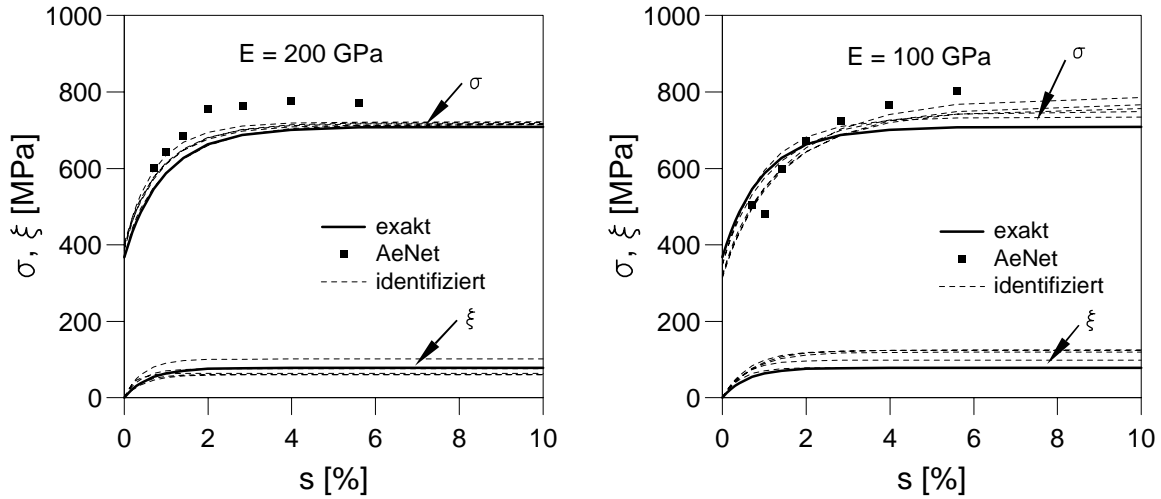


Abbildung 5.28: Beispiel für die Identifikation des harten Materials E aus Abb. 5.13b ( $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 368 \text{ MPa}$ ,  $c = 6531 \text{ MPa}$ ,  $b = 168$ ,  $\gamma = 23600 \text{ MPa}$ ,  $\beta = 90$ ).

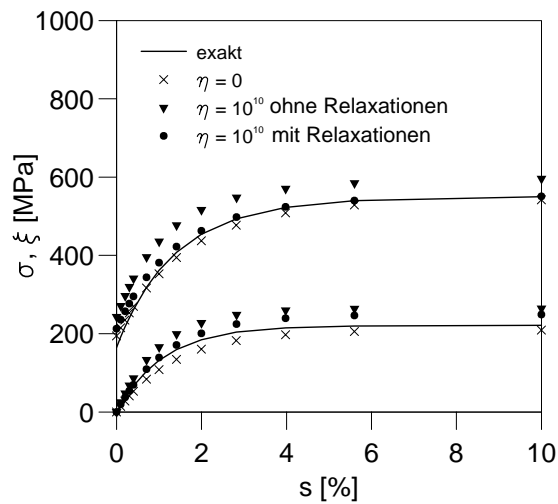


Abbildung 5.29: Vergleich der Auswertung eines viskoplastischen Materials mit und ohne Einfügen von Relaxationsphasen.



## 6 Ermittlung der Querkontraktionszahl aus Kugeleindrücken in homogene Materialien

Die Querkontraktionszahl ist z.B. dann von Interesse, wenn Schwingungsprobleme diskutiert werden (siehe z.B. [67, 94, 95]) oder die Festigkeit eines Verbundes abgeschätzt werden soll [24]. Zum letzteren zählt insbesondere auch die Bewertung der Haftfestigkeit einer dünnen Schicht auf einem Substrat. Bislang wurde es jedoch bei dünnen Schichten für sehr schwierig oder gar unmöglich erachtet, die Querkontraktionszahl explizit zu ermitteln [34].

Im Fall der Nanoindentation besteht die Problematik der Korrelation der Entlastungssteifigkeit  $S$  mit dem reduzierten Modul  $E_r$ , welche sich aus den analytischen Lösungen des Kontaktes axialsymmetrischer Prüfkörper mit dem halbbunendlichen elastischen Halbraum ergibt [33, 40, 73]. Aus diesem Grund wird bislang der Wert der Querkontraktionszahl in der Literatur als bekannt vorausgesetzt, um aus dem ermittelten reduzierten Modul den Elastizitätsmodul zu bestimmen (siehe z.B. [17, 25, 47, 48, 90, 108]).

Lediglich in der Arbeit von OLAF [88] wurde bislang der Einfluß der Querkontraktionszahl auf die Be- und Entlastungskurve für elastisch-plastisches Material diskutiert. Dies geschah allerdings mit dem Ziel zu zeigen, daß der Fehler infolge einer geringfügig falsch angenommenen Querkontraktionszahl auf den ermittelten Elastizitätsmodul im Bereich von wenigen Prozent liegt. Interpretiert man die Ergebnisse von OLAF jedoch in der Absicht, einen Effekt der Querkontraktionszahl zu finden, so ist festzustellen, daß diese sowohl die Belastungskurve als auch die Entlastungskurve sichtbar und damit auch meßbar beeinflusst. Diese grundsätzliche Überlegung gab den Anlaß, das Problem zu invertieren und die Querkontraktionszahl selbst zu identifizieren [53, 54].

### 6.1 Einleitung

Bei dem Kugeleindruckexperiment wird üblicherweise die Last  $P$  über der Eindringtiefe  $h$  aufgetragen (vergleiche Abb. 3.8a). Für das Folgende wird von einem eindringtiefe gesteuerten Experiment ausgegangen. Im Fall elastisch-plastischen Materialverhaltens ist die resultierende Last  $P$  ein Funktional der Lastgeschichte  $h(t)$ .

Wird die Lastgeschichte beliebig aber fest vorausgesetzt, so können verschiedene  $h$ - $P$ -Trajektorien als Ergebnis des Eindrucks in Materialien mit verschiedenen Materialparametern interpretiert werden. In anderen Worten können die  $h$ - $P$ -Trajektorien als Funktion der Geometrie sowie der Materialparameter betrachtet werden, welche in den konstitutiven Gleichungen enthalten sind. Eine solche Funktion kann punktweise als numerische Lösung ermittelt werden. Im allgemeinen Fall hat die gesuchte Funktion die Form

$$P = \hat{P}(E, \nu, \dots), \quad (6.1)$$

wobei  $E$  den Elastizitätsmodul und  $\nu$  die Querkontraktionszahl bezeichnen.

Ist  $E_r$  nach (5.1) gegeben, läßt sich (6.1) auch in eine Beziehung

$$P = \bar{P}(E_r, \nu, \dots) \quad (6.2)$$

umformen, wobei zu zeigen ist, daß für elastisch-plastische Deformationen eine explizite Abhängigkeit von  $\nu$  existiert. Ist dies der Fall, kann  $\nu$  aus (6.2) als Lösung des inversen Problems

$$\nu = \bar{\nu}(P, E_r, \dots) \quad (6.3)$$

bestimmt werden, vorausgesetzt,  $\bar{\nu}$  existiert. Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß die noch fehlenden Variablen, angedeutet durch Punkte in (6.2) und (6.3), die Parameter zur Beschreibung der Verfestigung sowie der Geometrie darstellen.

Im Sonderfall elastischer Deformation vereinfacht sich die Funktion  $\hat{P}$  zu der Proportionalität  $P \sim E/(1 - \nu^2)$ . Es kann allerdings nicht daraus geschlossen werden, daß dies auch für elastisch-plastische Deformationen gilt. Im folgenden soll die Funktion  $\bar{\nu}$  mit Hilfe eines Neuronalen Netzes bestimmt werden. Die Definition der Eingabe- und Ausgabegrößen basiert auf den Vorgehensweisen zur Einbringung von Vorwissen, wie in Abschnitt 2.3.5 beschrieben.

## 6.2 Theoretische Überlegungen

Die Lösung für den elastischen Kontakt nicht konformer Körper wurden bereits von HERTZ [40] hergeleitet. Für den Sonderfall zweier elastischer Körper mit kugelförmiger Geometrie im Kontaktbereich ergibt sich die Beziehung zwischen der Last  $P$  und der Annäherung  $\delta$  zweier vom Kontaktpunkt hinreichend entfernter Punkte (s. JOHNSON [64, S. 93])

$$P = \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^* \delta^3}, \quad (6.4)$$

wobei

$$\frac{1}{E_r^*} := \frac{1 - \nu^2}{E} + \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} \quad (6.5)$$

und

$$\frac{1}{R^*} := \frac{1}{R} - \frac{1}{R_s}. \quad (6.6)$$

In diesen Beziehungen bezeichnen  $E$  und  $\nu$  den Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl des zu untersuchenden Werkstoffs, während  $E_i$  und  $\nu_i$  die korrespondierenden Materialparameter des Prüfkörpers repräsentieren. Der Radius des Prüfkörpers wird mit  $R$  und der Radius der entlasteten Probenoberfläche mit  $R_s$  bezeichnet (s. Abb. 6.1). An dieser Stelle ist anzumerken, daß für die Herleitung von (6.4)  $R_s \gg R$  vorausgesetzt wurde.

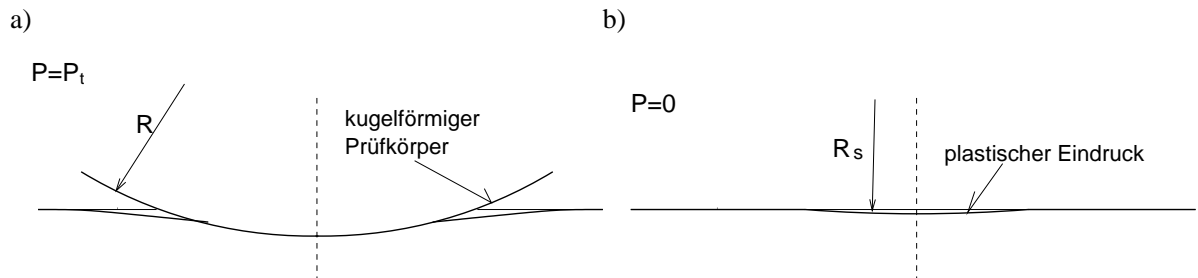


Abbildung 6.1: Skizze der Geometrie des Kugeleindrucks mit insgesamt kleiner plastischer Deformation ( $R_s \gg R$ ) a) maximale Belastung; b) nach vollständiger Entlastung.

Zur Beschreibung elastisch-plastischen Verformungsverhaltens wird ein Materialmodell der Plastizität mit einer Fließspannung  $k_0$  und linearer isotroper Verfestigung mit dem Tangentenmodul  $\gamma$  angenommen. Der Materialparameter  $\beta$  sowie die Materialparameter der kinematischen Verfestigung sind Null ( $\beta = c = b = 0$ ).

Das Einsetzen plastischen Fließens bei dem Kugeleindruck wird für  $\nu = 0.3$  von JOHNSON [64, S. 155] mit

$$P_y^* := P_y|_{\nu=0.3} = \frac{\pi^3 R^2}{6 E_r^{*2}} (1.6 k_0)^3 \quad (6.7)$$

angegeben, wobei von einer von Mises Fließfunktion ausgegangen wurde. Unter der Verwendung von (6.4) für die Fließtiefe  $\delta = \delta_y^* := \delta_y|_{\nu=0.3}$  ergibt sich der zugehörige Wert für die Fließlast  $P = P_y^*$ :

$$P_y^* = \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^* \delta_y^{*3}}. \quad (6.8)$$

Mit einer zu Beginn des Experiments ebenen Oberfläche gilt  $R_s = \infty$  und  $R^* = R$ . Durch Auflösen von (6.8) nach  $\delta_y^*$  und unter Verwendung von (6.7) sowie  $R^* = R$  folgt

$$\frac{\delta_y^*}{R} = \left( 0.8\pi \frac{k_0}{E_r^*} \right)^2 . \quad (6.9)$$

Im Zusammenhang mit dem Kugeleindruckexperiment ist die Annäherung  $\delta$  für einen elastisch deformierbaren Prüfkörper gegeben mit

$$\delta = h - h_r , \quad (6.10)$$

wobei  $h$  die Eindringtiefe und  $h_r$  die verbleibende Eindringtiefe nach Entlastung bezeichnen. Finden während der Belastung plastische Deformationen statt, ergibt sich nach der Entlastung  $h_r > 0$ . Mit (6.9) und (6.10) sowie  $h_r \equiv 0$ , tritt erstmalig plastisches Fließen bei einer Fließtiefe

$$\frac{h_y^*}{R} = \left( 0.8\pi \frac{k_0}{E_r^*} \right)^2 , \quad h_y^* := h_y|_{\nu=0.3} \quad (6.11)$$

auf. Nach Einsetzen von (6.10) in (6.4) folgt

$$P = \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^*} (h - h_r)^3 \quad (6.12)$$

bzw.

$$P^{2/3} = \left( \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^*} \right)^{2/3} h - \left( \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^*} \right)^{2/3} h_r . \quad (6.13)$$

Gleichung (6.13) kann in eine allgemeinere Form

$$P^{2/3} = Mh - B \quad (6.14)$$

überführt werden, wobei

$$M = \begin{cases} m & \text{für elastische Belastung } (\forall h(t) : 0 \leq h \leq h_y) \\ m^* & \text{nach plastischer Belastung} \end{cases} , \quad (6.15)$$

$$B = \begin{cases} 0 & \text{für elastische Belastung } (\forall h(t) : 0 \leq h \leq h_y) \\ b^* & \text{nach plastischer Belastung} \end{cases} , \quad (6.16)$$

mit

$$m := \left( \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R} \right)^{2/3} , \quad (6.17)$$

$$m^* := \left( \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R^*} \right)^{2/3}, \quad (6.18)$$

$$b^* := m^* h_r. \quad (6.19)$$

Im weiteren soll eine Lastgeschichte mit einer Belastung bis zu dem Punkt  $P_t(h_t)$  mit  $h_t > h_y$  und einer anschließenden Entlastung bis  $P = 0$  betrachtet werden. Die Auftragung von  $P^{2/3}$  über  $h$  enthält zwei lineare Bereiche (s. Abb. 6.2). Der erste lineare Abschnitt resultiert aus der elastischen Belastung für  $0 \leq h \leq h_y$ , der zweite entsteht durch die elastische Entlastung mit  $h_y \geq h \geq h_r$ . Entsprechend kann der Wert von  $m$  aus der elastischen Belastung bestimmt werden, während die Werte von  $m^*$  und  $b^*$  aus der Anpassung an die Entlastungsgerade gewonnen werden.

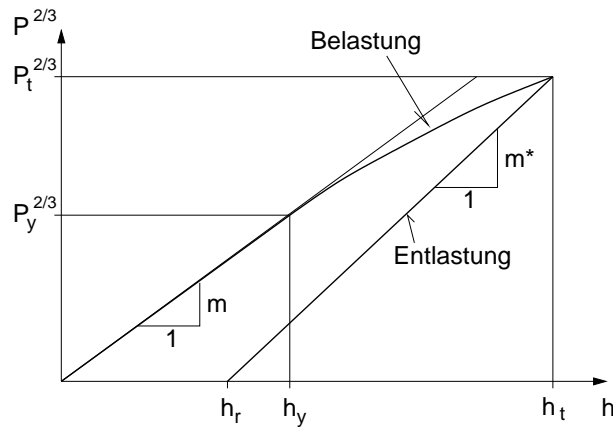


Abbildung 6.2: Skizze der Eindrucktiefe-Last-Trajektorie für den Kugeleindruck in elastisch-plastisches Material.

Die Variablen

$$(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T) \quad (6.20)$$

sind durch die Geometrie, das Material sowie die Lastgeschichte definiert und entsprechen den Eingangsgrößen. Die Ausgangsgrößen

$$(m, h_y, P_t, m^*, b^*) \quad (6.21)$$

werden als Funktionen der Eingangsgrößen (6.20) in der Form

$$m = \hat{m}(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T), \quad (6.22)$$

$$h_y = \hat{h}_y(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T), \quad (6.23)$$

$$P_t = \hat{P}_t(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T), \quad (6.24)$$

$$m^* = \hat{m}^*(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T), \quad (6.25)$$

$$b^* = \hat{b}^*(R, h_t, \nu, E_r^*, k_0, E_T) \quad (6.26)$$

vorausgesetzt. Auch hier wird zusätzlich zum reduzierten Modul eine explizite Abhängigkeit von der Querkontraktionszahl angenommen. Die Größen (6.21) können als Lösung des direkten Problems mit Hilfe der Finite Elemente Methode ermittelt werden (s. Abschnitt 6.3).

Gleichung (6.22) ist bereits durch die Definition (6.17) gegeben, so daß für bekanntes  $m$  der reduzierte Modul  $E_r^*$  ebenfalls bekannt ist. Für  $\nu = 0.3$ , entspricht (6.11) der analytischen Lösung von (6.23). Die Funktion  $\hat{b}^*$  kann als Linearkombination von  $\hat{P}_t$  und  $\hat{m}^*$  mit Hilfe von (6.14)–(6.16), (6.18), (6.19) angegeben werden, vorausgesetzt, der Punkt  $(h_t, P_t^{2/3})$  ist bekannt. Die verbleibenden Gleichungen, welche bereits eine explizite Abhängigkeit von  $\nu$  andeuten, können in dimensionsloser Form geschrieben werden. Die Dimensionsanalyse in Tabelle 6.1 ergibt einen Rang  $r = 2$  für die verbleibenden Größen.

	$R$	$h_t$	$\nu$	$E_r^*$	$k_0$	$E_T$	$m$	$h_y$	$P_t$	$m^*$
[N]	0	0	0	1	1	1	2/3	0	1	2/3
[m]	1	1	0	-2	-2	-2	-1	1	0	-1

Tabelle 6.1: Dimensionsanalyse des elastisch-plastischen Kugeleindrucks mit Be- und Entlastung.

Jede der Gleichungen (6.23)–(6.25) enthält  $n = 7$  Größen. Somit können schließlich (6.23)–(6.25) in dimensionsloser Form geschrieben werden, wobei jede der Gleichungen  $m = n - r = 5$  dimensionslose Kenngrößen enthält, z.B. der Form

$$\Pi_1 := \frac{h_t}{h_y} = \hat{\Pi}_1 \left( \frac{h_t}{R}, \nu, \frac{k_0}{E_r^*}, \frac{E_T}{E_r^*} \right), \quad (6.27)$$

$$\Pi_2 := \frac{P_t}{\sqrt{m^3 h_t^3}} = \hat{\Pi}_2 \left( \frac{h_t}{R}, \nu, \frac{k_0}{E_r^*}, \frac{E_T}{E_r^*} \right), \quad (6.28)$$

$$\Pi_3 := \frac{m^*}{m} = \hat{\Pi}_3 \left( \frac{h_t}{R}, \nu, \frac{k_0}{E_r^*}, \frac{E_T}{E_r^*} \right). \quad (6.29)$$

In (6.27) bezeichnet  $\Pi_1$  diejenige Eindrucktiefe, an der erstmalig plastisches Fließen auftritt. Für  $\nu = 0.3$  ergibt sich mit (6.11)

$$\Pi_1^* := \hat{\Pi}_1 \left( \frac{h_t}{R}, 0.3, \frac{k_0}{E_r^*}, \frac{E_T}{E_r^*} \right) \quad (6.30)$$

$$= \frac{h_t R}{R h_y^*} = \frac{h_t}{R} \left( 0.8\pi \frac{k_0}{E_r^*} \right)^{-2} \quad (6.31)$$

oder

$$\Pi_1^* = \hat{\Pi}_1^* \left( \frac{h_t}{R}, \frac{k_0}{E_r^*} \right). \quad (6.32)$$

Nun nehmen wir an, daß  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  in (6.28), (6.29) alleine von  $h_t/R$  und  $k_0/E_r^*$  über die Funktion  $\hat{\Pi}_1^*(h_t/R, k_0/E_r^*)$  abhängen, so daß

$$\Pi_2 = \tilde{\Pi}_2 \left( \Pi_1^*, \nu, \frac{E_T}{E_r^*} \right), \quad (6.33)$$

$$\Pi_3 = \tilde{\Pi}_3 \left( \Pi_1^*, \nu, \frac{E_T}{E_r^*} \right). \quad (6.34)$$

Eine Motivation für diese Annahme, basierend auf Finite Elemente Lösungen, wird in Abschnitt 6.3 gegeben.

Für eine Interpretation der dimensionslosen Größen  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  wird eine Maximallast  $P_t^{(e)}$  für eine fiktive elastische Belastung bis zu  $h = h_t$  angenommen. Entsprechend (6.14)–(6.17) folgt

$$P_t^{(e)} := \frac{4}{3} E_r^* \sqrt{R h_t^3} = \sqrt{m^3 h_t^3}. \quad (6.35)$$

Auf diese Weise kann  $\Pi_2$  als das Verhältnis der zwei Lasten

$$\Pi_2 = \frac{P_t}{P_t^{(e)}} \quad (6.36)$$

interpretiert werden, welches ein Maß für die plastische Deformation darstellt.

Weiterhin kann unter Verwendung von (6.18), (6.17) und (6.6) gezeigt werden, daß das Verhältnis  $m^*/m$  und deshalb auch  $\Pi_3$  in Abhängigkeit von  $R$  und  $R_s$  mit

$$\Pi_3 = \frac{m^*}{m} = \left( 1 - \frac{R}{R_s} \right)^{-1/3} \quad (6.37)$$

ausgedrückt werden kann, und somit ein Maß für die Geometrie nach Entlastung darstellt.

### 6.3 Finite Elemente Simulationen

Das verwendete Finite Elemente Netz ist in Abb. 6.3 dargestellt. Es besteht aus acht-knotigen axialsymmetrischen Elementen, welche im Zusammenhang mit Kugeleindruck-Simulationen sehr geeignet sind (siehe [49]). Der Teil des Netzes, der für das Kontaktproblem zuständig ist, ist vergrößert im linken Teil des Bildes dargestellt. Dieser Bereich kann in seinen Abmessungen an die durch die Materialparameter vorgegebene maximale Kontaktfläche angepaßt werden.

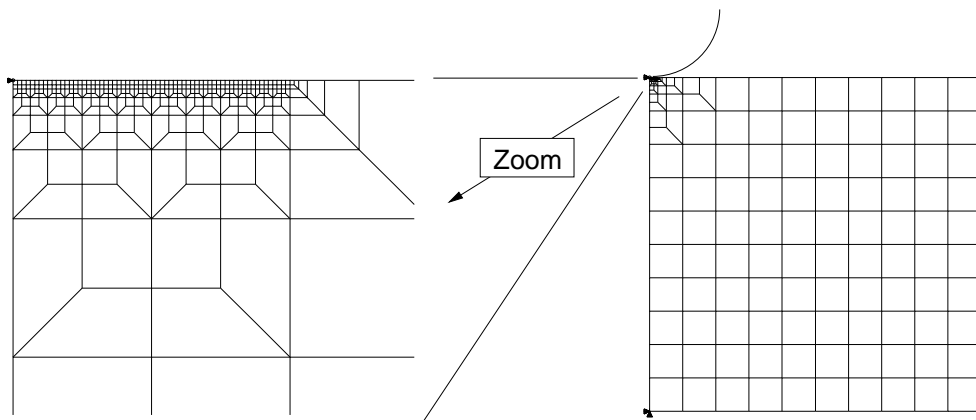


Abbildung 6.3: Finite Elemente Netz für Kugeleindrücke mit kleinen Lasten.

FE-Netz	Elementgröße	Kontaktradius	Eindrucktiefenbereich
M1	0.3906	$a < 25.0$	$6.25 \cdot 10^{-2} \leq h_t$
M2	0.0977	$a < 6.25$	$2.5 \cdot 10^{-3} \leq h_t < 6.25 \cdot 10^{-2}$
M3	0.0244	$a < 1.5625$	$h_t < 2.5 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 6.2: Charakteristische Daten der Finite Elemente Netze (alle Längen in [mm]).

Um die Anzahl von Finite Elemente Netzen gering zu halten, wurden drei Netze mit den in Tabelle 6.2 angegebenen Kontaktgebieten definiert. Die Größe der Oberflächenelemente mußte in Relation zur Auflösung des Preprozessors gewählt werden, so daß die Kantenlängen des Netzes 1000 mm mal 1000 mm betragen. Der Prüfkörperradius beträgt  $R = 200$  mm. Die gewonnenen Finite Elemente Lösungen können jedoch unter Berücksichtigung von Ähnlichkeitsgesetzen auf jeden beliebigen Prüfkörperradius umgerechnet werden.



Die konstitutiven Gleichungen zur Beschreibung des Materialverhaltens entsprechen einem Modell, das in *ABAQUS* standardmäßig implementiert ist (s. [41, Sect. 4.3.2-1]). Es wird ausschließlich lineare isotrope Verfestigung mit einer von Mises Fließfunktion angenommen. Die Fließspannung sei  $k_0$  und der Tangentenmodul sei  $E_T$ .

Für einen Parametersatz, der typisch für Stahl ist, wurde für jedes der drei Netze eine Simulation durchgeführt. Der Prüfkörper wurde das Achtfache der Fließtiefe in das Material gedrückt und dann auf die Hälfte der maximalen Eindringtiefe entlastet. Für das gewählte Materialverhalten besitzt das Netz M2 die optimale Diskretisierung im Kontaktgebiet. Die resultierenden Eindringtiefe-Last-Trajektorien sind in Abb. 6.4 zu sehen.

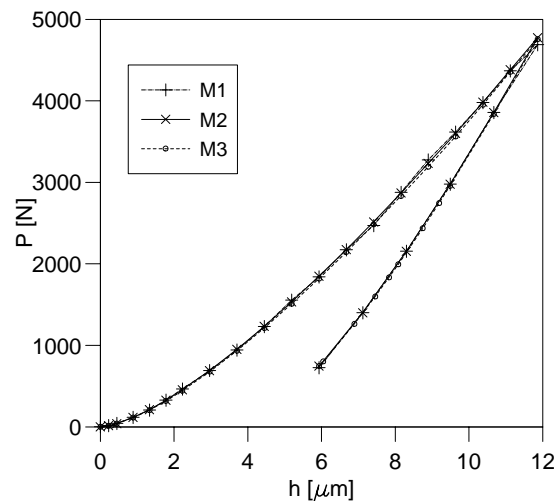


Abbildung 6.4: Eindringtiefe-Last-Trajektorien für die Finite Elemente Netze M1–M3:  $E = 200$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 250$  MPa,  $E_T = 10$  GPa ( $a < 2.2$  mm).

Die Belastungskurve für Netz M1 weicht erwartungsgemäß aufgrund der zu groben Diskretisierung von denen der beiden anderen Netze ab. Die Kurven zeigen auf der einen Seite die Netzunabhängigkeit der Lösung und auf der anderen Seite die hohe Genauigkeit, die sich mit der Verwendung des jeweils am besten geeigneten Netzes erreichen läßt.

Durch die Variablen  $h_t$ ,  $\nu$ ,  $k_0$  und  $E_T$  kann jedes Argument der Funktionen  $\hat{\Pi}_i$  in (6.27)–(6.29) unabhängig gewählt werden. Obwohl theoretisch nicht notwendig, wird der reduzierte Modul  $E_r^*$  bei jeder Simulation zufällig zwischen 50 GPa und 600 GPa gewählt. Damit wird demonstriert, daß die dimensionslosen Kenngrößen  $\Pi_i$ , und somit auch  $\nu$ , ausschließlich von den dimensionslosen Eingangsgrößen  $k_0/E_r^*$  und  $E_T/E_r^*$  abhängen. Es sollte an dieser Stelle angemerkt werden, daß (6.27)–(6.29) nur Funktionen von  $E_r^*$  sind

und somit der Prüfkörper ohne Beschränkung der Allgemeinheit starr modelliert werden kann.

Abbildung 6.5 zeigt drei Finite Elemente Simulationen, wobei lediglich  $\nu$  variiert wurde ( $E_r^* = \text{konst}$ ). Die Werte von  $m$ ,  $h_y^*$  und  $P_y^*$ , die in dem Diagramm eingetragen sind, wurden mit Hilfe von (6.17), (6.11) und (6.7) berechnet. Die gute Übereinstimmung der numerischen Lösung mit diesen analytisch ermittelten Werten zeigt, daß das Finite Elemente Modell gut geeignet ist, um den elastisch-plastischen Halbraum zu approximieren.

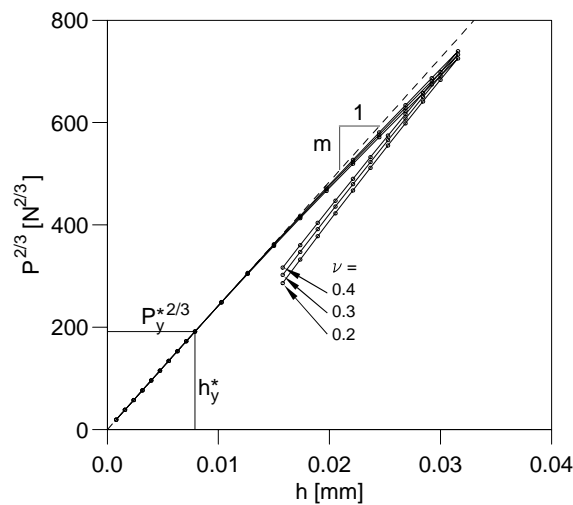


Abbildung 6.5: Beispiele von Finite Elemente Simulationen für  $E_r^* = 200 \text{ GPa}$ ,  $k_0 = 500 \text{ MPa}$ ,  $E_T = 20 \text{ GPa}$ ,  $h_t = 4h_y^*$ .

Nun werden die Werte von  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  für gegebene Werte (6.20) mit Hilfe der Finite Element Methode ermittelt. Diese Daten repräsentieren punktweise die Funktionen 6.28) und (6.29). Hierzu werden die Parameter  $\nu$ ,  $k_0/E_r^*$  und  $E_T/E_r^*$  zufällig in den gegebenen Intervallen gewählt, die in Tabelle 6.3 angegeben sind.

Parameter	Wertebereich
$h_t/h_y^*$	[-] 1.5 – 8
$\nu$	[-] 0.1 – 0.45
$k_0/E_r^*$	[-] $10^{-5}$ – $10^{-2}$
$E_T/E_r^*$	[-] $10^{-3}$ – $10^{-1}$

Tabelle 6.3: Wertebereiche der dimensionslosen Parameter zur Generierung der Muster.

In regelmäßigen Abständen  $\Pi_1 \in \{1.5, 2.0, \dots, 8.0\}$  werden Entlastungen durchgeführt, so daß aus jeder Simulation 14 Entlastungen verfügbar sind. Es wurden 100 Simulationen durchgeführt, aus denen anschließend die Trainings- und die Verifikationsmuster gebildet werden können.

Zunächst soll mit den verfügbaren Daten demonstriert werden, daß  $\nu$  die Eindrucktiefe-Last-Trajektorie zusätzlich zu  $E_r$  explizit beeinflusst. Dies wird die Annahme rechtfertigen, daß  $\nu$  in (6.20) explizit als Argument vorkommt. Zu diesem Zweck werden die numerisch ermittelten Werte von  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  über  $\nu$  und  $E_T/E_r^*$  für  $\Pi_1^* = konst$  aufgetragen. Die vernetzten Flächen in den Abbildungen 6.6 und 6.7, parametrisiert mit  $\Pi_1^*$ , zeigen, daß  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  von  $\nu$  abhängen. Im weiteren legen die erkennbaren Abhängigkeiten nahe,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  als Funktion von  $\Pi_1^*$  anzunehmen und motivieren somit die Beziehungen (6.33) und (6.33). Im folgenden soll nun auf der Basis von (6.33) und (6.34) ein Neuronales Netz entwickelt werden, welches die Lösung des inversen Problems,  $\nu$  gegeben als Funktion von  $\Pi_1^*$ ,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$ , darstellt.

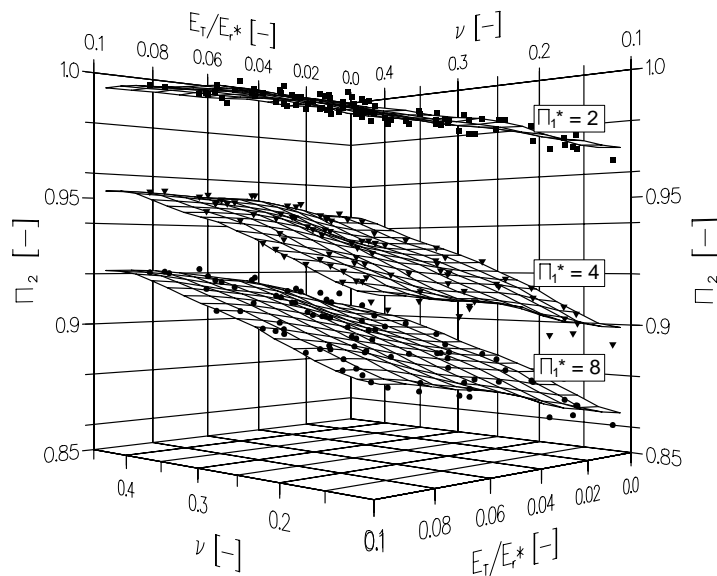


Abbildung 6.6: Der Effekt von  $\nu$  und  $E_T/E_r^*$  auf  $\Pi_2$  für  $\Pi_1^* = konst$ .

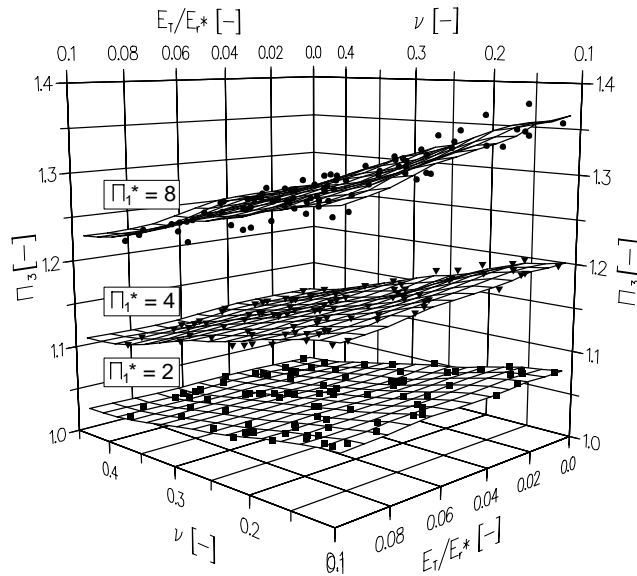


Abbildung 6.7: Der Effekt von  $\nu$  und  $E_T/E_r^*$  auf  $\Pi_3$  für  $\Pi_1^* = \text{konst.}$

## 6.4 Identifikation von $\nu$ für gegebenes $\Pi_1^*$

Wie aus den Diagrammen 6.6 und 6.7 zu entnehmen ist, hat das Tiefenverhältnis  $\Pi_1^*$  den stärksten Effekt auf die meßbaren Größen  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$ . Darauf folgt der Einfluß von  $\nu$  und schließlich die Abhängigkeit von der Verfestigung. Wie z.B. Abb. 6.5 erkennen läßt, ist es jedoch außerordentlich schwierig, die Tiefe  $h_y^*$  mit der notwendigen Genauigkeit zu ermitteln. Der Übergang vom elastischen ins elastisch-plastische in einem materiellen Punkt der Probe ist in den globalen Größen  $h$  und  $P$  unendlich schwach ausgebildet. Dies läßt eine direkte Bestimmung von  $\Pi_1^*$  nicht zu. Aus diesem Grund wird zunächst  $\Pi_1^*$  als bekannt vorausgesetzt. Dabei wird die Fragestellung behandelt, ob unter dieser Bedingung eine inverse Funktion existiert.

### 6.4.1 Eine Entlastung (Set 1)

Für die Bestimmung der Querkontraktionszahl  $\nu$  werden die Größen  $\Pi_1^*$ ,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  in (6.33) und (6.34) als gegeben angenommen. Zur Bildung der Trainingsmuster ist  $\Pi_1^*$  mit Hilfe der Materialparameter und der Eindringtiefe zu bestimmen, während  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  durch die Auswertung einer Belastungs- und einer Entlastungskurve ermittelt werden. Damit sind zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten ( $\nu$ ,  $E_T/E_r^*$ ) gegeben. Das Problem kann jedoch nur dann zufriedenstellend invertiert werden, wenn  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$

nicht korreliert sind. Durch das Auftragen von  $\Pi_2$  über  $\Pi_3$  für alle Finite Elemente Simulationen und Eindrucktiefen wird jedoch eine strenge Korrelation zwischen diesen beiden Größen sichtbar (siehe Abb. 6.8), welche den Punkt  $(1.0, 1.0)$  als Ursprung für  $\nu \rightarrow 0.5$  und  $\Pi_1^* \rightarrow 1$  besitzt (siehe Abbildungen 6.6, 6.7).

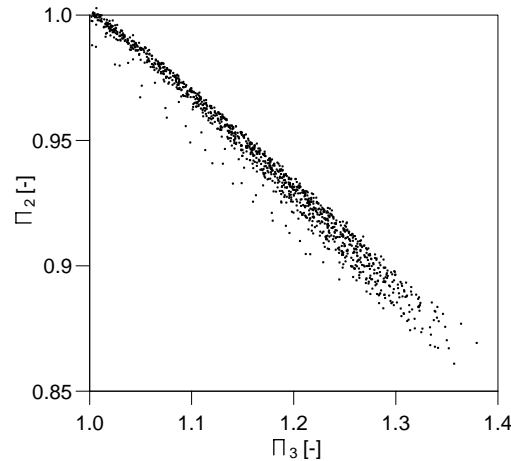


Abbildung 6.8: Korrelation zwischen  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$ .

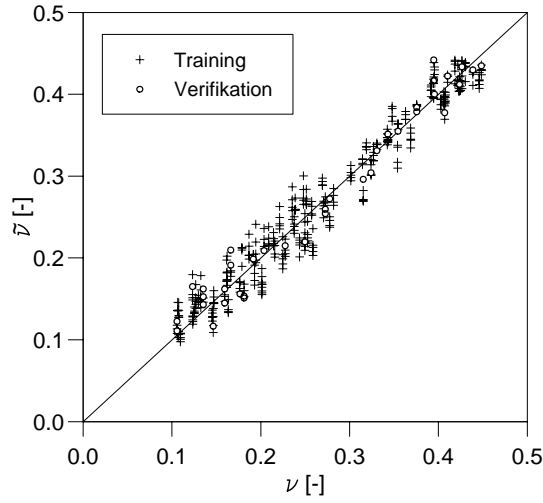
Aus dieser Korrelation entsteht eine Unvollständigkeit, die es erschwert, das Problem mit einer Entlastung mit der gewünschten Genauigkeit zu lösen. Dies kann einfach mit Hilfe eines Neuronalen Netzes gezeigt werden, welches als **Set 1** bezeichnet werden soll.

$$(x_1, x_2, x_3) := (\Pi_1^*, \Pi_2, \Pi_3), \quad (6.38)$$

$$y := \nu. \quad (6.39)$$

Das Neuronale Netz besteht aus drei Eingabeneuronen, zwei verdeckten Schichten mit drei bzw. zwei Neuronen sowie einem Ausgabeneuron. Aus den Entlastungen für  $\Pi_1^* \leq 4$  wurden 375 Trainings- und 38 Verifikationsmuster generiert, wobei die Verifikationsmuster zufällig ausgewählt wurden.

Nach 3000 Epochen erreichten die MSE-Werte  $9.6 \cdot 10^{-4}$  und  $9.0 \cdot 10^{-4}$  für die Trainings- bzw. Verifikationsmuster. Die identifizierten Werte  $\tilde{\nu}$  sind in Abb. 6.9 über den zugehörigen exakten Werten aufgetragen. Es zeigt sich, daß  $\nu$  nur mit einem vergleichsweise großen Fehler ermittelt werden kann. Das heißt, das Neuronale Netz ist nicht in der Lage, den Einfluß der Verfestigung zu berücksichtigen, da entsprechende Information fehlt.

Abbildung 6.9: Identifikation von  $\nu$  mit einer Entlastung.

### 6.4.2 Zwei Entlastungen (Set 2)

Die Identifikationsgenauigkeit kann durch Hinzufügen weiterer unabhängiger Information verbessert werden. Zu diesem Zweck wird zu jeder bei einer Tiefe  $h_{t,1}$  eine weitere Entlastung bei einer Tiefe  $h_{t,2}$  verwendet, wobei  $\Pi_1^*|_{h_{t,2}} := 2 \Pi_1^*|_{h_{t,1}}$ . Somit ergibt sich ein neues Neuronales Netz, als Set 2 bezeichnet, für welches die Eingabedefinition (bei jeweils festen Materialdaten)

$$(x_1, \dots, x_5) := (\Pi_1^*|_{h_{t,1}}, \Pi_2^*|_{h_{t,1}}, \Pi_3^*|_{h_{t,1}}, \Pi_2^*|_{h_{t,2}}, \Pi_3^*|_{h_{t,2}}). \quad (6.40)$$

verwendet wird. Das Neuronale Netz besteht aus fünf Eingabeneuronen, zwei verdeckten Schichten mit vier bzw. drei Neuronen sowie einem Ausgabeneuron.

Wiederum wurden 375 Trainings- und 38 Verifikationsmuster generiert, wobei  $1.5 \leq \Pi_1^*|_{h_{t,1}} \leq 4$ . Nach der gleichen Trainingsdauer von 3000 Epochen wurden deutlich kleinere MSE-Werte von  $9.0 \cdot 10^{-5}$  und  $1.2 \cdot 10^{-4}$  für die Trainings- bzw. Verifikationsmuster erreicht. Die Reidentifikation aller Finite Elemente Beispiele ist in Abb. 6.10 dargestellt. Die verbleibende geringfügige Streuung ist vermutlich der numerischen Ungenauigkeit der Finite Elemente Lösungen zuzuordnen.

Die Ergebnisse verdeutlichen, daß zwei Entlastungen ausreichend unabhängige Information für eine ausreichend genaue Invertierung liefern. Dies gilt allerdings nur unter der Voraussetzung, daß der Wert von  $\Pi_1^*|_{h_{t,1}}$  bekannt ist.

Da die Fließtiefe  $h_y^*$  zunächst nicht bekannt ist, kann jede Eindrucktiefe  $\tilde{h}_y^* < h_t \equiv h_{t,1}$  diejenige Eindrucktiefe sein, an der plastisches Fließen beginnt. Mit den zuvor trainierten Neuronalen Netzen kann somit eine Beziehung  $\tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*)$  ermittelt werden. Ein solcher

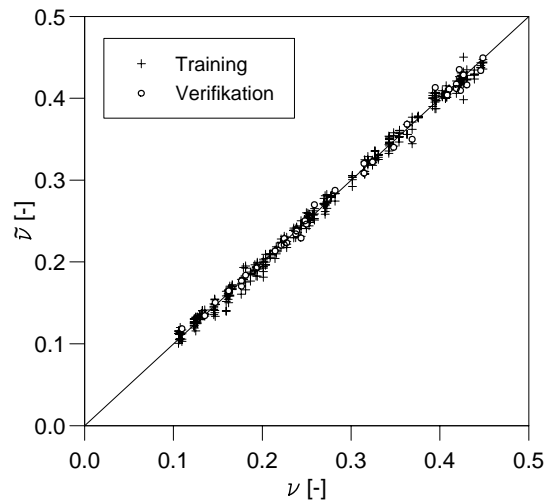


Abbildung 6.10: Identifikation von  $\nu$  anhand von zwei Entlastungen.

Verlauf ist in Abb. 6.11 für das Materialverhalten aus Abb. 6.4 exemplarisch dargestellt, wobei die horizontale Linie  $\nu = 0.3$  und vertikale Linie  $\tilde{h}_y^*/h_y^* = 1$  die exakten Werte  $\nu$  bzw.  $h_y^*$  kennzeichnen. Anhand von Abb. 6.11 ist ersichtlich, daß der Wert  $\nu = 0.3$  von Set 1 und Set 2 an der Stelle  $\tilde{h}_y^*/h_y^* = 1$  mit guter Genauigkeit ermittelt wird. Interessanterweise besitzen die Verläufe  $\tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*)$  für Set 1 und Set 2 nahezu die gleiche Steigung im Punkt  $\tilde{h}_y^* = h_y^*$ .

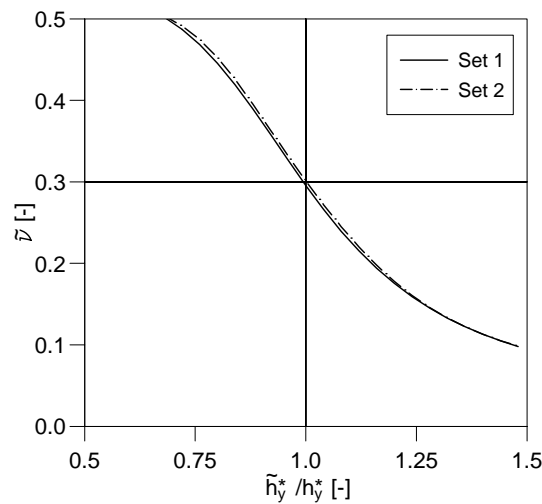


Abbildung 6.11: Abhängigkeit der identifizierten Querkontraktionszahl  $\tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*)$  von der angenommenen Fließtiefe.

## 6.5 Identifikation von $h_y^*$ und $\nu$

Die folgenden Abschnitte behandeln die Erweiterung der Methode zur Bestimmung von  $\nu$  für eine unbekannte Fließtiefe  $h_y^*$  und einen unbekanntem elastischen Anstieg  $m$ . Entsprechend der obigen Vorgehensweise wird von zwei begrenzenden Entlastungen bei den Eindruckstiefen  $h_{t,1} > h_y^*$  und  $h_{t,2} > h_{t,1}$  ausgegangen. Die Belastungskurve  $P_l(h)$  sei zwischen  $0 \leq h \leq h_{t,2}$  verfügbar. Die Entlastungsdaten  $m(h_t)$  seien in Form diskreter Punkte im Bereich  $h_{t,1} \leq h_t \leq h_{t,2}$  bestimmt.

Der Wert von  $m$  wird in Abschnitt 6.5.1 mit Hilfe eines Neuronalen Netzes ausschließlich anhand von Belastungsdaten  $P_l(h)$  ermittelt. Abschnitt 6.5.2 setzt sich aus drei Teilen zusammen. Zunächst werden zwei Neuronale Netze zur Verfügung gestellt, die die diskreten Finite Elemente Daten in kontinuierliche Verläufe überführen, so daß die Lasten und Entlastungssteigungen in jedem  $h$  bzw.  $h_t$  als bekannt angenommen werden können. Neuronale Netze bilden glatte Funktionen und somit in der Lage, Rauschen der Eingabedaten zu ignorieren. Auf diese Weise sind die durch diese Netze aufbereiteten Daten physikalisch sinnvoll und im Vergleich zu konventionellen Interpolationsverfahren nahezu frei von numerischer oder experimenteller Streuung.

Da sich der Übergang vom elastischen in den elastisch-plastischen Bereich in den globalen Größen nicht unmittelbar niederschlägt, ist die Ermittlung der Fließtiefe nichttrivial. Daher werden in Abschnitt 6.5.3 zwei Neuronale Netze trainiert. Das erste ist eine Modifikation von Set 2 und besitzt eine hohe Empfindlichkeit bezüglich  $\Pi_1^*$  im Punkt  $h = h_y^*$ . Besteht im weiteren die Möglichkeit ein zweites Neuronales Netz (Set 3) zu trainieren, das in der näheren Umgebung von  $h = h_y^*$  annähernd unempfindlich gegenüber einer Änderung von  $\Pi_1^*$  ist, so schneiden sich die Verläufe  $\tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*)$  beider Netze im Lösungspunkt  $(h_y^*, \nu)$ , in dem gleichzeitig der Identifikationsfehler zu Null wird. Auf diese Weise kann sowohl  $h_y^*$  als auch  $\nu$  mit hoher Genauigkeit ermittelt werden.

Abschnitt 6.5.5 befaßt sich mit der Validierung der Methode. Dabei werden zwei Fälle geprüft. Als Grundvoraussetzung der Funktionsfähigkeit der Methode wird verlangt, daß die Identifikation unabhängig von der Position der Entlastungen ist. Dies ist wichtig, da die Fließtiefe von vorneherein unbekannt ist und somit die Versuchssteuerung nicht daran ausgerichtet werden kann. Weiterhin ist von besonderem Interesse, inwieweit die bei realen Werkstoffen vorhandene nichtlineare Verfestigung die ermittelten Werte beeinflusst.



### 6.5.1 Bestimmung des elastischen Anstiegs $m$

Zur Bestimmung von  $m$  ohne Kenntnis von  $h_y^*$  wird ein Neuronales Netz verwendet, dessen Eingabedaten auf die Werte der Belastungskurve beschränkt sind. Die Eingabedefinition besteht somit aus einer Serie von dimensionslosen Lastverhältnissen

$$x_i := \left( \frac{\bar{P}_l(h_i)}{P_l(h_{t,1})} \right)^{2/3}, \quad h_i := \frac{i}{10} h_{t,1}, \quad i = 1 \dots 9, \quad (6.41)$$

wobei  $h_{t,1} > h_y^*$  die Eindrucktiefe bezeichnet, an der die erste Entlastung verfügbar ist. Da die Fließtiefe nicht als bekannt vorausgesetzt werden soll, wird die Eindrucktiefe  $h_{t,1}$  für die Generierung der Muster zufällig im Intervall  $h_{t,1} \in [1.5h_y^*, 4.0h_y^*]$  gewählt. Die Belastungsdaten  $\bar{P}_l(h_i)$  werden aus den numerischen Daten durch lineare Interpolation des diskreten  $P_l^{2/3}(h)$ -Verlaufs gewonnen. Der Grund für die Verwendung einfacher linear interpolierter Eingabedaten  $\bar{P}_l(h_i)$  resultiert aus der Tatsache, daß dieses Neuronale Netz unempfindlich gegenüber möglicher Streuung dieser Daten ist.

Der Ausgang ist durch die dimensionslose Größe

$$y := m \frac{h_{t,1}}{P_{t,1}^{2/3}} \quad (6.42)$$

definiert. Die Steigung  $P_{t,1}^{2/3}/h_{t,1}$  fungiert hierbei als Schätzwert von  $m$  zur Reduktion des Wertebereichs. Für alle Trainingsmuster liegt somit  $y$  im Intervall  $y \in [0.99617, 1.28209]$ . Die Werte  $y < 1$  sind theoretisch nicht erlaubt und spiegeln den numerischen Fehler der Finite Elemente Simulationen wieder. Für das Training wird der Wert von  $m$  nicht aus den Finite Elemente Lösungen ermittelt, sondern mit Hilfe der vorgegebenen Materialparameter und (6.17) exakt berechnet. Dadurch wird der Fit an die numerischen Daten als weitere Fehlerquelle vermieden.

Das Neuronale Netz besteht aus neun Eingabeneuronen, einem Ausgabeneuron sowie zwei verdeckten Schichten mit sechs bzw. drei Neuronen. Nach 2000 Epochen betragen die MSE-Werte  $9.7 \cdot 10^{-6}$  und  $6.5 \cdot 10^{-6}$  für die 407 Trainings- bzw. 43 Verifikationsmuster. Die kurze Trainingsdauer und die sehr kleinen MSE-Werte deuten eine exzellente Identifikation von  $m$  an. Dies wird durch die Darstellung der identifizierten Werte für alle Muster in Abb. 6.12 bestätigt.

### 6.5.2 Neuronale Netze für die Belastungsdaten und die Entlastungssteigungen

Bei der Bestimmung von  $\nu$  in Abschnitt 6.5.3 zeigen die Neuronalen Netze eine hohe Empfindlichkeit gegenüber den Eingabedaten  $P_l(h)$  und  $m^*(h_t)$ . Daher werden in die-

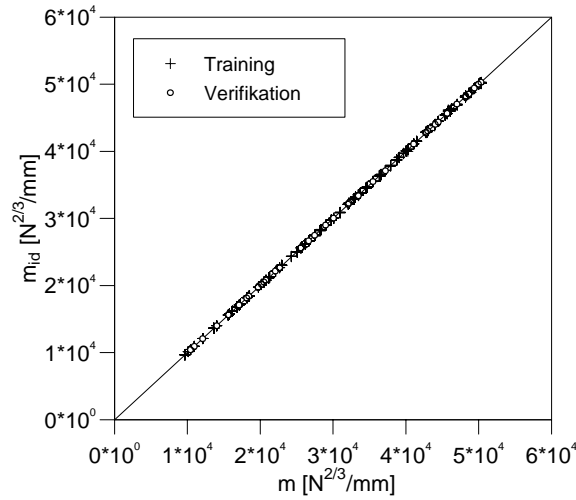


Abbildung 6.12: Identifikationsgenauigkeit des elastischen Anstiegs  $m$ .

sem Abschnitt zwei Neuronale Netze bereitgestellt, welche zur Aufbereitung der diskreten numerischen Daten dienen. Die numerischen Ergebnisse werden damit zuerst in kontinuierliche Verläufe  $\tilde{P}_l(h)$  und  $\tilde{m}^*(h_t)$  überführt, welche frei von Rauschen sind. Im mathematischen Sinn werden die diskreten Daten  $P_l(h)$  und  $m^*(h_t)$  durch die Neuronale Netz approximiert.

### Ermittlung der Belastungsdaten $\tilde{P}_l^{2/3}$

Um die Funktion  $\tilde{P}_l(h)$  zu bilden, wird die Eingabedefinition in Analogie zum vorangegangenen Abschnitt gewählt:

$$x_i := \left( \frac{\tilde{P}_l(h_i)}{P_l(h_t)} \right)^{2/3}, \quad h_i := \frac{i}{10} h_t, \quad i = 1 \dots 9, \quad (6.43)$$

$$x_{10} := \frac{h}{h_t}, \quad (6.44)$$

wobei die Eindringtiefe  $h \in [0, h_t]$  diejenige bezeichnet, an der der zugehörige Lastwert benötigt wird. Die maximale Eindringtiefe  $h_t$  wird variabel gehalten und darf Werte im Intervall  $h_t \in [1.5h_y^*, 8.0h_y^*]$  annehmen. Die Ausgabedefinition ist gegeben mit

$$y := \left( \frac{\tilde{P}_l(h)}{P_l(h_t)} \right)^{2/3} \frac{h_t}{h}. \quad (6.45)$$

Wiederum wird durch die Wahl von  $y$  der Wertebereich auf ein kleines Intervall  $y \in [0.984, 1.287]$  beschränkt. Das Neuronale Netz besteht aus zehn Eingabeneuronen, einem

Ausgabeneuron sowie zwei verdeckten Schichten mit acht bzw. vier Neuronen. Die MSE-Werte nach 2000 Epochen betragen  $1.0 \cdot 10^{-4}$  bzw.  $4.8 \cdot 10^{-5}$  für die 892 Trainings- bzw. 92 Verifikationsmuster.

### Ermittlung der Entlastungssteigung $\tilde{m}^*$

Die Ermittlung der Entlastungssteigung  $\tilde{m}^*(h_t)$  soll auf einen Bereich der Eindrucktiefe zwischen  $h_{t,1}$  und  $h_{t,2}$  beschränkt sein, wobei  $h_{t,1}$  und  $h_{t,2}$  die Stelle der ersten bzw. letzten verfügbaren Entlastung kennzeichnen. Geeigneterweise werden die Entlastungssteigungen entsprechend mit  $m_1^* := m^*(h_{t,1})$  und  $m_2^* := m^*(h_{t,2})$  bezeichnet. Die Eingabedaten werden in äquidistanten Abständen durch lineare Interpolation der numerischen Daten ermittelt, wobei

$$x_i := \frac{\tilde{m}^*(h_i) - m_1^*}{m_2^* - m_1^*}, \quad h_i := \frac{i}{10}(h_{t,2} - h_{t,1}) + h_{t,1}, \quad i = 1 \dots 9, \quad (6.46)$$

$$x_{10} := \frac{h_t - h_{t,1}}{h_{t,2} - h_{t,1}}. \quad (6.47)$$

Die Eindrucktiefe  $h_t \in [h_{t,1}, h_{t,2}]$  markiert den Punkt, an dem die Entlastungssteigung zu ermitteln ist. Die maximale Eindrucktiefe  $h_{t,2}$  wurde für die Bildung der Trainingsmuster im Intervall  $h_{t,2} \in [4h_y^*, 8h_y^*]$  zufällig gewählt, während für  $h_{t,1}$  immer die erste verfügbare Entlastung maßgebend ist. Der Ausgabewert ist definiert mit

$$y := \frac{\tilde{m}^*(h_t) - m_1^*}{m_2^* - m_1^*}. \quad (6.48)$$

Das Neuronale Netz besteht aus zehn Eingabeneuronen, einem Ausgabeneuron sowie zwei verdeckten Schichten mit acht bzw. vier Neuronen. Die MSE-Werte nach 2000 Epochen betragen  $3.8 \cdot 10^{-6}$  bzw.  $4.5 \cdot 10^{-6}$  für die 2805 Trainings- bzw. 258 Verifikationsmuster. In Abbildung 6.13 ist jeweils ein Beispiel der Fähigkeit zur Approximation der diskreten Meßdaten durch die Neuronalen Netze dargestellt. Die Minimierung des Rauschens durch die Filtereigenschaften des Neuronalen Netzes ist an denjenigen Stellen sichtbar, an denen die durchgezogenen Linie von den Markierungen abweicht.

### 6.5.3 Neuronale Netze für die Identifikation

Die Neuronalen Netze Set 1 und Set 2 basieren auf der Annahme, die Fließtiefe sei explizit bekannt. Wie bereits diskutiert, kann das Einsetzen plastischen Fließens alleine aus der Belastungskurve nicht in direkter Weise bestimmt werden. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, soll ein weiteres Neuronales Netz Set 3 trainiert werden, das im Gegensatz zu Set 1 und Set 2 den Wert von  $\Pi_1^*$  nicht explizit verwendet.

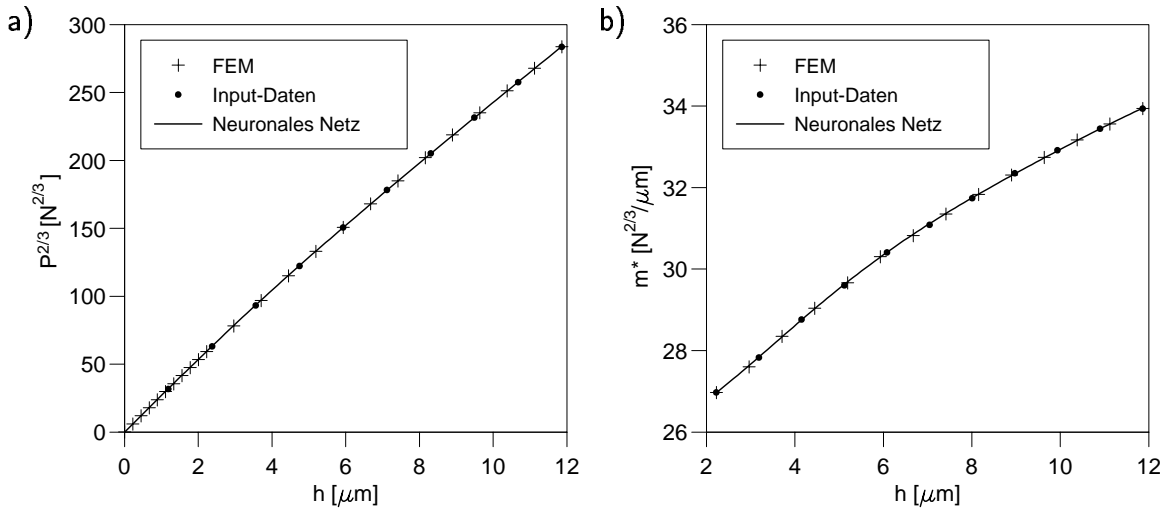


Abbildung 6.13: Beispiel der Abbildung diskreter Daten auf einen kontinuierlichen Verlauf: a) Belastungsdaten  $P_l(h)$  (FEM) und  $\tilde{P}_l(h)$  (NN); b) Entlastungsdaten  $m^*(h_t)$  (FEM) und  $\tilde{m}^*(h_t)$  (NN).

## Modifikation von Set 2

Die Muster in Abschnitt 6.4 waren auf die Positionen beschränkt, an denen Entlastungen in den Finite Elemente Simulationen vorlagen. Durch Anwendung der Neuronale Netze stehen nun die Daten in jedem beliebigen Punkt zwischen der ersten und der letzten Entlastung zur Verfügung. Aus diesem Grund ist es zweckmäßig, das Neuronale Netz Set 2 mit zufällig gewählter Eindringtiefe  $h_{t,1}$  erneut zu trainieren. Auf diese Weise wird eine maximale Generalisierung erreicht. Im Verlauf der Trainingsläufe stellte es sich heraus, daß das Neuronale Netz etwas robuster ist, wenn eine dritte Entlastung verwendet wird, die sich genau zwischen der ersten und der letzten Entlastung befindet. Die modifizierte Eingabedefinition lautet somit

$$x_1 := \Pi_1^*|_{h_{t,1}} \quad (6.49)$$

$$x_2 \dots x_4 := \Pi_2^*|_{h_t}, \quad h_t = 1.0h_{t,1}, 1.5h_{t,1}, 2.0h_{t,1}, \quad (6.50)$$

$$x_5 \dots x_7 := \Pi_3^*|_{h_t}, \quad h_t = 1.0h_{t,1}, 1.5h_{t,1}, 2.0h_{t,1}, \quad (6.51)$$

wobei  $h_{t,1}$  im Intervall  $h_{t,1} \in [1.5h_y^*, 4.0h_y^*]$  gewählt werden darf.

Das Neuronale Netz besteht aus sieben Eingabeneuronen, einem Ausgabeneuron sowie zwei verdeckten Schichten mit fünf bzw. drei Neuronen. Die MSE-Werte nach 3000 Epochen betragen  $1.0 \cdot 10^{-4}$  und  $6.8 \cdot 10^{-5}$  für die 449 Trainingsmuster und die 46 Verifikationsmuster. Für das modifizierte Netz konnte somit noch einmal die doppelte Genauigkeit gegenüber Abschnitt 6.4 erreicht werden. Diese Verbesserung demonstriert

die Wirksamkeit der Reduktion der Streuung sowie der höheren Redundanz durch die dritte Entlastung.

### Training des Neuronalen Netzes Set 3

Wir rufen uns nocheinmal in Erinnerung (siehe (6.33), (6.34)), daß  $\nu$  als Funktion von  $\Pi_1^*$ ,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  aufgefaßt werden kann, d.h.

$$\nu = g(\Pi_1^*, \Pi_2, \Pi_3) \quad (6.52)$$

oder

$$\nu - g(\Pi_1^*, \Pi_2, \Pi_3) =: f(\Pi_1^*, \Pi_2, \Pi_3, \nu) = 0 . \quad (6.53)$$

Unter Verwendung von (6.31)–(6.34), folgt aus der letzten Gleichung

$$f\left(\left.\frac{h_t}{h_y}\right|_{\nu=0.3}, \tilde{\Pi}_2\left(\left.\frac{h_t}{h_y}\right|_{\nu=0.3}, \nu, \frac{E_T}{E_r^*}\right), \tilde{\Pi}_3\left(\left.\frac{h_t}{h_y}\right|_{\nu=0.3}, \nu, \frac{E_T}{E_r^*}\right), \nu\right) = 0 \quad (6.54)$$

bzw.

$$f\left(\frac{h_t}{h_y^*}, \tilde{\Pi}_2\left(\frac{h_t}{h_y^*}, \nu, \frac{E_T}{E_r^*}\right), \tilde{\Pi}_3\left(\frac{h_t}{h_y^*}, \nu, \frac{E_T}{E_r^*}\right), \nu\right) = 0 . \quad (6.55)$$

Das Ziel ist nun, aus (6.55) eine Beziehung der Form

$$\nu = \tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*) \quad (6.56)$$

zu gewinnen, wobei  $\tilde{h}_y^*$  noch zu definieren ist. Zu diesem Zweck wird eine Serie von Eindrücktiefen

$$h_{t,j} := \frac{j+1}{2} h_{t,1}, \quad j = 1, \dots, n, \quad (6.57)$$

$$h_{t,1} := 2h_y^* \quad (6.58)$$

betrachtet. Theoretisch reicht es aus, (6.55) z.B. an den Stellen  $h_t = h_{t,1}$ ,  $h_t = h_{t,2} = \frac{3}{2}h_{t,1}$  und  $h_t = h_{t,3} = 2h_{t,1}$  auszuwerten, um die zwei Unbekannten  $E_T/E_r^*$  und  $h_y^*$  zu eliminieren und auf diese Weise den Wert von  $\nu$  für gegebenes  $h_{t,1}$  mit Hilfe eines Neuronalen Netzes zu bestimmen. Allerdings ist es zweckmäßig, (6.55) an  $n = 5$  Eindrücktiefen  $h_{t,1}$ ,  $h_{t,2} = \frac{3}{2}h_{t,1}$ ,  $\dots$ ,  $h_{t,5} = 3h_{t,1}$  auszuwerten, um die gewünschte Genauigkeit zu erreichen.

Natürlich kann diese Vorgehensweise für ein  $h_{t,1} \in [2h_y^* - \epsilon, 2h_y^* + \epsilon]$  angewendet werden, wobei  $\epsilon$  eine kleine positive reelle Zahl darstellt. So kann ein Neuronales Netz trainiert werden, welches im folgenden als Set 3 bezeichnet wird, und eine Funktion der Form

$$\nu = \bar{\nu}(h_{t,1}) . \quad (6.59)$$

darstellt. Auf der anderen Seite ist es auf der Basis von (6.55) ohne weiteres denkbar, eine Variation von  $h_{t,1}$  als Variation von  $h_y^*$  aufzufassen. Durch Ersetzen von  $\tilde{h}_y^* = h_{t,1}/2$  in (6.59) resultiert daher

$$\nu = \bar{\nu}(2\tilde{h}_y^*) =: \tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*) , \quad (6.60)$$

wobei  $\tilde{\nu}$  in (6.56) und (6.60) als dieselbe Funktion zu verstehen sind.

Für das Training von Set 3 sind bei gegebenen Materialdaten  $E_T/E_r^*$  die Werte von  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  an der Stelle  $h_t$  zu ermitteln. Diese Werte können mit Hilfe der Neuronalen Netze aus Abschnitt 6.5.2 sowie (6.28) und (6.29) aus den diskreten Finite Elemente Ergebnissen an jedem beliebigen  $h_t$  ausgewertet werden. Aus den so bestimmten Werten werden wiederum die Eingabedaten des Neuronalen Netzes Set 3 gebildet, wobei die Ausgabe durch den Wert von  $\nu$  vorgegeben ist. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß bei der Generierung der Muster die Anzahl der  $\Pi_2$ - und  $\Pi_3$ -Werte nicht notwendigerweise gleich sein muß. Die Eingabedefinition, die die besten Ergebnisse ergab, ist (für festes  $E_T/E_r^*$ ):

$$x_1 \dots x_3 := \Pi_2|_{h_t=h} , \quad h = 0.5\tilde{h}_y^*, 1.0\tilde{h}_y^*, 1.5\tilde{h}_y^*, \quad (6.61)$$

$$x_4 \dots x_8 := \Pi_2|_{h_t=h} , \quad h = 2\tilde{h}_y^*, 3\tilde{h}_y^*, \dots, 6\tilde{h}_y^*, \quad (6.62)$$

$$x_9 \dots x_{13} := \Pi_3|_{h_t=h} , \quad h = 2\tilde{h}_y^*, 3\tilde{h}_y^*, \dots, 6\tilde{h}_y^*. \quad (6.63)$$

Die 443 Trainings- und 48 Verifikationsmuster wurden aus je fünf zufällig gewählten  $\tilde{h}_y^*$  für das gleiche Materialverhalten gebildet. Nach 45000 Epochen wurde ein MSE-Wert von  $9.5 \cdot 10^{-5}$  für die Trainingsdaten bzw. von  $8.9 \cdot 10^{-5}$  für die Verifikationsdaten erreicht.

## 6.5.4 Ergebnisse

Die Charakteristik von Set 3 ist in Abb. 6.14 für das gleiche Beispiel wie in Abb. 6.11 dargestellt. Tatsächlich zeigt Set 3 eine Unempfindlichkeit gegenüber einer Variation von  $\tilde{h}_y^*$  im Bereich  $\tilde{h}_y^* \approx h_y^*$ , welche in Form eines ausgeprägten Plateaus sichtbar wird. Aus dem Schnittpunkt der Identifikationsverläufe  $\tilde{\nu}(\tilde{h}_y^*)$  der Neuronalen Netze Set 2 und Set 3 sind die Werte von  $\nu$  und  $h_y^*$  gleichzeitig und eindeutig zu ermitteln.

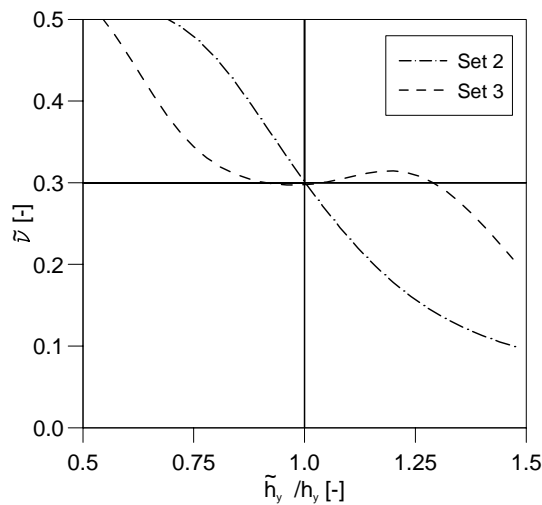


Abbildung 6.14: Simultane Identifikation der Querkontraktionszahl  $\nu$  und der Fließtiefe  $h_y^*$  als Schnittpunkt von Set 2 und Set 3.

Mit dieser Identifikationsmethode können die Werte von  $\nu$  und  $h_y^*$  für alle verfügbaren Finite Elemente Simulationen ermittelt werden. Die in den Abbildungen 6.15 dargestellten Ergebnisse unterscheiden nicht zwischen Trainings- und Verifikationsmustern, da die Verifikationsmuster für Set 2 und Set 3 aufgrund der zufälligen Auswahl nicht übereinstimmen. Die 94 Beispiele, die in Abb. 6.15a dargestellt sind, zeigen eine hohe Identifikationsgenauigkeit für die Querkontraktionszahl: 95% der Ergebnisse weisen einen relativen Fehler von weniger als 5% auf. Die erfolgreiche Identifikation wird durch die in Abb. 6.15b ersichtliche exzellente Genauigkeit für die identifizierten Fließtiefen bestätigt.

### 6.5.5 Validierung

Bis zu diesem Punkt wurde die Identifikationsmethode alleine für lineare Verfestigung entwickelt. Da jedoch die Eindrucktiefen in der Größenordnung der Fließtiefe liegen, ist es naheliegend, daß für ein Material mit nichtlinearer Verfestigung bei der Ermittlung von  $\nu$  nur die Steigung der Verfestigung zu Beginn von Bedeutung ist. Um dies zu demonstrieren, wurden Finite Elemente Simulationen mit dem Materialmodell (5.2)–(5.7) für nichtlineare isotrope Verfestigung durchgeführt ( $c = b = 0$ ). Es ist anzumerken, daß (5.5) den Sonderfall linearer Verfestigung für  $\beta = 0$  und  $\gamma = E_T$  enthält.

Abbildung 6.16a zeigt die Spannungs-Dehnungs-Kurven für  $E = 210$  GPa,  $\nu = 0.3$ ,  $k_0 = 250$  MPa und  $\gamma = 10$  GPa. Vier verschiedene Verfestigungen werden betrachtet, wobei die maximale Verfestigung sukzessive von unendlich (lineare Verfestigung) bis 5 MPa

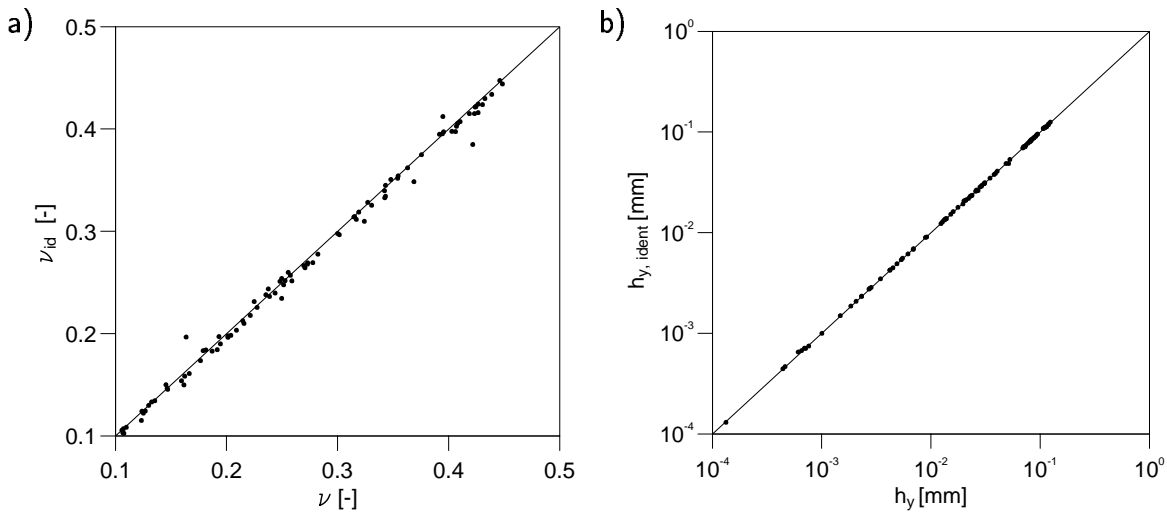


Abbildung 6.15: Identifikationsgenauigkeit: a) Querkontraktionszahl  $\nu$ ; b) Fließtiefe  $h_y^*$ .

reduziert wird. Die zugeordneten Eindrucktiefen-Last-Trajektorien sind in Abb. 6.16b dargestellt. Im betrachteten Eindrucktiefenbereich  $h_t/h_y^* \leq 8$  unterscheidet sich lediglich die Eindrucktiefen-Last-Trajektorie des Materials mit der geringsten Verfestigung von  $\gamma/\beta = 5$  MPa geringfügig von denen der anderen Materialien.

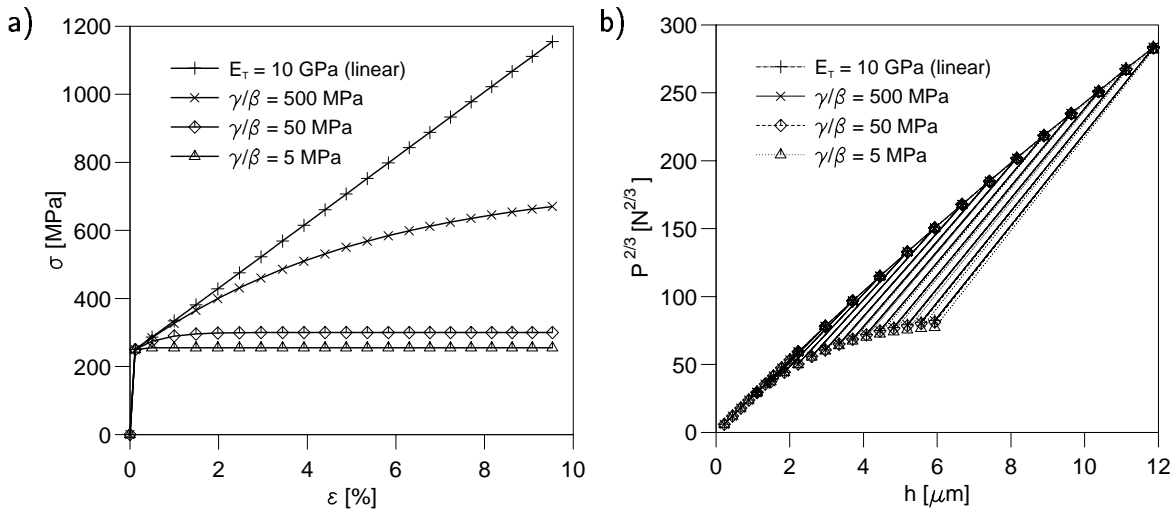


Abbildung 6.16: Validierungsbeispiele für nichtlineare Verfestigung: a) Spannungs-Dehnungs-Kurven; b) Eindrucktiefen-Last-Trajektorien.

Bei den dargestellten Trajektorien wurden an denselben Eindrucktiefenverhältnissen wie bei den Trainingsmustern Entlastungen eingefügt, d.h. bei  $h_t/h_y^* = 1.5, 2.0, \dots, 8.0$ . Diese Daten werden im weiteren als Typ 1 bezeichnet. Vier weitere Simulationen für die gleichen Materialparameter, aber mit bezüglich Typ 1 versetzten Entlastungsposi-



tionen  $h_t/h_y^* = 1.75, 2.25, \dots, 7.75$  werden als Typ 2 bezeichnet. Mit Hilfe dieser Beispiele vom Typ 2 kann die Invarianz der Neuronalen Netze bezüglich der Anordnung der Entlastungen geprüft werden.

Zunächst kann aus Tabelle 6.4 entnommen werden, daß der identifizierte Wert von  $m$  eine hohe Genauigkeit aufweist und keine Abhängigkeit bezüglich der Nichtlinearität der Verfestigung oder der Lage der Lastinkremente zeigt. Diese Robustheit ist notwendig, da für die folgende Identifikation  $m$  zur Entdimensionierung und damit einhergehend zur Eliminierung der elastischen Deformationseffekte verwendet wird.

Wie bereits in Abschnitt 6.5.2 hingewiesen wurde, sollen die Validierungsbeispiele auch im Hinblick auf die Interpolationsverfahren diskutiert werden. Hierfür wurde das Neuronale Netz Set 3 in drei unterschiedlichen Formen trainiert. Die drei Varianten unterscheiden sich dabei lediglich durch die Interpolationsmethode für die Aufbereitung der Eingabedaten.

Im ersten Fall (LL) wurden sowohl die Belastungs- als auch die Entlastungsdaten linear interpoliert. Im zweiten Fall (LN) wurden die Belastungsdaten linear interpoliert, während die Zwischenwerte der Entlastungsdaten mit dem Neuronalen Netz bestimmt wurden. Die Belastungs- und Entlastungsdaten der dritten Variante (NN) wurden alle samt mit den Neuronalen Netzen aufbereitet. Die drei Versionen von Set 3 wurden unter den gleichen Bedingungen trainiert, wobei das Training von Set 3(NN) ausführlich in Abschnitt 6.5.3 beschrieben ist.

Die identifizierten Werte von  $h_y^*$  und  $\nu$  für alle acht Validierungsmuster sind in Tabelle 6.4 angegeben. Für den Fall (NN) zeigen die Ergebnisse einen schwachen systematischen Effekt stärker werdender Nichtlinearität auf den Wert von  $\nu$ . Von der linearen Verfestigung bis zur annähernd idealen Plastizität steigt die identifizierte Querkontraktionszahl um etwa 0.5%. Bezüglich der Position der Entlastungen kann kein nennenswerter Einfluß festgestellt werden.

Wird die Belastungskurve linear interpoliert (LN), sind die Werte von  $\nu$  für die Typ 1-Daten leicht erhöht, während die Typ 2-Daten einen Abfall um mehr als 0.01 aufweisen. Es ist somit bereits ein merklicher Unterschied zwischen Typ 1 und Typ 2 festzustellen, der durch die unterschiedliche Lage der Lastinkremente hervorgerufen wird. Die Abhängigkeit bezüglich der Nichtlinearität ist jedoch unverändert.

Werden nun sowohl die Belastungs- als auch die Entlastungsdaten linear interpoliert (LL), zeigt sich ein starker Effekt der Nichtlinearität der Verfestigung. Mit zunehmender Nichtlinearität steigen die Werte von  $\nu$ .

			Set 3(LL)		Set 3(LN)		Set 3(NN)	
Typ	$\beta$ [-]	$m$ [N <sup>2/3</sup> /μm]	$h_y^*$ [μm]	$\nu$ [-]	$h_y^*$ [μm]	$\nu$ [-]	$h_y^*$ [μm]	$\nu$ [-]
1	0	26.61	1.77	0.175	1.49	0.303	1.49	0.297
1	20	26.60	1.64	0.235	1.49	0.302	1.49	0.301
1	200	26.60	1.49	0.311	1.48	0.312	1.48	0.307
1	2000	26.61	1.46	0.320	1.46	0.319	1.47	0.315
2	0	26.61	1.62	0.241	1.53	0.284	1.50	0.297
2	20	26.61	1.63	0.238	1.53	0.286	1.49	0.300
2	200	26.61	1.50	0.302	1.52	0.292	1.49	0.306
2	2000	26.62	1.43	0.334	1.50	0.303	1.49	0.311

Tabelle 6.4: Identifikation der Validierungsmuster. Es wurden vier verschiedene Modellmaterialien betrachtet, die sich in der Nichtlinearität der Verfestigung unterscheiden, aber gleiche elastische Eigenschaften, den gleichen Fließbeginn und die gleiche anfängliche Verfestigungssteigung aufweisen:  $m = 26.65 \text{ N}^{2/3}/\mu\text{m}$ ,  $h_y^* = 1.48 \mu\text{m}$ ,  $\nu = 0.3$ .

## 6.6 Abschließende Bemerkungen

Bei diesem inversen Problem, das im Vergleich zu den vorigen Kapiteln wenige Parameter besitzt, kann die Umsetzung der einzelnen Stufen gemäß Tabelle 1.1 noch einmal verdeutlicht werden.

Die in den Abschnitten 6.2 und 6.3 durchgeführten Untersuchungen befaßten sich mit der ersten Stufe, d.h. der Frage nach der Existenz und Eindeutigkeit der inversen Lösung. Gleichzeitig wurde in Abschnitt 6.3 bereits diskutiert, wie die Vollständigkeit herzustellen ist, unter der Annahme  $\Pi_1^*$  sei gegeben.

Im Fall von Set 1 kann zunächst nicht geschlossen werden, ob es nur an unabhängiger Information bezüglich des Tangentenmoduls mangelt (Unvollständigkeit) oder ob dieser anhand der meßbaren Daten nicht eliminiert werden kann (Nichtexistenz). Letzteres wäre allerdings nur möglich, wenn die Abhängigkeit vom Tangentenmodul (s. Abb. 6.6) entlang der Eindringtiefe  $\Pi_1^*$  nicht streng monoton wäre.

Bereits bei diesen noch akademischen Untersuchungen für gegebenes  $\Pi_1^*$  war es für die erfolgreiche Inversion notwendig, Vorwissen aus der Elastizitätstheorie einzubeziehen. Bei Betrachtung der dimensionsbehafteten Daten ergibt sich eine Erweiterung der Einflußgrößen um die elastischen Effekte, welche noch vor dem Effekt von  $\Pi_1^*$  anzusiedeln

sind. Mit anderen Worten, die Querkontraktionszahl konnte nur identifiziert werden, indem die dimensionslosen Daten gezielt invariant gegenüber Effekten der elastischen Deformation gewählt wurden. Eine andere, formale Entdimensionierung hätte vermutlich aufgrund des schwachen Effekts der Querkontraktionszahl die Identifikation nicht erlaubt.

Da die Querkontraktionszahl bereits eine dimensionslose Größe ist, erübrigt sich die Bildung einer geeigneten Entdimensionierungsgröße. Könnte ein guter Schätzwert für  $\nu$  gefunden werden, entspräche der Bezug von  $\nu$  auf diesen Schätzwert der dritten Stufe. Für die Bewältigung des realen Falls, bei dem der Parameter  $\Pi_1^*$  unbekannt ist, zeigt sich, daß die gewünschte Genauigkeit nur durch eine geeignete Aufbereitung der Daten erreicht werden kann. Dies entspricht der vierten Stufe in Tabelle 1.1. Durch die Verwendung der Neuronalen Netze zur Datenaufbereitung kann die Erweiterung auf die fünfte Stufe vermieden werden. Das bedeutet daß es die geschickte Aufteilung in Datenaufbereitung und Identifikation erlaubt, „schlanke“ Neuronale Netze zu verwenden. Somit wird auch ohne Umsetzung der dritten Stufe eine gute Generalisierung erzielt.

Es sollte betont werden, daß für die Anwendung der entwickelten Methode in der Praxis keine Eigenschaften von Probe und Prüfkörper benötigt werden. Die einzigen Voraussetzungen sind:

- der Prüfkörper ist kugelförmig,
- das Materialverhalten muß durch das verwendete Materialmodell beschrieben werden können,
- die maximale Eindringtiefe ist nicht größer als das achtfache der Fließtiefe.

Sollte eine oder mehrere der Voraussetzungen verletzt sein, wird dies in einer Überschreitung der Trainingsgrenzen sichtbar.

Die Neuronalen Netze für die Aufbereitung der Eingabedaten sind bei der Auswertung experimenteller Daten ebenso anwendbar, um die Streuung zu reduzieren. Allerdings kann aufgrund der vorliegenden positiven Erfahrungen mit der Anwendung auf numerische Simulationsergebnisse nicht ausgeschlossen werden, daß durch bekannte potentielle Fehlerquellen zusätzliche Probleme mit experimentellen Daten auftreten, wie z.B. infolge Nullpunktfehler, Rauigkeit, Maschinennachgiebigkeit oder nicht ideale Prüfkörperform.

## 7 Identifikation der Materialparameter der Plastizität einer dünnen Schicht auf einem Substrat

Die Nanoindentation-Technik hat sich zu einer weit verbreiteten Methode zu Ermittlung mechanischer Eigenschaften dünner Filme und Beschichtungen entwickelt. Die Vorteile liegen in der einfachen Probenpräparation und Versuchsdurchführung. Mit den Geräten der neuesten Generation können die Eigenschaften bezüglich sehr kleiner Volumina im Nanometerbereich ermittelt werden. Die zu untersuchende Probe wird dabei als *dünn* oder als *kleines Volumen* sowie als *bulk* klassifiziert. Der in dieser Fachsprache übliche Begriff *bulk* kann frei übersetzt werden mit *massiv*, denn es handelt sich um ein (bezüglich der Größe des Eindrucks) großes Probenvolumen.

Bei der Auswertung des Datenmaterials ist man jedoch auf Methoden angewiesen, die es ermöglichen, die meßbaren globalen Größen Last  $P$  und Eindringtiefe  $h$  in die gesuchten Eigenschaften abzubilden. Dabei ist die Entwicklung der Methode auf zwei Ebenen angesiedelt:

- I: Die gesuchte Werkstoffkenngröße ist aus den Größen Last und Eindringtiefe unter der Annahme, es läge ein großvolumiges Material vor, zu ermitteln.
- II: Löse das analoge Problem für die Ermittlung der gesuchten Werkstoffkenngröße einer dünnen Schicht, die auf einem Substrat abgeschieden wurde, unter Verwendung von Lösung I.

Die Untersuchungen in Kapitel 5 sowie die dort zitierte Literatur befaßten sich ausschließlich mit der Lösung von Problem I. Eine Vielzahl dieser Arbeiten zeigen, wie z.B. die Härte, der reduzierte Modul oder die monotone Spannungs-Dehnungs-Kennlinie aus Eindruckversuchen unter der Annahme von *Bulk*-Material zu ermitteln sind oder wie die bestehenden Modelle in ihrer Genauigkeit zu verbessern sind. Dabei wird jedoch oft das eigentliche Ziel, die Lösung des Problems II, nicht betrachtet.

In einigen weiteren Arbeiten wurde versucht, eine Gesetzmäßigkeit zu finden, wie die existierenden Methoden für *Bulk*-Material auch bei der Untersuchung von Schichten verwendet werden können. Hierzu zählen insbesondere die grundlegenden analytischen und semi-analytischen Lösungen von YU ET AL. [120], GAO ET AL. [29] sowie LI &

CHOU [69], die experimentellen Arbeiten von DOERNER & NIX [17] und MENČIK ET AL. [80] sowie die Finite Elemente Studien von BHATTACHARYA & NIX[7].

## 7.1 Diskussion bestehender Methoden

Zur übersichtlichen Darstellung wird im folgenden die Nomenklatur, wie sie für homogenes Material in Kapitel 5 eingeführt wurde, beibehalten. Die Zuordnung der Variablen zu Schicht, Substrat und Verbund geschieht durch die an den folgenden Beispielen dargestellte Konvention:

Größe	Homogenes Material	Substrat	Schicht	Verbund
Last	$P$	$\bar{P}$	$\hat{P}$	$\hat{\hat{P}}$
Entlastungssteifigkeit	$S$	$\bar{S}$	$\hat{S}$	$\hat{\hat{S}}$
Weite	$\Delta h$	$\Delta \bar{h}$	$\Delta \hat{h}$	$\Delta \hat{\hat{h}}$
Öffnung	$\Delta P$	$\Delta \bar{P}$	$\Delta \hat{P}$	$\Delta \hat{\hat{P}}$
Parameter	$q$	$\bar{q}$	$\hat{q}$	$\hat{\hat{q}}$

### 7.1.1 Ermittlung des reduzierten Moduls

Die oben zitierten semi-analytischen Lösungen basieren auf einem elastischen Schicht-Substrat-System, wobei dem Kontaktproblem durch die Superposition von Boussinesq-Lösungen Rechnung getragen wird. Dies ist gleichbedeutend mit der Beschränkung auf kleine elastische Deformationen. Der entstehende Integralausdruck wurde bislang nur im Fall des flachen zylindrischen Stempels von GAO ET AL. [29] geschlossen gelöst. Die resultierende Gleichung ist somit die bislang einzige analytisch motivierte Grundlage zur Berücksichtigung des Substrateffektes. Alle anderen im folgenden betrachteten Funktionen zur Berücksichtigung des Substrateinflusses sind rein empirischer Natur.

Von MENČIK ET AL. [80] wurden die bestehenden Methoden zur Ermittlung des reduzierten Schichtmoduls für das in Abb. 7.1a skizzierte Problem anhand einer großen Menge experimenteller Daten verglichen. Die dabei verwendeten Ansätze basieren auf der Vorstellung, daß die Moduli von Schicht  $\hat{E}_r$  und Substrat  $\bar{E}_r$  nach einer einfachen Mischungsregel den gemessenen Kompositmodul  $\hat{\hat{E}}_r$ , wie in Abb. 7.1b skizziert, ergeben.

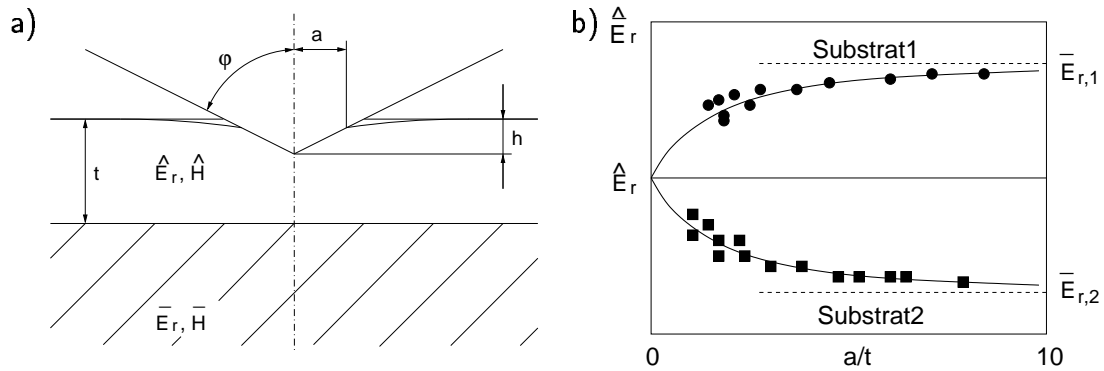


Abbildung 7.1: Problem des Schicht-Substrat-Verbundes: a) Skizze des Eindrucks eines Prüfkörpers in eine dünne Schicht; b) typische Verläufe des gemessenen Kompositmoduls  $\hat{E}_r$ .

Dafür kommen die Funktionen

$$\hat{E}_r = \bar{E}_r + (\hat{E}_r - \bar{E}_r)\phi(x), \quad (7.1)$$

$$\hat{E}_r = \hat{E}_r + (\bar{E}_r - \hat{E}_r)\psi(x) \quad (7.2)$$

mit

$$x := \frac{a}{t}, \quad \phi(x) = 1 - \psi(x) \quad (7.3)$$

in Betracht, wobei sich die in der Literatur vorgeschlagenen Methoden in  $\phi(x)$  bzw.  $\psi(x)$  unterscheiden. Die untersuchten Funktionen sind

Linearer Ansatz

$$\psi(x) = x, \quad (7.4)$$

Exponentieller Ansatz

$$\phi(x) = e^{-\alpha x}, \quad (7.5)$$

GAO-Funktion

$$\phi(x) = \frac{2}{\pi} \arctan \frac{1}{x} + \frac{1}{2\pi(1-\nu)} \left[ (1-2\nu) \frac{1}{x} \ln(1+x^2) - \frac{x}{1+x^2} \right] \quad (7.6)$$

und zusätzlich die durch das Modell zweier Federn in Reihe motivierte DOERNER & NIX-Funktion [17]

$$\frac{1}{\hat{E}_r} = \frac{1}{\hat{E}_r} + \left( \frac{1}{\bar{E}_r} - \frac{1}{\hat{E}_r} \right) e^{-\frac{\alpha}{x}}. \quad (7.7)$$

Die Anpassung dieser Funktionen durch die darin enthaltenen Parameter (u.a. auch des Schichtmoduls  $\hat{E}_r$ ) an den gemessenen Kompositmodul als Funktion von  $a/t$  ergibt den gesuchten Wert der Schicht. Dabei wurde beobachtet, daß teilweise stark unterschiedliche Werte für  $\hat{E}_r$  ermittelt wurden. Im Fall der DOERNER & NIX-Funktion wurde für die Kombination Platin/Glas der Wert von Platin zu unendlich ermittelt.

Die von MENČIK ET AL. [80] vorgeschlagene Korrektur, die die Reduktion der Schichtdicke berücksichtigt, führte zu deutlich stabileren Ergebnissen. Eine weitere sehr sinnvolle Vorgehensweise zur sichereren Festlegung des Schichtmoduls ist die Einschließung durch jeweils ein Substrat höheren und ein Substrat niedrigeren Moduls, wie es in Abb. 7.1b skizziert ist.

In diesen Untersuchungen wurde festgestellt, daß die analytisch hergeleitete GAO-Funktion noch die besten Ergebnisse lieferte. Allerdings bestehen immer noch gewisse Unsicherheiten, da die GAO-Funktion einen starren Verlauf vorschreibt, der z.B. für  $x = 0.85$  den Kompositmodul

$$\hat{\bar{E}}_r = \frac{\hat{E}_r + \bar{E}_r}{2} \quad (7.8)$$

als Mittelwert von Schicht- und Substratmodul ergibt. Im Fall der realen elastisch-plastischen Deformationen ist zu vermuten, daß somit diese Aufteilung ähnlichen Fehlern unterworfen ist, wie die Ermittlung des Moduls mit den elastischen Lösungen selbst (vgl. HUBER ET AL. [47]).

### 7.1.2 Ermittlung der Härte

Da die Härte eine Kenngröße ist, die elastische und plastische Materialeigenschaften vereinigt (s. [46, S. 10 ff.] sowie [79, S. 31 ff.]), existieren keine analytischen Mischungsformeln bei Schicht-Substrat-Verbunden. Hier wurden erste Finite Elemente Simulationen für ideal plastisches Materialverhalten von BHATTACHARYA & NIX durchgeführt, um empirische Funktionen an die Finite Elemente Ergebnisse anzupassen [7]. Für die Schicht/Substrat-Kombinationen weich/hart führte die Funktion

$$\frac{\hat{H}}{\bar{H}} = 1 + \left( \frac{\hat{H}}{\bar{H}} - 1 \right) \exp \left[ - \frac{\hat{k}_0/\bar{k}_0}{\hat{E}_r/\bar{E}_r} \left( \frac{h}{t} \right)^2 \right] \quad (7.9)$$

zu der besten Übereinstimmung, während für die Kombination hart/weich mit der Beziehung

$$\frac{\hat{H}}{\bar{H}} = 1 + \left( \frac{\hat{H}}{\bar{H}} - 1 \right) \exp \left[ - \frac{\hat{H}/\bar{H}}{(\hat{k}_0/\bar{k}_0)\sqrt{\hat{E}_r/\bar{E}_r}} \left( \frac{h}{t} \right) \right] \quad (7.10)$$

am besten beschrieben wurden. Die Funktionen (7.9) bzw. (7.10) eignen sich jedoch nur für die Voraussage der Härte bei bekannten Werten der Fließspannungen und der reduzierten Moduli von Schicht und Substrat. Soll die Härte einer unbekanntem Schicht bestimmt werden, ist natürlich die zugehörige Fließspannung nicht bekannt, so daß allein mit den obigen Gleichungen das inverse Problem nicht gelöst werden kann. Einen bislang offenen Punkt stellen die in (7.9) bzw. (7.10) nicht berücksichtigten Verfestigungseigenschaften dar, die ebenfalls das Ergebnis beeinflussen.

Bereits an dieser Stelle wird deutlich, daß das direkte Problem der Ermittlung der Eindrucktiefe-Last-Trajektorie bei gegebenen Materialparametern von Schicht und Substrat einen sehr komplexen Zusammenhang darstellt. Dieser Zusammenhang wird durch die Berücksichtigung der Verfestigungseffekte zu einem n-dimensionalen Problem, das durch graphische Darstellungen, wie z.B. in [7] nicht mehr zu überblicken ist. Dieses Gebiet stellt somit eine potentielle Aufgabe für Neuronale Netze dar, wobei die Sachlage durch den Umstand erschwert wird, daß eine inverse Funktion zu Ermittlung der Schichteigenschaften gesucht wird.

## 7.2 Konzept zur Lösung des inversen Problems

### 7.2.1 Zusammenfassung

Sollen die mechanischen Eigenschaften einer Schicht ermittelt werden, müssen die vorhandenen Methoden, die für *Bulk*-Materialien entwickelt worden sind, entsprechend erweitert werden. Eine vollkommen neue Methode zu entwickeln erscheint nicht sinnvoll, da die qualitativen Zusammenhänge zwischen der Eindrucktiefe-Last-Trajektorie und dem Materialmodell erhalten bleiben. Es bleibt somit die Frage, wie der hinzugekommene Einfluß einer weiteren geometrischen Kenngröße  $h/t$  (bzw.  $a(h)/t$ ) sowie des Schichtmaterials aus der gemessenen Eindrucktiefe-Last-Trajektorie des Verbundes zu eliminieren ist.

Für die geometrisch ähnlichen Eindrücke mit Pyramiden ist  $h/t$  die einzige geometrischen Kenngröße, so daß die ermittelten Werte des reduzierten Moduls und der Härte leicht über dieser Kenngröße aufgetragen werden können (s. Abb. 7.1b). Das Verfahren hat jedoch den Nachteil, daß für die Ermittlung der reinen Schichtparameter eine Extrapolation auf  $h/t = a/t = 0$  notwendig ist und die Daten mit abnehmender Eindrucktiefe zunehmende Streuung aufweisen. Dieses Problem wurde für den reduzierten Modul bereits zufriedenstellend mit den Methoden gelöst, die in Abschnitt 7.1.1 beschrieben sind.



Die Materialparameter der Plastizität bereiten jedoch weitaus größere Schwierigkeiten, da weitere Unbekannte in Form der Verfestigungseigenschaften auftreten, was bereits an dem Beispiel der Härte deutlich wurde (vgl. (7.9) und (7.10)).

Sollen nun die Materialparameter der Plastizität, wie in Kapitel 5 beschrieben, mit Kugeleindrücken ermittelt werden, ist die Ermittlung eines Parameters über der Eindrucktiefe nur noch mit geometrisch ähnlichen Eindrücken  $h/R = konst$  und unterschiedlichen Kugelradien möglich. Bei Verwendung von nur einem Kugelradius ist eine Auftragung der ermittelten Parameter über der Eindrucktiefe nicht sinnvoll, da sich in diesem Fall die Effekte der zwei geometrischen Kenngrößen  $h/t$  und  $h/R$  überlagern. Dies ist wird den Beispielen in Abb. 7.2 verdeutlicht, indem das Programm INDENTIFY (im folgenden als Operator IP1 bezeichnet) direkt auf die Trajektorie des Schicht-Substrat-Verbundes angewendet wird, ungeachtet der Tatsache, daß dieses für homogenes Material entwickelt wurde. Der identifizierte reduzierte Modul zeigt wie bei dem konventionellen Verfahren eine Eindrucktiefenabhängigkeit. Wird der Verlauf auf die Eindrucktiefe  $h_t = 0$  extrapoliert ergibt sich ein Wert, der etwa mit dem der Schicht übereinstimmt. Bei den Parametern der Plastizität wird jedoch durch IP1 der eindrucktiefenabhängige Substrateffekt als Verfestigungseigenschaft der Schicht interpretiert. Infolge dessen wird die Abhängigkeit von der Eindrucktiefe eliminiert, womit keine Extrapolation mehr möglich ist.

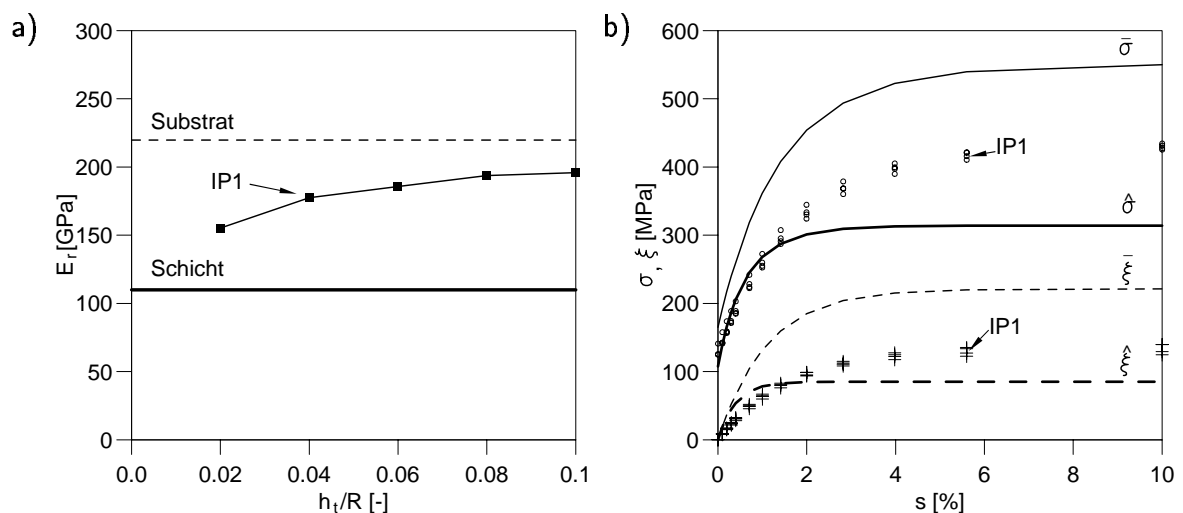


Abbildung 7.2: Identifikation der Materialparameter aus der Trajektorie des Verbundes nach konventioneller Vorgehensweise: a) reduzierter Modul; b) Parameter der Plastizität.

### 7.2.2 Die fiktive Eindringtiefe-Last-Trajektorie der Schicht

Das direkte Problem der Ermittlung einer Eindringtiefe-Last-Trajektorie für ein *Bulk*-Material oder eines Schicht-Substrat-Verbundes kann bei gegebenen Materialparametern mit Hilfe der Finite Elemente Methode punktweise gelöst werden (s. Abb. 7.3, durchgezogene Linien). Das zugeordnete inverse Problem, bestehend aus der Ermittlung der Materialparameter bei gegebener Eindringtiefe-Last-Trajektorie wurde für homogenes Material in expliziter Form in Kapitel 5 gelöst und verifiziert. Im folgenden soll dieser Schritt, wie in Abb. 7.3, mit IP1 (inverses Problem 1) bezeichnet werden.

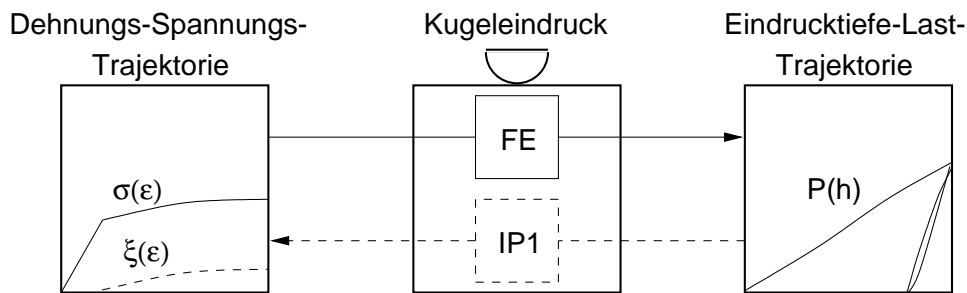


Abbildung 7.3: Direktes (FE) und inverses Problem (IP1) für den Kugeleindruck in *Bulk*-Material.

Die Erweiterung zur Ermittlung der Materialparameter einer Schicht auf einem Substrat ist in Abb. 7.4 in der Weise skizziert, wie es von HUBER ET AL. [55] vorgeschlagen wurde. Wir setzen voraus, daß die Eindringtiefe-Last-Trajektorie des unbeschichteten Substrats  $\bar{P}(h)$  sowie die Eindringtiefe-Last-Trajektorie des Schicht-Substrat-Verbundes  $\hat{P}(h)$  einfach gemessen werden können und somit bekannt sind. Diese beiden direkten Probleme können unter Annahme eines bestimmten Materialmodells ebenfalls mit einem Finite Elemente Programm simuliert werden. Im weiteren ist es formal ohne weiteres möglich, für die verwendeten Materialparameter der Schicht die zugehörige Eindringtiefe-Last-Trajektorie zu berechnen, wenn diese einem *Bulk*-Material zugewiesen werden. Diese Eindringtiefe-Last-Trajektorie wird im folgenden als die *fiktive Eindringtiefe-Last-Trajektorie des Schichtmaterials* bezeichnet.

Die Materialparameter der Schicht sind ebenfalls in der Eindringtiefe-Last-Trajektorie des Schicht-Substrat-Verbundes  $\hat{P}(h)$ , vermischt mit den Eigenschaften des Substratmaterials, enthalten. Die Eigenschaften des Substratmaterials werden durch die zugehörige Eindringtiefe-Last-Trajektorie  $\bar{P}(h)$  vollständig repräsentiert. Das heißt, die Verbund-Trajektorie ist eine eindeutige Funktion der Trajektorien der Schicht und des Substrates

$$\hat{P}(h) = \text{DP2} [\hat{P}(h), \bar{P}(h)] , \quad (7.11)$$

wobei DP2 ein nichtlinearer Operator zur Lösung des vorliegenden direkten Problems darstellt. Ist es nun möglich, den Operator DP2 in der Form

$$\hat{P}(h) = \text{IP2} [\hat{P}(h), \bar{P}(h)] \quad (7.12)$$

zu invertieren, können die Materialparameter der Schicht durch Anwenden des inversen Operators IP1 aus  $\hat{P}(h)$  ermittelt werden (s. Abb. 7.4).

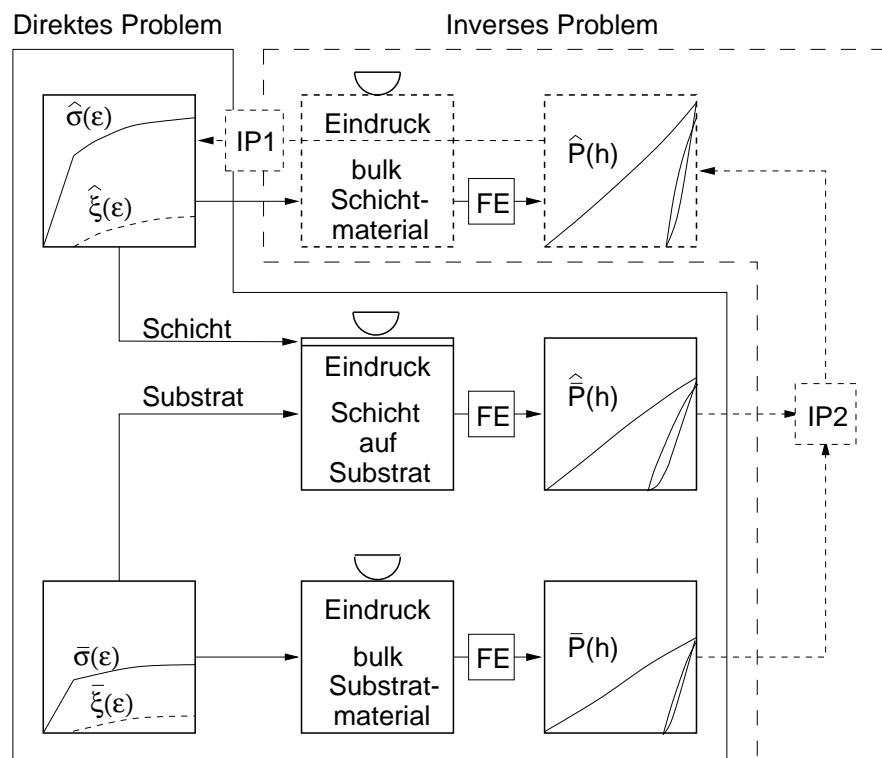


Abbildung 7.4: Skizze zur Lösung des inversen Problems für eine dünne Schicht.

### 7.3 Finite Elemente Simulationen

Für die Finite Elemente Simulationen in diesem Kapitel wurde das bestehende Netz aus Kapitel 5 (Abb. 5.3) leicht modifiziert, um den oberen Elementschichten mit der Schichtdicke  $t$  einen zweiten Parametersatz zuordnen zu können. Das modifizierte Netz ist in Abb. 7.5 dargestellt. Aus dem Vergleich der Abmessung der Kugel mit der Schichtdicke erhält man einen ersten Eindruck, was der Begriff *dünne Schicht* bedeutet.

Das Materialmodell für Schicht und Substrat entspricht dem in Kapitel 5 verwendeten Modell der Plastizität (5.2)–(5.7) mit isotroper und kinematischer Verfestigung, wobei

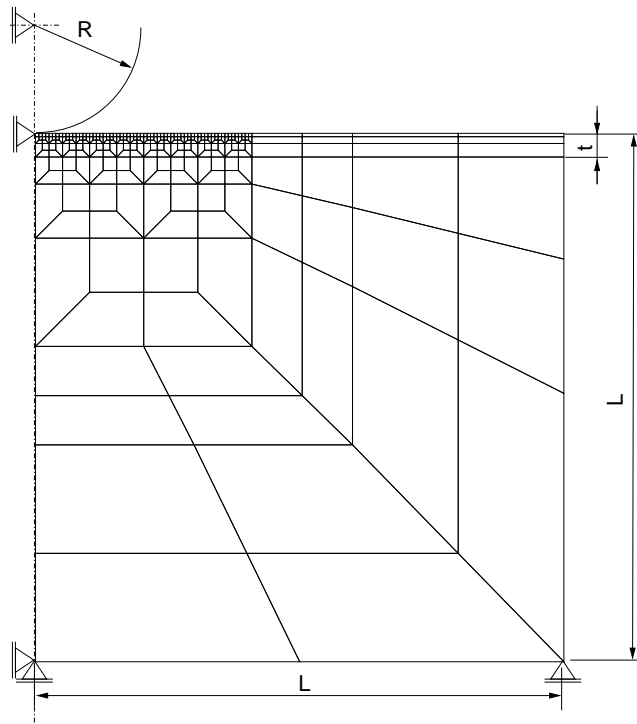


Abbildung 7.5: Finite Elemente Netz für den Kugeleindruck in eine Schicht auf einem Substrat.

jedoch für die Schicht und das Substrat beliebig unterschiedliche Parametersätze gewählt werden können.

Die Anzahl der relevanten Materialparameter für die Generierung der Muster ist sechs für jedes Material ( $E$ ,  $k_0$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$ ,  $c$ ,  $b$ ). Wie bisher werden für alle Simulationen eine Querkontraktionszahl von  $\nu = 0.3$  und ein Kugelradius von  $R = 5$  mm angenommen. Zur weiteren Einschränkung der Zahl zu variierender Parameter wird die Schichtdicke mit  $t = 1.12$  mm ebenfalls konstant gehalten. Somit sind die mit diesen Daten trainierten Neuronalen Netze nur für das Verhältnis der Schichtdicke zu Kugelradius von  $t/R = 0.224$  gültig. Sind verschiedene Prüfkörper in geeigneter Abstufung verfügbar, sollte es experimentell machbar sein, das Schichtdicken zu Radien-Verhältnis durch das Herstellungsverfahren entsprechend einzustellen. Wird entsprechend Kapitel 5 mit einer maximalen Eindrucktiefe von  $h_t/R = 0.1$  gearbeitet, bedeutet dies, daß der Prüfkörper bis auf  $h_t/t = h_t/R \cdot R/t = 0.45$ , d.h. auf die Hälfte der Schichtdicke, in die Schicht hineingedrückt wird. Dies bringt zum Ausdruck, daß hier von der in der Literatur üblichen Herangehensweise mit kleinen Eindrucktiefen ( $h/t < 10\%$ ), auch als Buckle-Regel bekannt (siehe z.B. [78] und die dort zitierte Literatur), in dieser Arbeit deutlich abge-

wichen wird.

Entsprechend den positiven Erfahrungen mit den Zufallsmustern in Abschnitt 5.3, werden die äquidistanten Muster völlig weggelassen und ausschließlich zufällig generierte Parametersätze aus dem Raum der 11 zu variierenden dimensionslosen Parameter gewählt. Der Grund hierfür ist offensichtlich: würden für jeden Parameter ein Minimum von drei Stützstellen gewählt, ergäben sich allein für die äquidistanten Muster bereits 177147 Simulationen. Die Wahl der Parameter  $(E, k_0, \gamma, \beta, c, b)$  sowohl der Schicht als auch des Substrats wurde daher zufällig gleichverteilt in den Intervallen vorgenommen, die in Tabelle 7.1 angegeben sind.

Parameter	Bereich
$E$	[GPa] 100. , 200.
$k_0$	[MPa] 50. – 300.
$\Delta\Sigma/k_0$	[-] 0.2 – 3.0
$\gamma/(\beta\Delta\Sigma)$	[-] 0.0 – 1.0
$\gamma$	[GPa] 3. – 30.
$c$	[GPa] 2. – 20.

Tabelle 7.1: Parameterbasis für das Schicht- und Substratmaterial zur Generierung der Muster.

## 7.4 Generierung des inversen Operators IP2

Der inverse Operator IP2 soll mit Hilfe von Neuronalen Netzen als explizite Funktion erstellt werden. Mit ihm wird die fiktive Eindringtiefe-Last-Trajektorie des Schichtmaterials für gegebene Eindringtiefe-Last-Trajektorie des unbeschichteten Substrats sowie des Schicht-Substrat-Verbundes ermittelt. Diese Aufgabe wird in zwei einfachere Teilprobleme aufgespalten. Im ersten Schritt wird der Teil des Operators IP2 betrachtet, der die fiktive Belastungskurve und die fiktive Entlastungssteifigkeit des Schichtmaterials ermittelt (IP2a). Diese Daten bestimmen den Verlauf der Gesamtspannung im einachsigen Verhalten (s. Abschnitt 5.3.1). Im zweiten Schritt werden mit dem Operator IP2b, unabhängig von den Ergebnissen des Operators IP2a, die eindringtiefeabhängigen fiktiven Hysteresedaten des Schichtmaterials bestimmt.

Für eine kompaktere Schreibweise wird im folgenden der Vektor der Materialparameter

$$\mathbf{q} := (E, k_0, \gamma, \beta, c, b) \quad (7.13)$$

eingeführt, der im Fall des Schichtmaterials mit  $\hat{\mathbf{q}}$  und im Fall des Substratmaterials mit  $\bar{\mathbf{q}}$  bezeichnet wird.

### 7.4.1 Fiktive Belastungskurve

Wie den Gleichungen (7.9) bzw. (7.10) zu entnehmen ist, ergibt sich die Härte des Verbundes und damit auch die Last bei der erreichten Kontaktfläche als Funktion derjenigen Materialparameter von Schicht und Substrat, die für den Verlauf der Gesamtspannung relevant sind. Da die oben genannten Gleichungen aufgrund der enthaltenen unbekanntenen Materialparameter nicht invertiert werden können, werden im folgenden die Materialparameter durch die Belastungskurven ersetzt.

Die Last des Verbundes  $\hat{P}_l$  bei einer Eindringtiefe  $h$  hängt von den Materialparametern der Schicht  $\hat{\mathbf{q}}_l = (\hat{E}, \hat{k}_0, \hat{\sigma}', \Delta\hat{\Sigma})$ , sowie den Materialparametern des Substrats  $\bar{\mathbf{q}}_l = (\bar{E}, \bar{k}_0, \bar{\sigma}', \Delta\bar{\Sigma})$  und der Geometrie in der allgemeinen Form

$$\hat{P}_l = \hat{\mathcal{P}}_l(\hat{\mathbf{q}}_l, \bar{\mathbf{q}}_l, R, t, h) \quad (7.14)$$

ab. Die Funktion  $\hat{\mathcal{P}}_l$  in (7.14) ist implizit durch die Werte von  $\hat{P}_l$  an festen Punkten  $(\hat{\mathbf{q}}_l, \bar{\mathbf{q}}_l, R, t, h)$  durch Finite Elemente Lösungen gegeben.

Für die *bulk* Schicht- und Substratmaterialien gelten analog die Beziehungen

$$\hat{P}_l = \hat{\mathcal{P}}_l(\hat{\mathbf{q}}_l, R, h), \quad (7.15)$$

$$\bar{P}_l = \bar{\mathcal{P}}_l(\bar{\mathbf{q}}_l, R, h). \quad (7.16)$$

Die Entlastungssteifigkeiten des Verbundes, der *bulk* Schicht sowie des unbeschichteten Substrates sind gegeben durch die Gleichungen

$$\hat{S} = \hat{\mathcal{S}}_l(\hat{\mathbf{q}}_l, \bar{\mathbf{q}}_l, R, t, h_t), \quad (7.17)$$

$$\hat{S} = \hat{\mathcal{S}}_l(\hat{\mathbf{q}}_l, R, h_t), \quad (7.18)$$

$$\bar{S} = \bar{\mathcal{S}}_l(\bar{\mathbf{q}}_l, R, h_t). \quad (7.19)$$

Für die Anwendung von INDENTIFY (s. Abb. 5.25) werden die Daten der Belastungskurve

$$P_{l,i} = P_l(h_i^*) \quad (7.20)$$

an den Eindringtiefen  $h_i^*$ ,  $1 \leq i \leq 8$ , definiert mit

$$h_i^* = \{6.25 \cdot 10^{-4}, 1.25 \cdot 10^{-3}, 2.5 \cdot 10^{-3}, 5 \cdot 10^{-3}, 0.01, 0.02, 0.04, 0.06\}, \quad (7.21)$$

benötigt. Der Entlastungs-Wiederbelastungszyklus zur Bildung der Hysterese ist im Intervall  $0.02 \leq h_t^* \leq 0.1$  durchzuführen. Aus den Simulationen stehen Daten für die Eindruckstiefen

$$h_{t,i}^* = \{0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1\}, \quad 1 \leq i \leq 5 \quad (7.22)$$

zur Verfügung.

Wir setzen voraus, daß die Werte  $\hat{P}_{l,i}$ ,  $\bar{P}_{l,i}$  an den Punkten  $h_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  sowie die Werte  $\hat{S}$  und  $\bar{S}$  bei  $h_t$  gegeben seien. Für diese Werte kann aufgrund der Erkenntnisse aus Kapitel 5 angenommen werden, daß die Gleichungen (7.15), (7.18) sowie (7.16), (7.19) nach

$$\hat{q}_l = \hat{Q}_l(h_i, \hat{P}_{l,i}, \hat{S}, R, h_t), \quad (7.23)$$

$$\bar{q}_l = \bar{Q}_l(h_i, \bar{P}_{l,i}, \bar{S}, R, h_t) \quad (7.24)$$

aufgelöst werden können.

Für das Folgende wird  $n = 8$  gesetzt, womit die Werte  $h_1, \dots, h_8$  durch (7.21) gegeben sind. Für  $h_t^*$  (beziehungsweise  $h_t$ ) werden die Werte benutzt, die in (7.22) angegeben sind.

Mit festen  $h_i$  kann Gleichung (7.23) und (7.24) umgeschrieben werden in der Form

$$\hat{q}_l = \hat{Q}_l(\hat{P}_{l,i}, \hat{S}, R, h_t), \quad (7.25)$$

$$\bar{q}_l = \bar{Q}_l(\bar{P}_{l,i}, \bar{S}, R, h_t). \quad (7.26)$$

Durch Einsetzen von (7.25) und (7.26) in (7.14) ergibt sich eine Beziehung für  $\hat{P}_l$  als

$$\hat{P}_{l,i} = \hat{\Pi}(\hat{P}_{l,i}, \bar{P}_{l,i}, \hat{S}, \bar{S}, R, h_t). \quad (7.27)$$

Bei gegebenen Belastungskurven und Entlastungssteifigkeiten des Verbundes und des Substrates folgt analog

$$\hat{P}_{l,i} = \hat{\Pi}(\hat{P}_{l,i}, \bar{P}_{l,i}, \hat{S}, \bar{S}, R, h_t), \quad (7.28)$$

wobei die Argumente von  $\hat{\Pi}$  die benötigten Eingabedaten des zu trainierenden neuronalen Netzes darstellen.

### Eingabedefinition

Die dimensionslose Darstellung der Eingabedaten beschränkt sich auf Lastverhältnisse sowie dem Verhältnis der Entlastungssteifigkeiten. Aus mehreren Möglichkeiten zeigte sich die folgende Definition des Eingabesatzes als am besten geeignet:

$$x_1 \dots x_8 := \frac{\hat{P}_{l,i}}{\bar{P}_{l,i}}, \quad i = 1 \dots 8, \quad (7.29)$$

$$x_9 \dots x_{15} := \frac{\hat{P}_{l,i}}{\hat{P}_{l,8}}, \quad i = 1 \dots 7, \quad (7.30)$$

$$x_{16} \dots x_{22} := \frac{\bar{P}_{l,i}}{\bar{P}_{l,8}}, \quad i = 1 \dots 7, \quad (7.31)$$

$$x_{23} := \frac{h_t}{R}, \quad x_{24} := \frac{\hat{P}_t}{\bar{P}_t}, \quad x_{25} := \frac{\hat{S}(h_t)}{\bar{S}(h_t)}. \quad (7.32)$$

Die ersten drei Gleichungen enthalten das Verhältnis der Belastungskurven von Verbund und Substrat sowie den dimensionslosen Verlauf der Belastungskurven selbst. Die Eingabedaten  $x_{23}$ - $x_{25}$  enthalten die Information über den Entlastungspunkt. Da nicht bei jedem Experiment vorausgesetzt werden kann, daß bis zur maximalen Eindringtiefe von  $h/R = 0.1$  belastet wird, wurde der maximale Wert für die Belastungskurve mit  $h/R = 0.06$  festgelegt. Bis zu dieser Tiefe müssen auf jeden Fall Daten der Belastungskurve vorliegen. Die Lage der Entlastungskurve darf darüber hinaus gehen und ist auf das Intervall  $0.02 \leq h_t/R \leq 0.1$  beschränkt. Da für die Entdimensionierung der Öffnung für den Operator IP2b die zugehörige Maximallast  $\hat{P}_t$  benötigt wird, werden die korrespondierenden Lasten des Verbundes und des Substrates für die Identifikation von  $\hat{P}_t$  mit IP2a am Eingang zur Verfügung gestellt. Auf diese Weise wird flexibel eine weitere Information bezüglich der Entwicklung der Belastungskurven über die Tiefe  $h/R = 0.06$  hinaus geliefert.

### Ausgabedefinition

Das Einbringen von Vorwissen beschränkt sich auf einen rein empirischen Zugang, da keine geschlossene Lösung bezüglich der Entwicklung der Last des Verbundes existiert. Die empirischen Relationen (7.9) bzw. (7.10) können aufgrund der enthaltenen unbekanntem Materialparameter nicht verwendet werden.

Zur Herleitung eines einfachen empirischen Modells werden drei Lastwerte  $\bar{P}_l$ ,  $\hat{P}_l$  und  $\hat{P}_t$ , gemessen an der selben Eindringtiefe  $h$ , betrachtet. In den drei Fällen unendlich weiches



Substrat, unendlich weiche Schicht sowie homogenes Material (Schicht = Substrat) kann das Ergebnis sofort angegeben werden:

$$\bar{P}_l = 0, \hat{P}_l > 0 \Rightarrow \hat{\hat{P}}_l = 0, \quad (7.33)$$

$$\bar{P}_l > 0, \hat{P}_l = 0 \Rightarrow \hat{\hat{P}}_l = 0, \quad (7.34)$$

$$\bar{P}_l = \hat{P}_l \Rightarrow \hat{\hat{P}}_l = \bar{P}_l = \hat{P}_l. \quad (7.35)$$

Es ist leicht zu überprüfen, daß die einfache Mischungsformel

$$\hat{\hat{P}}_l^{(est)} = \hat{P}_l \left( \frac{\bar{P}_l}{\bar{P}_l + \hat{P}_l} \right) + \bar{P}_l \left( \frac{\hat{P}_l}{\bar{P}_l + \hat{P}_l} \right) = \frac{2\bar{P}_l\hat{P}_l}{\bar{P}_l + \hat{P}_l}. \quad (7.36)$$

diese Sonderfälle korrekt wiedergeben kann. Inwieweit (7.36) die tatsächlichen Verhältnisse beschreibt, wird in Abb. 7.7 (linke Seite) an drei unterschiedlichen Beispielen verdeutlicht. Es handelt sich um Schicht/Substrat-Kombinationen weich/hart, etwa gleich hart und hart/weich. Die Verläufe zeigen, daß mit (7.36) bereits eine akzeptable Schätzung  $\hat{\hat{P}}_l^{(est)}$  der korrekten Verbundlast  $\hat{\hat{P}}_l$  erzielt wird.

Somit kann (7.36) für gegebene Lasten  $\bar{P}_l$  und  $\hat{P}_l$  auch zur Abschätzung der fiktiven Schichtlast  $\hat{P}_l$  durch Umformen in

$$\hat{P}_l^{(est)} = \frac{\hat{\hat{P}}_l\bar{P}_l}{2\bar{P}_l - \hat{\hat{P}}_l} \quad (7.37)$$

herangezogen werden. Auf diese Weise folgt die entsprechende Ausgabedefinition

$$y_1 \dots y_8 := \frac{\hat{P}_{l,i}}{\hat{\hat{P}}_{l,i}^{(est)}}, \quad i = 1 \dots 8 \quad (7.38)$$

für die Belastungskurve. Die Last, die der Hysterese zugeordnet ist, folgt analog aus

$$y_9 := \frac{\hat{P}_t}{\hat{\hat{P}}_t^{(est)}}, \quad (7.39)$$

während für die Entlastungssteifigkeit einfach mit derjenigen des Verbundes entdimensioniert wird

$$y_{10} := \frac{\hat{S}(h_t)}{\hat{\hat{S}}(h_t)}. \quad (7.40)$$

## Training und Verifikation

Das Neuronale Netz zur Ermittlung der fiktiven Belastungskurve der Schicht, als *LoadNet* bezeichnet, besitzt 25 Eingabeneuronen, zwei verdeckte Schichten mit 20 und 15 Neuronen sowie zehn Ausgabeneuronen. Nach 1000 Epochen wurden sehr gute MSE-Werte von 0.0004 bzw. 0.00093 für die 346 Trainings- bzw. 29 Verifikationsmuster erreicht. Die korrespondierenden Fehlerverteilungen sind in den Abbildungen 7.6a und 7.6b dargestellt. Die 80%-Konfidenzintervalle betragen 10% für die Belastungswerte sowie 5% für die Entlastungssteifigkeit. Abbildung 7.7a-7.7c (rechts) zeigt drei Verifikationsbeispiele unterschiedlichen Charakters, die mit LoadNet ausgewertet worden sind.

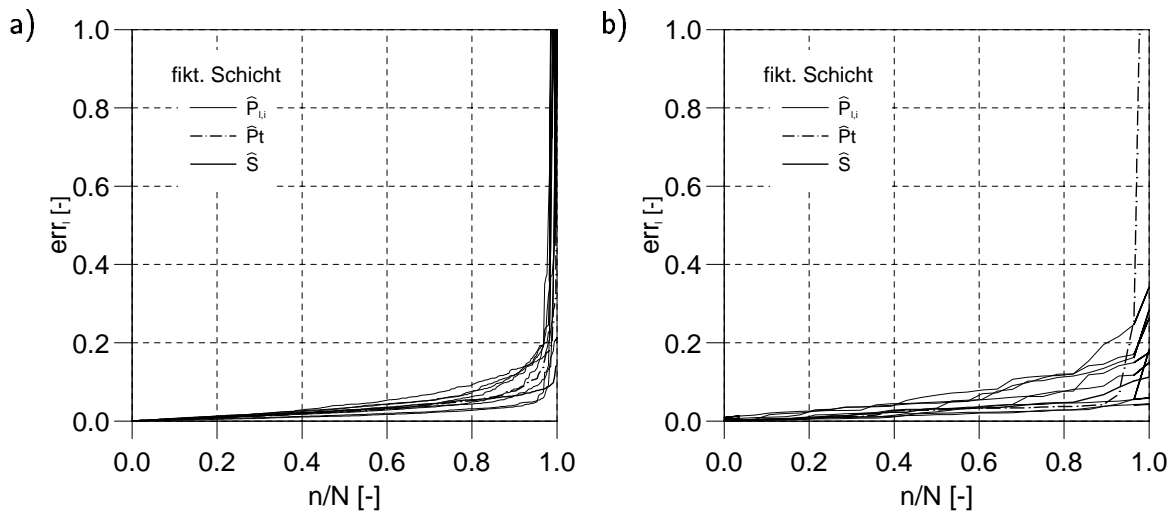


Abbildung 7.6: Verteilung des relativen Fehlers  $err_i$  für  $\hat{P}_{i,i}$ ,  $\hat{P}_t$  und  $\hat{S}$ : a) Trainingsmuster ( $N = 346$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 29$ ).

### 7.4.2 Fiktive Hysterese

Wie in den qualitativen Untersuchungen zu Beginn von Abschnitt 5.3 gezeigt wurde, beinhaltet die dimensionslose Hysterese hauptsächlich Effekte der kinematischen Verfestigung; sie wird allerdings auch durch die isotrope Verfestigung und die elastischen Eigenschaften beeinflusst. Aus diesem Grund müssen zur Ermittlung der fiktiven Hysterese der Schicht die Daten der Belastungskurven, der Entlastungssteifigkeit und der Hysteresen von Verbund und reinem Substrat verwendet werden. Das Neuronale Netz zur Ermittlung der fiktiven Hysterese des reinen Schichtmaterials wird mit *HystNet* bezeichnet.

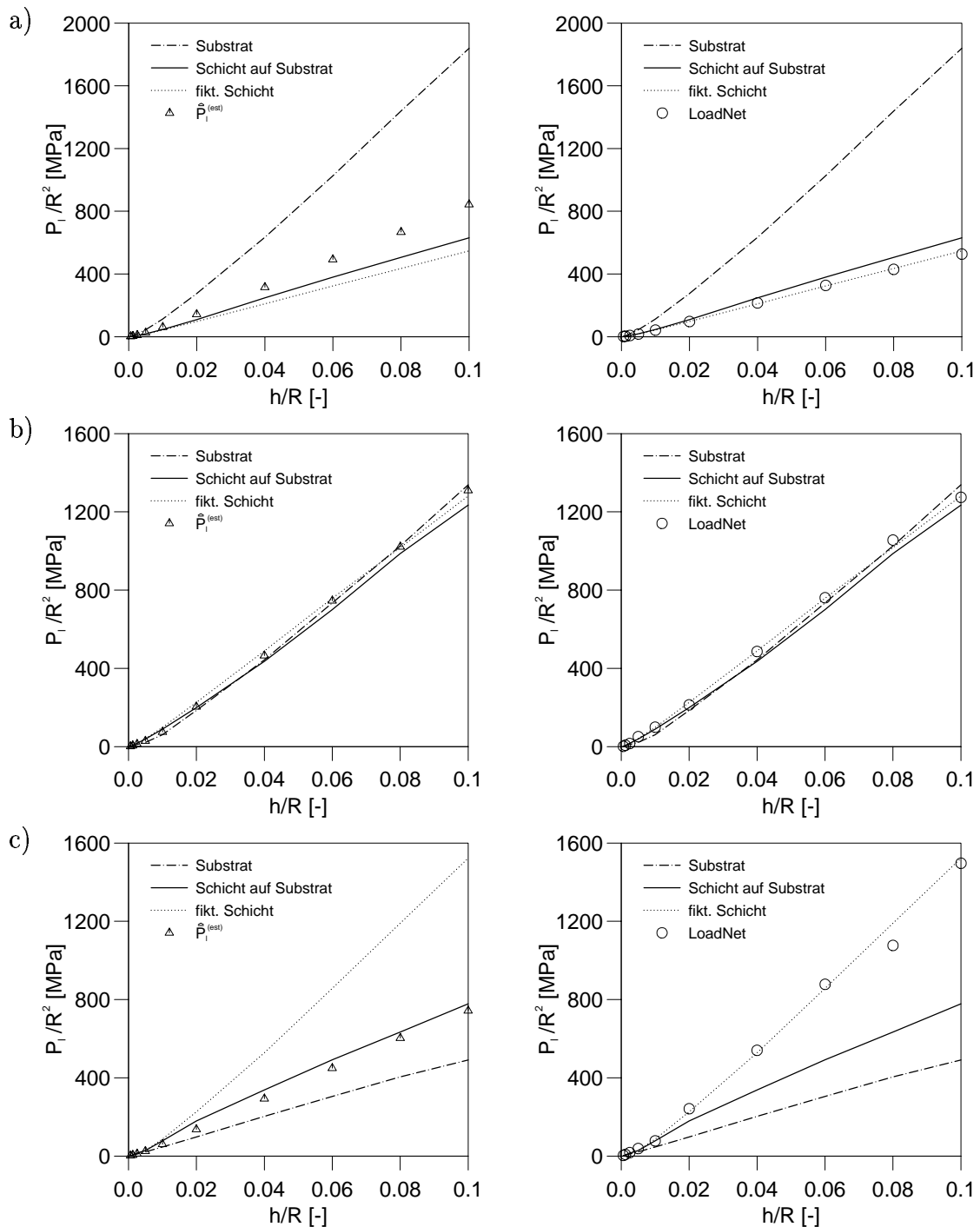


Abbildung 7.7: Linke Seite:  $\hat{P}_i^{(est)}$ -Werte für gegebene Kurven von Schicht und Substrat. Rechte Seite: Ermittlung der fiktiven Belastungskurve des Schichtmaterials mit LoadNet: a) weiche Schicht auf hartem Substrat; b) Schicht und Substrat von etwa gleicher Härte; c) harte Schicht auf weichem Substrat.

### Eingabedefinition

Die Eingabedaten werden definiert durch die Belastungskurvenformen

$$x_1 \dots x_4 := \frac{\hat{P}_{l,i}}{\hat{P}_{l,8}} i = 4..7, \quad (7.41)$$

$$x_5 \dots x_8 := \frac{\bar{P}_{l,i}}{\bar{P}_{l,8}} i = 4..7, \quad (7.42)$$

das Verhältnis der Belastungskurven

$$x_9 := \frac{\hat{P}_{l,8}}{\bar{P}_{l,8}}, \quad (7.43)$$

die Daten bezüglich des Entlastungspunktes

$$x_{10} := \frac{h_t}{R}, \quad x_{11} := \frac{\hat{P}_t}{\bar{P}_t}, \quad x_{12} := \frac{\hat{S}(h_t)}{\bar{S}(h_t)}, \quad (7.44)$$

die Öffnungen

$$x_{13} := \frac{\Delta \hat{P}_1}{\Delta \hat{P}_2}, \quad x_{14} := \frac{\Delta \hat{P}_2}{\hat{P}_t}, \quad x_{15} := \frac{\Delta \hat{P}_3}{\Delta \hat{P}_2}, \quad (7.45)$$

$$x_{16} := \frac{\Delta \bar{P}_1}{\Delta \bar{P}_2}, \quad x_{17} := \frac{\Delta \bar{P}_2}{\bar{P}_t}, \quad x_{18} := \frac{\Delta \bar{P}_3}{\Delta \bar{P}_2}, \quad (7.46)$$

$$x_{19} := \frac{\Delta \hat{P}_2}{\Delta \bar{P}_2} \quad (7.47)$$

sowie die Weiten

$$x_{20} := \frac{\Delta \hat{h}_1}{\Delta \hat{h}_2}, \quad x_{21} := \frac{\Delta \hat{h}_2}{h_t}, \quad x_{22} := \frac{\Delta \hat{h}_3}{\Delta \hat{h}_2}, \quad (7.48)$$

$$x_{23} := \frac{\Delta \bar{h}_1}{\Delta \bar{h}_2}, \quad x_{24} := \frac{\Delta \bar{h}_2}{h_t}, \quad x_{25} := \frac{\Delta \bar{h}_3}{\Delta \bar{h}_2}, \quad (7.49)$$

$$x_{26} := \frac{\Delta \hat{h}_2}{\Delta \bar{h}_2}. \quad (7.50)$$

### Ausgabedefinition

Eine geeignete einfache Korrelation zur Abschätzung der fiktiven Hysteresengeometrie der Schicht konnte nicht gefunden werden. Es kommt erschwerend hinzu, daß eine der Hysteresen des Substratmaterials oder des Schichtmaterials verschwinden kann, wobei dennoch eine deutliche Hysterese des Verbundes beobachtet werden kann. Der Schätzer

für die fiktiven Hysterese des Schichtmaterials müßte somit auch der Wert Null enthalten, womit eine Division durch einen solchen Schätzwert statt zur Reduzierung zu einer Erweiterung des Wertebereichs bis ins Unendliche führen würde. Daher hat sich die Division mit den Hysteresedaten des Verbundes als geeignet erwiesen. Erfahrungsgemäß sind die Hysteresen des Verbundes am größten, womit die zugehörigen Öffnungen und Weiten im Zentrum auch die Werte mit den kleinsten Unsicherheiten liefern. Die Ausgabedefinition ist somit gegeben durch

$$y_1 \dots y_3 := \frac{\hat{P}_i}{\hat{P}_2}, \quad i = 1 \dots 3, \quad (7.51)$$

$$y_4 \dots y_6 := \frac{\hat{h}_i}{\hat{h}_2}, \quad i = 1 \dots 3. \quad (7.52)$$

### Training und Verifikation

Entsprechend den Eingabe- und Ausgabedefinitionen besitzt HystNet 26 Eingabe- und sechs Ausgabeneuronen. Es wurden zwei verdeckte Schichten mit 18 bzw. zehn Neuronen eingefügt. Die MSE-Werte betragen am Ende des Trainings 0.00072 bei 324 Trainingsmustern und 0.00165 bei 28 Verifikationsmustern.

Abbildung 7.8 zeigt die Verteilung der relativen Fehler, die bezüglich der 80%-Konfidenzintervalle 20% für die Trainingsmuster und 30% für die Verifikationsmuster betragen. Die vergleichsweise hohen Fehler resultieren aus den Hysteresen, die sehr schmal sind. Dies ist jedoch für den nachfolgenden Identifikationsprozeß nicht entscheidend, da sehr schmale Hysteresen auch betragsmäßig kleinen Materialparametern zugeordnet sind. Daher wird in einem solchen Fall dem relativen Fehler keine große Bedeutung in den Dehnungs-Spannungs-Trajektorien beigemessen.

Um die Identifikationsfähigkeiten von HystNet zu demonstrieren, zeigen die Abbildungen 7.9 und 7.10 die ermittelten Öffnungswerte  $\Delta \hat{P}_i / R^2$  sowie die Weiten  $\Delta \hat{h}_i / R$  für das Beispiel in Abb. 7.7c (harte Schicht auf weichem Substrat). Dies ist der ungünstigste Fall, da das weiche Substrat die gemessene Eindrucktiefe-Last-Trajektorie des Verbundes am stärksten beeinflusst. Anhand der Darstellungen ist zu erkennen, daß die Hysteresegeometrie vollständig und sehr genau für alle Eindrucktiefen im Bereich  $0.02 \leq h_t / R \leq 0.1$  ermittelt wird.

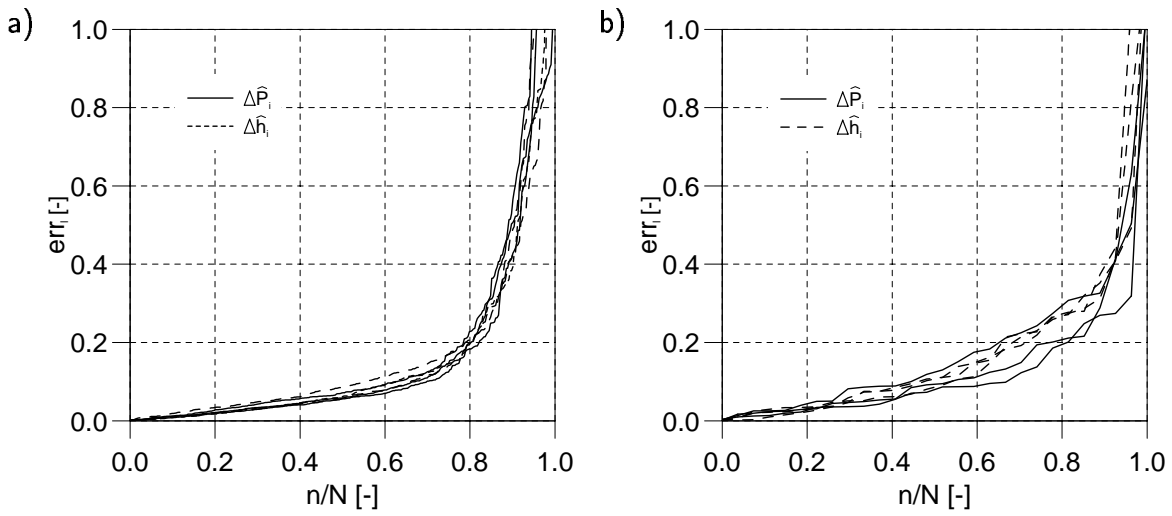


Abbildung 7.8: Verteilung des relativen Fehlers  $err_i$  für die fiktiven Hysteresen des Schichtmaterials: a) Trainingsmuster ( $N = 324$ ); b) Verifikationsmuster ( $N = 28$ ).

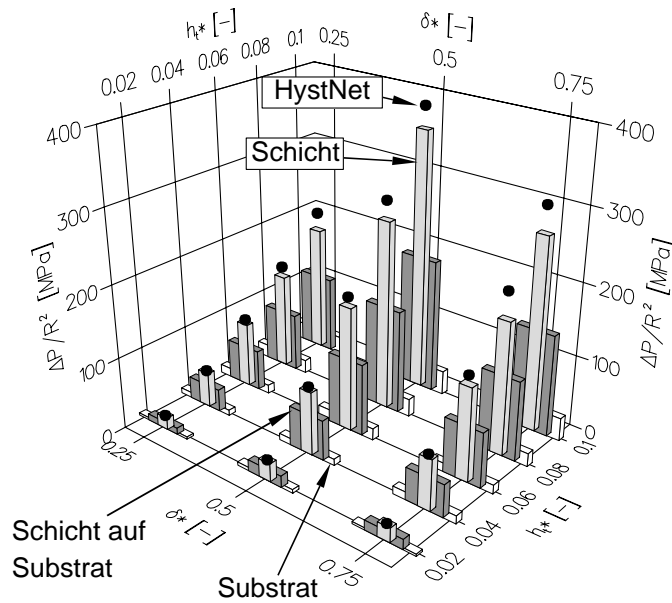


Abbildung 7.9: Identifikation der fiktiven Hysteresengeometrie für das Schichtmaterial mit HystNet: Öffnung  $\Delta \hat{P}_i$ .

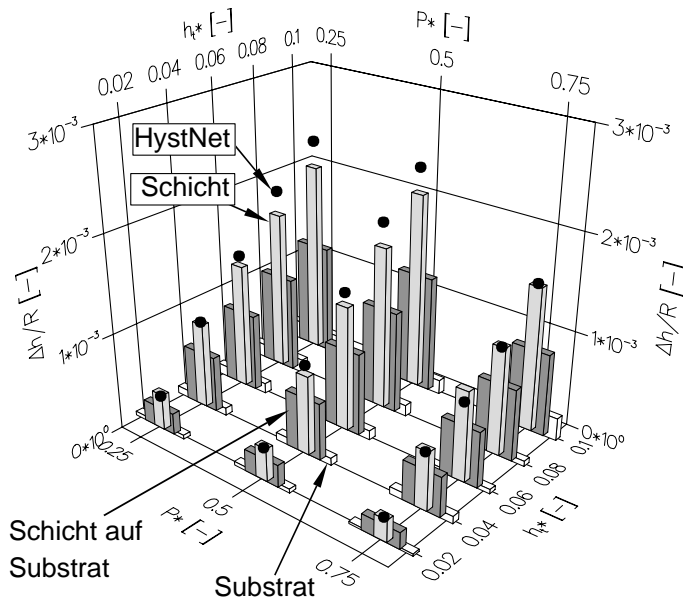


Abbildung 7.10: Identifikation der fiktiven Hysteresengeometrie für das Schichtmaterial mit HystNet: Weite  $\Delta\hat{h}_i$ .

### 7.4.3 Validierung der Identifikationskette

Mit den nun bekannten fiktiven Belastungskurven- und Hysteresedaten des Schichtmaterials können die Materialparameter  $\hat{q}$  des Schichtmaterials durch Anwenden des Programms INDENTIFY ermittelt werden. Analog zu Kapitel 5 werden Eindrucktiefe-Last-Trajektorien verwendet, bei denen an den Eindrucktiefen  $h_{t,i}^*$ ,  $i = 1..5$ , Hysteresen durch Entlastungs-Wiederbelastungszyklen erzeugt worden sind ( $h_{t,i}^*$  ist in Gl. (7.22) definiert).

Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 7.11 – 7.13 in Form von  $\hat{\sigma}(s)$ - und  $\hat{\xi}(s)$ -Verläufen dargestellt. Die Kreise und Kreuze bezeichnen  $\hat{\sigma}$ - bzw.  $\hat{\xi}$ -Werte, wobei jeder Hysterese ein Kurvenzug zugeordnet ist. Wie bereits zuvor angedeutet, nimmt die Ungenauigkeit der Identifikation mit wachsendem Verhältnis der Härten von Schicht zu Substrat zu.

Die Kurven in den Abbildungen 7.11, 7.12 und 7.13 entsprechen den Verifikationsbeispielen in den Abbildungen 7.7a, 7.7b und 7.7c. In diesen Beispielen entspricht das kleinste bzw. das größte Härteverhältnis Abbildung 7.7a bzw. 7.7c. In den Tabellen 7.2 – 7.4 sind alle in den Beispielen 7.7a – 7.7c verwendeten und identifizierten Parametersätze angegeben. Grundsätzlich kann anhand der Tabellen 7.2 – 7.4 sowie den Abbildungen 7.11 – 7.13 eine sehr gute Identifikationsqualität festgestellt werden. Kleine Abweichungen in der Fließspannung werden durch einen entsprechend veränderten Wert des Moduls

$\sigma'$  kompensiert. Die weitgehende Unabhängigkeit der Parametersätze von der Eindrucktiefe zeigt, daß die Neuronalen Netze LoadNet und HystNet in der Lage sind, den Effekt des Substrates aus den Daten des Verbundes auch bei den größten Eindrucktiefen von etwa der halben Schichtdicke korrekt zu eliminieren.

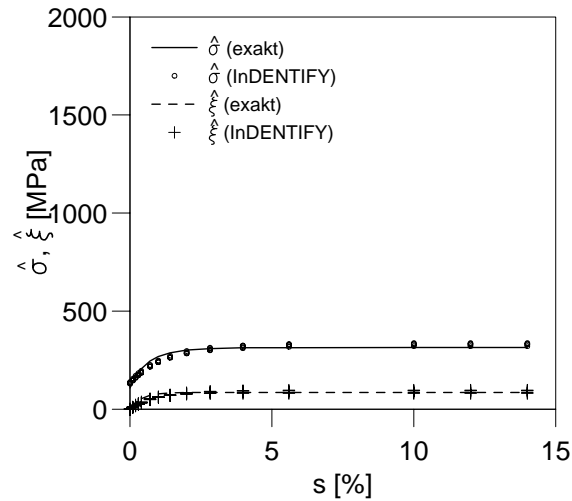


Abbildung 7.11: Mit InDENTIFY aus den fiktiven Eindrucktiefe-Last-Trajektorien des Schichtmaterials identifizierte  $\hat{\sigma}(s)$ - und  $\hat{\xi}(s)$ -Verläufe. Die Beispiele entsprechen dem Verifikationsmuster in Abb. 7.7a.

S/F/I	$h_t^*$ [-]	$E$ [GPa]	$k_0$ [MPa]	$\sigma'$ [MPa]	$\Delta\Sigma$ [MPa]	$\xi'$ [MPa]	$\Delta\xi$ [MPa]
S	-	200	369	43897	1064	24525	142
F	-	100	107	29729	186	15894	64
I	0.02	91	138	15100	164	9300	60
I	0.04	107	132	13800	177	7727	64
I	0.06	107	130	13710	183	7083	70
I	0.08	103	131	15250	175	7336	72
I	0.10	93	135	17860	166	9010	68

Tabelle 7.2: Verwendete und identifizierte Materialparameter für das Verifikationsmuster in Abb. 7.7a und 7.11: S: Substrat; F: Schicht; I: identifiziert.



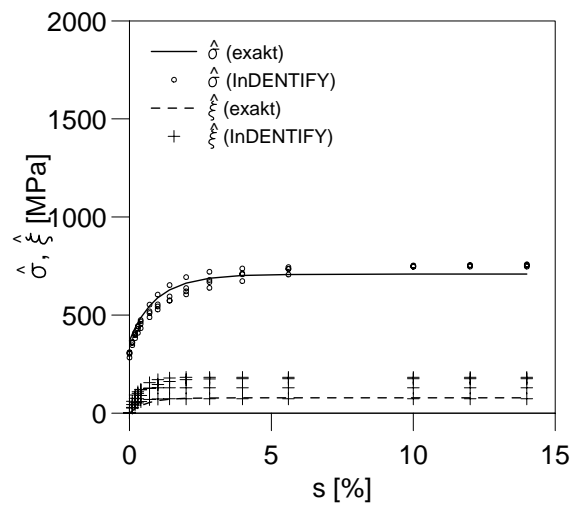


Abbildung 7.12: Mit INIDENTIFY aus den fiktiven Eindringtiefe-Last-Trajektorien des Schichtmaterials identifizierte  $\hat{\sigma}(s)$ - und  $\hat{\xi}(s)$ -Verläufe. Die Beispiele entsprechen dem Verifikationsmuster in Abb. 7.7b.

S/F/I	$h_t^*$	$E$	$k_0$	$\sigma'$	$\Delta\Sigma$	$\xi'$	$\Delta\xi$
	[-]	[GPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]	[MPa]
S	-	100	320	31553	784	14099	542
F	-	200	369	33399	320	9798	58
I	0.02	188	310	45540	392	23580	131
I	0.04	187	306	44280	412	36680	137
I	0.06	191	302	42800	435	22940	54
I	0.08	201	283	78720	436	60270	97
I	0.10	201	252	-	-	-	-

Tabelle 7.3: Verwendete und identifizierte Materialparameter für das Verifikationsmuster in Abb. 7.7b und 7.12: S: Substrat; F: Schicht; I: identifiziert.

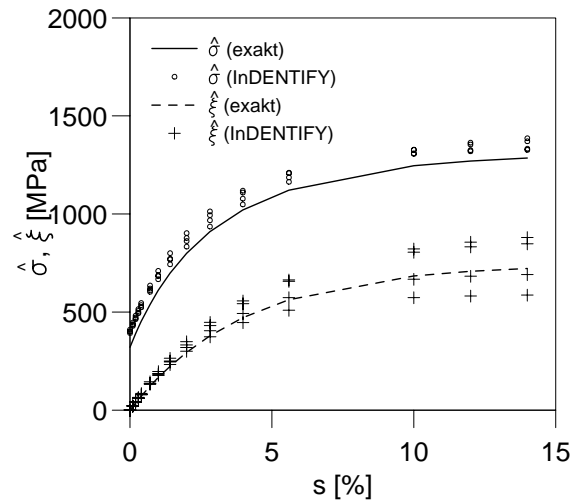


Abbildung 7.13: Mit InDENTIFY aus den fiktiven Eindringtiefe-Last-Trajektorien des Schichtmaterials identifizierte  $\hat{\sigma}(s)$ - und  $\hat{\xi}(s)$ -Verläufe. Die Beispiele entsprechen dem Verifikationsmuster in Abb. 7.7c.

S/F/I	$h_t^*$ [-]	$E$ [GPa]	$k_0$ [MPa]	$\sigma'$ [MPa]	$\Delta\Sigma$ [MPa]	$\xi'$ [MPa]	$\Delta\xi$ [MPa]
S	-	200	153	29077	79	9522	39
F	-	200	320	31554	784	14100	542
I	0.02	196	401	28190	777	15710	436
I	0.04	186	410	32020	748	16020	516
I	0.06	196	400	33250	763	16720	640
I	0.08	187	393	32930	786	15470	672
I	0.10	197	423	23320	755	15590	639

Tabelle 7.4: Verwendete und identifizierte Materialparameter für das Verifikationsmuster in Abb. 7.7c und 7.13: S: Substrat; F: Schicht; I: identifiziert.

## 7.5 Abschließende Bemerkungen

Die Untersuchungen dieses Kapitels haben gezeigt, daß die mechanischen Eigenschaften einer dünnen Schicht in Form der fiktiven Eindringtiefe-Last-Trajektorie und die Materialparameter mit Hilfe von Neuronalen Netzen ermittelt werden können.

Der Schlüssel ist die Annahme einer fiktiven Eindringtiefe-Last-Trajektorie für ein homogenes Material, von dem angenommen wird, daß dieses dieselben Eigenschaften besitzt, wie das Material der realen Schicht. Die Beispiele haben belegt, daß dieser Zugang zur Lösung dieses komplizierten inversen Problems eine enorme Vereinfachung darstellt, wodurch die Realisierung erst möglich wird. Der Unterschied im Vergleich zum konventionellen Vorgehen wird noch einmal in Abb. 7.14 verdeutlicht. Aufgrund der zusätzlichen Daten aus der Trajektorie des unbeschichteten Substrats ist das Neuronale Netz IP2 in der Lage, die Substrateffekte über der gesamten Eindringtiefe herauszufiltern, womit IP1 unter Erfüllung aller Voraussetzungen und Annahmen auf das Ergebnis von IP2 angewendet werden kann. Dies wird an den Verläufen deutlich, die die korrekten Parameter der Schicht in einer von der Eindringtiefe unabhängigen Weise repräsentieren.

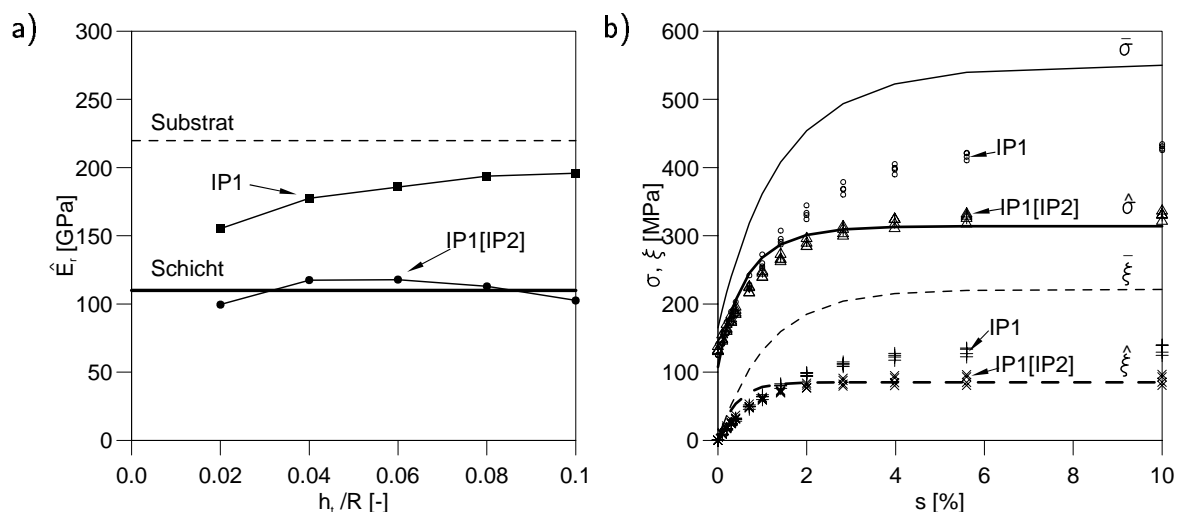


Abbildung 7.14: Identifikation nach konventioneller Vorgehensweise (IP1) bzw. mit Hilfe der fiktiven Trajektorie der Schicht (IP1[IP2]): a) reduzierter Modul; b) plastische Eigenschaften.

Natürlich müssen weitere Schritte folgen, um die Methode insgesamt praxistauglich zu machen. Hierzu gehören die Erweiterung auf viskoplastisches Materialverhalten sowie die Berücksichtigung der Schichteigenspannungen, welche das plastische Fließen begünstigen oder hemmen [9, 115]. Hierbei können die Schichteigenspannungen jedoch als bekannt behandelt werden, da diese durch andere Methoden, wie z.B. durch die Krümmung des Substrates (siehe z.B. [35, 104]) oder durch Ausnutzen des linearen Terms in (3.1) beim Bulge-Test [10] ermittelt werden können.

## 8 Zusammenfassende und abschließende Bemerkungen

Ziel dieser Arbeit war es zu zeigen, wie Neuronale Netze bei nichtlinearen Problemen der Mechanik angewendet werden können. Den Ausgangspunkt bildet die Fähigkeit der Neuronalen Netze, einen unbekanntem Zusammenhang anhand endlich vieler punktweise gegebener Beispiele durch ein Trainingsverfahren zu erlernen.

Beim Trainieren eines Neuronalen Netzes wird eine flexible Funktion an den unbekanntem (aber durch Beispiele gegebenen) Zusammenhang mit Hilfe eines speziellen Optimierungsalgorithmus angepaßt. Dies geschieht in der Form, daß das bestehende Netz für gegebene Eingabedaten ausgewertet wird, der Ausgabevektor mit dem gewünschten Ausgabevektor verglichen wird und entsprechend die im Netz enthaltenen Parameter so verbessert werden, daß der Fehler kleiner wird. Bis zu diesem Punkt entspricht dies einem konventionellen Optimierungsverfahren. Neuronale Netze erlernen auf diese Weise mit Hilfe einer größeren Zahl von Beispielen einen Zusammenhang. Existieren Mehrdeutigkeiten oder Unvollständigkeiten, so ist das Neuronale Netz, aufgrund seiner Eigenschaft eine Funktion zu sein, nie in der Lage, alle Beispiele gleichzeitig korrekt wiederzugeben. Somit gewinnt man bereits während des Trainings des Netzes Aufschluß darüber, ob der zu erlernende Zusammenhang eindeutig und vollständig formuliert ist. Das Neuronale Netz selbst gibt somit dem Anwender die Hinweise, bezüglich welcher Ausgabegröße fehlende Information zu ergänzen ist.

Ein einmal trainiertes Neuronales Netz benötigt keine weiteren Simulationen oder Experimente, um Lösungen zu erzeugen. Bei Prädiktionsproblemen können damit Experimente oder numerische Simulationen ersetzt werden. Inversionsaufgaben, die bislang mit rechenintensiven Optimierungsverfahren gelöst wurden, sind ebenso mit Neuronalen Netzen lösbar. Dies jedoch mit dem Unterschied, daß (unter Verwendung einer stetig differenzierbaren Aktivierungsfunktion) Neuronale Netze eine eindeutige, stetig differenzierbare Funktion darstellen. In beiden Fällen profitiert man von der hohen Verarbeitungsgeschwindigkeit der Neuronalen Netze, weswegen viele Aufgaben überhaupt erst realisierbar sind. Hierzu zählen z.B. Regelungsaufgaben (Prädiktion des Systemverhaltens in Echtzeit) oder die physikalisch sinnvolle Temperaturinterpolation der Materialparameter in Finite Elemente Programmen (kontinuierliche Inversion).

In dieser Arbeit wurde von diesen neuen Möglichkeiten in systematischer Weise Ge-

brauch gemacht. So wurde gezeigt, wie unter Zuhilfenahme der Modellgleichungen die Prozeßführung zu wählen ist, damit die identifizierten Materialparameter im Rahmen der Identifikationsgenauigkeit eindeutig und somit physikalisch sinnvoll sind. Zusätzlich besteht hierbei die Möglichkeit, gezielt Randbedingungen vorzugeben. Als Beispiel hierzu kann die korrekte Wiedergabe Steigung im Lastumkehrpunkt bei zyklischer Belastung oder die Aufteilung der statischen Spannung genannt werden.

Aus den aufgezeigten Beispielen wird deutlich, daß die Erstellung eines Neuronalen Netzes ein iterativer Prozeß ist. Es findet ein ständiger Austausch zwischen dem Neuronalen Netz und dem Anwender statt, bei dem beide einem Lernprozeß unterworfen sind. Die Qualität der gefundenen Lösung bei komplexen Problemen hängt daher von der Kreativität und der Erfahrung des Anwenders ab. Wie es an Beispielen gezeigt wurde, können dabei unterschiedliche Maßnahmen ergriffen werden, die das Neuronale Netz beim Lernen unterstützen bzw. entlasten. Hierzu zählt die Ausnutzung von Sonderfällen, empirischen Lösungen, existierenden Modellen, Korrelationen, usw. Auf diese Weise stellen die Neuronalen Netze eine Korrektur der verwendeten Näherungen dar. Die Näherungen haben dabei gleichzeitig eine regularisierende Wirkung und ermöglichen eine Gültigkeit der Identifikation weit über den beim Training betrachteten Bereich hinaus. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit bildet die Aufspaltung in sinnvolle Teilprobleme. Letzteres wurde demonstriert durch die Einführung der fiktiven Eindrucktiefe-Last-Trajektorie (siehe Kapitel 7) oder bei der schrittweisen Identifikation, getrennt nach Phänomenen in Kapitel 4 und 5. Noch einen Schritt weiter führte Kapitel 4, wo diese Teilprobleme (Ermittlung der Parameter der Plastizität sowie der statischen Erholung) in die Bestimmung der Werte der inneren Variablen und die darauf aufbauende Identifikation der Materialparameter untergliedert wurden.

Ob für ein bestimmtes Problem ein Neuronales Netz verwendet werden sollte, muß natürlich von Fall zu Fall entschieden werden. Bei direkten Problemen lassen sich viele Anwendungen mit einfachen Modellen oder Simulationen ebenso lösen, bei einmalig zu lösenden inversen Problemen können Optimierungsverfahren schneller zum Ziel führen. Für anspruchsvolle Probleme mit besonderen Anforderungen, wie z.B. einer schnellen Auswertung, einer möglichst allgemeingültigen Lösung, die vielfach angewendet werden kann oder die Gewinnung einer Prozeßführung, die Materialparameter eindeutig identifizierbar macht, stellen die Neuronalen Netze ein wertvolles Werkzeug dar.



# Literaturverzeichnis

- [1] ABU-MOSTAFA, Y.S.: *Learning from Hints in Neural Networks*. Journal of Complexity **6** 192–198, 1990.
- [2] ADELI, H. and A. KARIM: *Neural network model for optimization of cold-formed steel beams*. Journal of Structural Engineering - American Society of Civil Engineers **123** 1535–1544, 1997.
- [3] AL-MASHOUQ, K.A. and I.S. REED: *Including Hints in Training Neural Nets*. Neural Computation **3** 418–427, 1991.
- [4] ATKINS, A.G. and D.T. TABOR: *Plastic indentation in metals with cones*. J. Mech. Phys. Solids **13** 149–164, 1965.
- [5] BAUMEISTER, J.: *Stable Solution of Inverse Problems*. Vieweg, Braunschweig, 1987.
- [6] BEAMS, J.W.: *Mechanical properties of thin films of gold and silver*. Structure and Properties of Thin Films, Proceedings of an International Conference held at Bolton Landing, New York, Edited by C.A. Neugebauer, J.B. Newkirk, D.A. Vermilyea, pages 183–192, 1959.
- [7] BHATTACHARYA, A.K. and W.D. NIX: *Analysis of elastic and plastic deformation associated with indentation testing of thin films on substrates*. Int. J. Solids Structures **24** 1287–1298, 1988.
- [8] BOER, R. DE: *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1982.
- [9] BOLSHAKOV, A., W.C. OLIVER and G.M. PHARR: *Influences of stress on the measurement of mechanical properties using nanoindentation: Part II. Finite element simulations*. J. Mater. Res. **11** 760–768, 1996.
- [10] BROMLEY, E.I., J.N. RANDALL, D.C. FLANDERS and R.W. MOUNTAIN: *A technique for the determination of stress in thin films*. J. Vac. Sci. Technol. B **1** 1364–1366, 1983.

- [11] BRONSTEIN, I.N und K.A. SEMENDJAJEW: *Taschenbuch der Mathematik, 23. Auflage*. Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 1987.
- [12] CSIRO AUSTRALIA, DIVISION OF APPLIED PHYSICS: *Operating Manual UMIS 2000*, 1993.
- [13] CERN: *MINUIT Function Minimization and Error Analysis, Reference Manual*, Application Software Group, Computing and Networks Division, Geneva, Switzerland, 1992.
- [14] DENG, X. und Q. WANG: *Crack detection using spatial measurements and wavelet analysis*. International Journal of Fracture **91** L23–L28, 1998.
- [15] DIEGELE, E., W. JANSOHN und CH. TSAKMAKIS: *Integration of finite deformation plasticity and viscoplasticity laws exhibiting nonlinear hardening rules*. Computational Mechanics, to appear, 2000.
- [16] DIEGELE, E., ST. HARTMANN und CH. TSAKMAKIS: *Representative examples for two finite plasticity laws exhibiting nonlinear hardening rules*. Computational Mechanics, to appear, 2000.
- [17] DOERNER, M.F. und W.D. NIX: *A method for interpreting the data from depth-sensing indentation*. J. Mater. Res. **1** 601–609, 1986.
- [18] DUSZA, J., T. ESCHNER und K. RUNDGREN: *Hardness anisotropy in bimodal grained gas pressure sintered  $Si_3N_4$* . Journal of Materials Science Letters **16** 1664–1667, 1997.
- [19] EBNER, T., CH. MAGELE, B.R. BRANDSTÄTTER und K.R. RICHTER: *Optimization - utilizing feed forward neural networks for acceleration of global optimization procedures*. IEEE Transactions on Magnetics **34** 2928–2931, 1998.
- [20] EHRFELD, W., V. HESSEL, H. LÖWE, CH. SCHULZ, und L. WEBER: *Materials of liga technology*. In MICHEL, B. und T. WINKLER (Herausgeber): *Proceedings of the International Conference and Exhibition - Micro Materials*, Seiten 112 – 125, 1997.
- [21] EIRICH, F.R.: *Rheology Theory and Applications*. Academic Press, New York, 1956.



- [22] ELIAS, H.-G.: *An Introduction to Polymer Science*. VCH Weinheim, New York, 1997.
- [23] ENGELN-MÜLLGES, G. und F. REUTTER: *Numerik-Algorithmen mit Fortran 77 – Programmen*. B.I. Wissenschaftsverlag, 1993.
- [24] EVANS, A.G. and J.W. HUTCHINSON: *On the mechanics of delamination and spalling in compressed films*. Int. J. Solids Structures **20** 455–466, 1984.
- [25] FIELD, J.S. and M.V. SWAIN: *A simple predictive model for spherical indentation*. J. Mater. Res **8** 297–306, 1993.
- [26] FIESLER, E. and R. BEALE: *Handbook of Neural Computation*. Institute of Physics Publishing and Oxford University Press, 1997.
- [27] FINDLEY, W. N.: *Creep and relaxation of nonlinear viscoelastic materials : with an introd. to linear viscoelasticity*. Amsterdam : North-Holland, 1976.
- [28] FULCHER, J.: *Image processing*. In FIESLER, E. and R. BEALE (editors): *Handbook of Neural Computation, Release 97/1*, pages F1.6: 1–9. Institute of Physics Publishing and Oxford University Press, 1997.
- [29] GAO, H., C.-H. CHIU and J. LEE: *Elastic contact versus indentation modeling of multi-layered materials*. Int. J. Solids Structures **29** 2471–2492, 1992.
- [30] GREEN, A.E. and P.M. NAGHDI: *Some remarks on elastic-plastic deformations at finite strains*. Int. J. Eng. Sci. **9** 1219–1229, 1971.
- [31] GRYLLS, R.J.: *Mechanical properties of a high-strength cupronickel alloy-bayesian neural network analysis*. Materials Science and Engineering **A 234–236** 267–270, 1997.
- [32] HADDAD, Y.M.: *Viscoelasticity of Engineering Materials*. Chapman & Hall, 1995.
- [33] HARDING, J.W. and I.N. SNEDDON: *The elastic stresses produced by the indentation of the plane surface of a semi-infinite elastic solid by a rigid punch*. Proc. Camb. Phil. Soc. **43** 16–26, 1945.
- [34] HARDWICK, D.A.: *The mechanical properties of thin films: A review*. Thin Solid Films **154** 109–124, 1987.

- [35] HARPER, B.D. and C.-P. WU: *A geometrically nonlinear model for predicting the intrinsic film stress by the bending-plate method*. Int. J. Solids Structures **26** 511–525, 1990.
- [36] HAUPT, P. and CH. TSAKMAKIS: *On the application of dual variables in continuum mechanics*. Continuum Mech. Thermodyn. **1** 165–196, 1989.
- [37] HAUPT, P. and CH. TSAKMAKIS: *Stress tensors associated with deformation tensors via duality*. Arch. Mech. **48** 347–384, 1996.
- [38] HÄUSLER, O. und CH. TSAKMAKIS: *Torsion eines Kreiszyllinders bei großen Deformationen und inkompressiblem Materialverhalten*. FZKA-Bericht 5598, Forschungszentrum Karlsruhe, 1995.
- [39] HAYKIN, S.: *Neural Networks : A Comprehensive Foundation*. Macmillan, New York, 1994.
- [40] HERTZ, H.: *Über die Berührung fester elastischer Körper*. J. Reine Angew. Math. **92** 156–171, 1882.
- [41] HIBBIT, KARLSSON & SORESENSEN: *ABAQUS/Standard User's Manual Version 5.6, Volume I*, 1996.
- [42] HILL, R., B. STORÅKERS and A.B. ZDUNEK: *A theoretical study of the Brinell hardness test*. Proc. Roy. Soc. Lond. A **423** 301–330, 1989.
- [43] HOFFMANN, T., BÖHLE U., O. HÄUSLER und M. KAMLAH: *Finite-Elemente-Untersuchungen zu einem Mikrodrucksensor*. FZKA-Bericht 6261, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999.
- [44] HOFMANN, H.: *Modeling of the sintering behavior of  $Al_2O_3$  with a neural network*. Ceramic Engineering and Science Proceedings **18** 519–528, 1997.
- [45] HORIE, K.: *Introduction to photopolymers and microelectronics*. In HORIE, K. and T. YAMASHITA (editors): *Photosensitive Polyimides*, pages 1–11. Technomic Publishing Co. Inc., Lancaster, Basel, 1995.
- [46] HUBER, N.: *Zur Bestimmung von mechanischen Eigenschaften mit dem Eindruckversuch*. FZKA-Bericht 5850, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1996.

- [47] HUBER, N., D. MUNZ and CH. TSAKMAKIS: *Determination of Young's modulus by spherical indentation*. J. Mater. Res. **12** 2459–2469, 1997.
- [48] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *An experimental device for depth-sensing indentation tests in millimeter-scale*. J. Mater. Res. **13** 1650–1655, 1998.
- [49] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *A finite element analysis of the effect of hardening rules on the indentation test*. J. Eng. Mat. Tech. **120** 143–148, 1998.
- [50] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Experimental and theoretical investigation of the effect of kinematic hardening on spherical indentation*. Mech. Mat. **27** 241–248, 1998.
- [51] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural networks, Part I: The case of pure kinematic hardening in plasticity laws*. J. Mech. Phys. Solids. **47** 1569–1588, 1999.
- [52] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Determination of constitutive properties from spherical indentation data using neural networks, Part II: Plasticity with nonlinear isotropic and kinematic hardening*. J. Mech. Phys. Solids. **47** 1589–1607, 1999.
- [53] HUBER, N., A. KONSTANTINIDIS and CH. TSAKMAKIS: *Determination of Poisson's ratio by spherical indentation using neural networks, Part I: Theory*. J. Appl. Mech., in press, 2000.
- [54] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Determination of Poisson's ratio by spherical indentation using neural networks, Part II: Identification method*. J. Appl. Mech., in press, 2000.
- [55] HUBER, N., I. TSAGRAKIS and CH. TSAKMAKIS: *Determination of constitutive properties of thin metallic films on substrates by spherical indentation using neural networks*. Int. J. Solids Structures, in press, 1999.
- [56] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Finite deformation viscoelasticity laws*. Mech. Mat., **32** 1–18, 2000.
- [57] HUBER, N. and CH. TSAKMAKIS: *Discussion of finite deformation viscoelasticity laws with reference to torsion loading*. Cont. Mech. Thermodyn., in press, 2000.

- [58] HUGHES, T.J.R. and J. WINGET: *Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations in large-deformation analysis*. Int. J. Num. Meth. Eng. **15** 1862–1867, 1980.
- [59] HWU, Y.-J., Y.-T. PAN and J.G. LENARD: *A comparative study of artificial neural networks for the prediction of constitutive behaviour of HSLA and carbon steels*. Steel Research **67** 59–66, 1996.
- [60] ILZHÖFER, A.: *Eine Zugprüfvorrichtung zur Untersuchung mikrostrukturierter Proben*. FZKA-Bericht 6078, Forschungszentrum Karlsruhe, 1999.
- [61] JANSOHN, W., P. PIESCH, T.J. REINKE und CH. TSAKMAKIS: *Berechnung des Verformungsverhaltens einer Mikrobiegevorrichtung*. FZKA-Bericht 5527, Forschungszentrum Karlsruhe, 1995.
- [62] JANSOHN, W.: *Formulierung und Integration von Stoffgesetzen zur Beschreibung großer Deformationen in der Thermoplastizität und -viskoplastizität*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1996.
- [63] JIN, B.: *Control of weldpool width and cooling time in tig welding using a neural network model*. Welding International **10** 614–621, 1996.
- [64] JOHNSON, K.L.: *Contact Mechanics*. Oxford University Press, 1985.
- [65] KLINGBEIL, E.: *Tensorrechnung für Ingenieure*. B.I.-Wissenschaftsverlag, 1989.
- [66] KNAUSS, M.P., BAKER, S.P. und E. ARZT: *Biegeexperimente an Mikrobalken*. Materialprüfung **38** 326–328, 1996.
- [67] LAURA, P.A.A., V. SONZOGNI and E. ROMANELLI: *Effect of Poisson's ratio on the fundamental frequency of transverse vibration and buckling load of circular plates with variable profile*. Applied Acoustics – Oxford **74** 263–274, 1996.
- [68] LEMAITRE, J. and CHABOCHE, J.-L.: *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press, 1993.
- [69] LI, J. and T.W. CHOU: *Elastic field of a thin-film/substrate system under an axisymmetric loading*. Int. J. Solids Structures **34** 4463–4478, 1997.
- [70] LOGAR, J. and G. TURK: *Neural network as a constitutive model of soil*. ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik **77** 195–196, 1997.

- [71] LOUBET, J.L., J.M. GEORGES and G. MEILLE: *Vickers indentation curves of elastoplastic materials*. In BLAU, J.B. and B.R. LAWN (editors): *Microindentation Techniques in Materials Science and Engineering*, number 889 in *STP*, pages 72–89. American Society for Testing and Materials (ASTM), 1985.
- [72] LOUIS, A.K.: *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. Teubner, Stuttgart, 1989.
- [73] LOVE, A.E.H.: *Boussinesq's problem for a rigid cone*. *Quart. J. Math.* **10** 161–175, 1939.
- [74] MAHNKEN, R. and E. STEIN: *The identification of parameters for visco-plastic models via finite-element methods and gradient methods*. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **2** 597–616, 1994.
- [75] MAHNKEN, R. and E. STEIN: *A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method*. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **136** 225–258, 1996.
- [76] MAHNKEN, R. and E. STEIN: *Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations*. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **12** 451–479, 1996.
- [77] MAHNKEN, R.: *Theoretische und numerische Aspekte zur Parameteridentifikation und Modellierung bei metallischen Werkstoffen*. Habilitationsschrift, Universität Hannover, Inst. für Baumechanik und Numerische Mechanik, 1998.
- [78] MARIE, S., M. NADAL, M. DUCARROIR and E. FELDER: *Ceramic thin film thickness determination by nano-indentation*. *Journal of Materials Science Letters* **16** 722–725, 1997.
- [79] MARX, V.: *Simulation des Härteeindrucks an spröden Materialien*. Fortschrittsberichte VDI / Reihe 18, Mechanik/Bruchmechanik 222, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1998.
- [80] MENČIK, J., E. QUANDT and D. MUNZ: *Determination of elastic modulus of thin layers using nanoindentation*. *J. Mater. Res.* **12** 2475–2484, 1997.
- [81] MEYER, E.: *Untersuchungen über Härteprüfungen und Härte*. *Zeits. Ver. Dt. Ing.* **52** 82–85, 1908.

- [82] MOROZOV, V.A.: *Methods for Solving Incorrectly Posed Problems*. Springer, New-York, 1984.
- [83] MUKHERJEE, A., S. SCHMAUDER and M. RÜHLE: *Artificial neural networks for the prediction of mechanical behavior of metal matrix composites*. *Acta Materialia* **43** 4083–4092, 1995.
- [84] MUKHERJEE, A. and S.N. BISWAS: *Artificial neural networks in prediction of mechanical behavior of concrete at high temperature*. *Nuclear Engineering and Design* **178** 1–11, 1997.
- [85] MURAKAMI, Y. and K. MATSUDA: *Analysis of Vickers hardness by the Finite Element Method*. *ASME J. Appl. Mech.* **61** 822–828, 1994.
- [86] NOEVER, D., L. SIBILLE, R. CRONISE, S. BASKARAN, and A. HUNT: *Neural net formulations for organically modified, hydrophobic silica aerogel*. *Journal of Materials Research* **12** 1837–1843, 1997.
- [87] OCG: *PROBIMIDE 7000 Series, Self-Priming Photosensitive Polyimide Precursors*. Firmenschrift, OCG Microelectronic Materials AG Basel, 1995.
- [88] OLAF, J.M.: *Ein Verfahren zur Bewertung des mechanischen Verhaltens von Randschichten*. Dissertation, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg im Breisgau, 1992.
- [89] OLIVER, W.C., R. HUTCHINGS and J.B. PETHICA: *Measurement of hardness at indentation depths as low as 20 nanometers*. In BLAU, J.B. and B.R. LAWN (editors): *Microindentation Techniques in Materials Science and Engineering*, number 889 in *STP*, pages 90–108. American Society for Testing and Materials (ASTM), 1985.
- [90] OLIVER, W.C. and G.M. PHARR: *An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments*. *J. Mater. Res.* **7** 1564–1583, 1992.
- [91] PAPADRAKAKIS, M., N.D. LAGAROS and Y. TSOMPANAKIS: *Structural optimization using evolution strategies and neural networks*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **156** 309–334, 1998.

- [92] PERFETTI, R.: *Optimization neural network for solving flow problems*. IEEE Transactions on Neural Networks **6** 1287–1290, 1995.
- [93] PETZOLD, M., J. LANDGRAF, M. FÜTING and J.M. OLAF: *Application of atomic force microscopy for microindentation testing*. Thin Solid Films **264** 153–158, 1995.
- [94] ROSSI, R.E. and P.A.A. LAURA: *On the effect of Poisson ratio and certain approximation schemes on transverse vibration of thin rectangular plates with a free edge*. Journal of Sound and Vibration **194** 439–444, 1996.
- [95] ROSSI, R.E. and P.A.A. LAURA: *Symmetric and antisymmetric normal modes of a cantilever rectangular plate: Effect of Poisson's ratio and a concentrated mass*. Journal of Sound and Vibration **195** 142–148, 1996.
- [96] RUTHER, P., W. BACHER, K. FEIT, D. MAAS and W. MENZ: *Prototype of a microtesting system made by the liga process to measure the Young's modulus in cantilever microbeams*. Transactions of the ASME - G - Journal of Dynamic Systems Measurement and Control **119** 57–60, 1997.
- [97] SCHWEFEL, H.P.: *Numerical optimization of computer models*. Wiley, Chichester, 1981.
- [98] SCHWERTEL, J.: *Modellierung des einachsigen mechanischen Verhaltens von Werkstoffen durch viskoplastische Stoffmodelle*. Fortschrittsberichte VDI / Reihe 5, Grund- und Werkstoffe 306, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1993.
- [99] SEIBERT, T., J. LEHN, S. SCHWAN and F.G. KOLLMANN: *Identification of material parameters for inelastic constitutive models: Stochastic simulation for the analysis of deviations*. Cont. Mech. Thermodyn., in press, 2000.
- [100] SELIG, O. und R. TILGNER: *Thermomechanik dünner Polyimid-Beschichtungen für Siliziumwafer*. Feinwerktechnik Mikrotechnik Meßtechnik **104** 328–330, 1996.
- [101] SKINNER, A.J. and J.Q. BROUGHTON: *Neural networks in computational materials science: training algorithms*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering **3** 371–390, 1995.
- [102] SNEDDON, I.N.: *Boussinesq's problem for a rigid cone*. Proc. Camb. Phil. Soc. **44** 492–507, 1948.

- [103] SNEDDON, I.N.: *The relation between load and penetration in the axisymmetric Boussinesq problem for a punch of arbitrary profile*. Int. J. Eng. Sci. **3** 47–57, 1965.
- [104] STONEY, G.G.: *The tension of metallic films deposited by electrolysis*. Proc. R. Soc. London Ser. **A82** 172–175, 1909.
- [105] SUMPTER, B.G. and D.W. NOID: *On the use of computational neural networks for the prediction of polymer properties*. Journal of Thermal Analysis **46** 833–852, 1996.
- [106] SVENDSEN, B. and CH. TSAKMAKIS: *A local differential geometric formulation of stress-strain pairs and time derivatives*. Arch. Mech. **46** 49–91, 1994.
- [107] TABOR, D.: *Hardness of Metals*. Cambridge University Press, 1951.
- [108] TALJAT, B., T. ZACHARIA and F.M. HAGGAG: *Analysis of ball-indentation load-depth data: Part I. Determining elastic modulus*. J. Mater. Res. **12** 965–974, 1997.
- [109] TALJAT, B., T. ZACHARIA and F. KOSEL: *New analytical procedure to determine stress-strain curve from spherical indentation data*. Int. J. Solids Structures **35** 4411–4426, 1998.
- [110] TAY, K.M. and C. BUTLER: *Modelling and optimizing of a MIG welding process – A case study using experimental designs and neural networks*. Quality and Reliability Engineering International **13** 61–70, 1997.
- [111] TSAKMAKIS, CH.: *Über inkrementelle Materialgleichungen zur Beschreibung großer inelastischer Deformationen*. Dissertation, Technische Hochschule Darmstadt, 1987.
- [112] TSAKMAKIS, CH.: *Methoden zur Darstellung inelastischen Materialverhaltens bei kleinen Deformationen*. Habilitationsschrift, Universität-Gesamthochschule Kassel, 1994.
- [113] TSAKMAKIS, CH.: *Kinematic hardening rules in finite plasticity. Part I: A constitutive approach*. Continuum Mech. Thermodyn. **8** 215–231, 1996.
- [114] TSAKMAKIS, CH.: *Formulation of viscoplasticity laws using overstresses*. Acta Mechanica **115** 179–202, 1996.



- [115] TSUI, T.Y., W.C. OLIVER and G.M. PHARR: *Influences of stress on the measurement of mechanical properties using nanoindentation: Part I. Finite element simulations*. J. Mater. Res. **11** 752–759, 1996.
- [116] UNIVERSITY OF STUTTGART, INSTITUTE FOR PARALLEL AND DISTRIBUTED HIGH PERFORMANCE SYSTEMS (IVPR): *SNNS Stuttgart Neural Network Simulator, User Manual, Version 4.1*, 1995.
- [117] YAGAWA, G. and H. OKUDA: *Neural Networks in computational mechanics*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering **3** 435–512, 1996.
- [118] YOKATA, R.: *Thermal and mechanical properties of polyimides and control of high-order structures*. In HORIE, K. and T. YAMASHITA (editors): *Photosensitive Polyimides*, pages 49–95. Technomic Publishing Co. Inc., Lancaster, Basel, 1995.
- [119] YOSHIMURA, S., A. MATSUDA and G. YAGAWA: *New regularization by transformation for neural network based inverse analysis and its application to structure identification*. Int. J. Num. Meth. Eng. **39** 3953–3968, 1996.
- [120] YU, H.Y., S.C. SANDAY and B.B. RATH: *The effect of substrate on the elastic properties of films determined by the indentation test – axisymmetric boussinesq problem*. J. Mech. Phys. Solids **38** 745–764, 1990.
- [121] ZHANG, D. and M.I. ELMASRY: *A structure design approach using a priori knowledge for artificial neural networks*. Int. J. Modelling Simul. **17** 328–335, 1997.
- [122] ZIEREP, J.: *Ähnlichkeitsgesetze und Modellregeln der Strömungslehre*. Braun, Karlsruhe, 1982.



# Index

- aquibiaxialer Zugspannungszustand, 64, 66, 73, 82
- ABAQUS, 72, 135, 139, 144
- Abbildungsvorschrift, 34, 79
- Abbruchkriterium, 60
- Absenkung
  - der Druckkurve, 116
  - des Kontaktrandes, 168
- Abstiegsvektor, 28
- Abstraktionsvermögen, 1
- Abtastung, 17, 78, 106, 114
- Ähnlichkeitsgesetze, 188
- Aktivierung, 34
- Aktivierungsfunktion, 34, 35, 41, 42, 232
  - sigmoidale, 38, 43
  - stetig differenzierbare, 34, 37
- Allgemeingültigkeit, 19, 141, 149
- Aluminium, 146
  - härtbares, 148
- Aluminiumoxid, 5
- analytische
  - Bestimmung des Gradienten, 23, 37
  - Integration, 23
  - Lösung, 16, 186, 208
- Anfangsbedingung, 68
- ANN, 34
- ANN-Chips, 49
- Annäherung, 182
- Anpassung
  - der Lernrate, 41
  - der Parameter, 34
  - eines flexiblen Operators, 58
- anregend, 34
- Anwender, 233
- Anzahl
  - der Ein- und Ausgabeneuronen, 109, 112, 117, 120, 154, 156, 168, 172, 193, 194, 197, 199, 200, 202, 222, 225
  - der Eingangsgrößen, 4
  - der Feedforward-Schritte, 39
  - der Identifikationen, 60
  - der Individuen, 30
  - der Iterationen, 31
  - der Materialparameter, 163
  - der Muster, 45
  - der Neuronen, 3, 79
  - der Parameter, 37, 149
  - der Schichten, 3, 36, 154, 156, 168, 172
  - der Simulationen, 60, 84, 103, 145, 191, 217
  - der Stützpunkte, 164
  - der synaptischen Verbindungen, 42
  - der Trainingsmuster, 91, 154, 156, 168, 172
  - der Verifikationsmuster, 154, 156, 168, 172

- Approximation, 4, 42, 54, 58, 197  
 Approximationscharakter, 58  
 äquidistant, 44, 114, 164, 199, 217  
 Armstrong-Frederick-Ansatz, 19, 146  
 Artificial Neural Networks, 34  
 Asymptotenkegel, 56  
 asymptotisch, 69, 74  
 Auflösung, 17, 44, 59  
 Aufschleuderverfahren, 82  
 Aufsetzpunkt, 73  
 Aufspaltung der Verfestigung, 98  
 Aufwand, 24, 39, 59, 60  
 Aufwölbung, 7, 154, 166, 168  
 Ausdehnungskoeffizient, 81  
 Ausgabedaten, 7, 35, 42–44, 46, 49, 92,  
     103, 106, 153, 177  
 Ausgabedefinition, 49, 52, 78, 108, 111,  
     117, 119, 123, 124, 127, 135, 145,  
     153, 154, 156, 167, 171, 174, 221,  
     224  
 Ausgabegröße, 38, 49, 232  
 Ausgabeneuron, 35, 42, 43, 45, 54, 117,  
     119, 120, 167  
 Ausgabeschicht, 35, 37, 38, 79  
 Ausgabevektor, 78, 232  
     gewünschter, 37  
     korrekter, 36  
 Ausgabewert, 43, 44, 46, 49, 50  
 Ausgang, 50, 56, 197  
     des Neurons, 34  
 Ausgangsgrößen, 16, 44, 185  
 Ausgangslänge, 85  
 Ausgangsquerschnitt, 85  
 Ausrichtung, 81  
 Backpropagation, 37, 39  
 Basissystem, 8  
 Basisvektoren, 8  
 Batch-Verfahren, 41  
 Bauschinger-Effekt, 146  
 Bearbeitung, 15  
 Begrenzung  
     der isotropen Verfestigung, 126  
     der kinematischen Verfestigung, 126  
     der Überspannung, 128  
     der Verfestigung, 88  
 Belastung, 80, 185  
     elastische, 185  
     fiktive elastische, 187  
     plastische, 185  
 Belastungsart, 73  
 Belastungsdaten, 196–198  
 Belastungsgeschwindigkeit, 67, 68, 75, 99  
 Belastungskurve, 80, 143, 148, 158–161,  
     165, 167, 171, 178, 179, 181, 189,  
     192, 196, 197, 199, 218–222, 224  
 Belastungskurvenform, 224  
 Belastungsphase, 106  
 Belastungsphasen, 99  
 Berechnungsmethoden, 15  
 Beschichtungen, 208  
 Beton, 5  
 Betrieb, 73, 82, 144  
 Biegebalken, 65  
 Biegeexperiment, 65  
 Bildverarbeitung, 143  
 Biologie, 34  
 biologische Evolution, 30  
 biologische Nervenzellen, 34  
 Boussinesq-Lösung, 209  
 Brinellhärte, 142

- Bruchdehnung, 81
- Bruchspannung, 81
- Buckle-Regel, 216
- Bulge-Test, 64, 66, 231
- bulk, 208
- Bulk-Material, 208, 212, 214
- Bulk-Schichtmaterial, 218
  
- Cauchy'scher Spannungstensor, 71
  - gewichteter, 13
- Chaboche-Modell, 24
- chemische Zusammensetzung, 15
- Clausius-Duhem-Ungleichung, 86
- Computermodelle, 1
  
- Dämpfer, 67, 68
- Dämpfung, 25, 39
- Dämpfungsparameter, 32
- Daten, 1, 5
  - Aufbereitung, 6, 42, 49, 52, 207
  - experimentelle, 112
  - Interpretation ungenauer, 62
  - mit Rauschen, 62
- Datenbasis, 84, 105, 126, 149
- Datenerfassung, 131
- Datenerfassungsrate, 131
- Default-Werte, 42
- Deformation, 10, 64, 73, 76, 165
- Deformationen, 144
  - Beschreibung, 8, 9
  - eindimensionale, 91
  - einfache, 90
  - elastisch-plastische, 144, 182
  - elastische, 182, 206
  - große, 7, 11, 73, 86
  - große plastische, 143
  - homogene, 83, 86, 91
  - inhomogene, 86, 143, 145, 161
  - irreversibler Anteil, 13
  - kleine, 51, 67, 83, 93, 143
  - kleine elastische, 90, 209
  - kleine plastische, 97, 127
  - lokale, 142
  - plastische, 142, 143, 146, 161, 163, 165, 184, 187
  - reversibler Anteil, 13
  - zyklische, 144
- Deformationsfeld, 7
- Deformationsgradient, 10
  - Eigenschaft, 10
  - materielle Zeitableitung, 11
  - multiplikative Zerlegung, 11
- Dehngeschwindigkeit, 138
- Dehnrage, 84, 93, 98, 110
- Dehnratenänderung, 99, 138
- Dehnratenverhältnis, 99
- Dehnschwingbreite, 114
  - plastische, 106
- Dehnung, 67, 69
  - logarithmische, 85
  - repräsentative, 165
  - wahre, 85
- Dehnungs-Spannungs-Trajektorie, 84, 93, 125, 128, 133, 225
- Dehnungsamplitude, 19, 99, 106, 114
- Dehnungsdaten, 105
- Dehnungsgeschwindigkeit, 68, 99
- Dehnungsgeschwindigkeitstensor, 11
- dehnungsgesteuert, 68, 98
- Dehnungsmeßstreifen, 66
- Dehnungswerte, 131

- Dendriten, 34
- Detektion von Rissen, 16
- deterministische Systeme, 2
- Deviator, 9, 71
- Diamantspitze, 65
  - kugelförmige, 73
- Dichte der Daten, 44, 56
- Differentialgleichung, 21–24, 51
  - für die isotrope Verfestigung, 90
  - für die kinematische Verfestigung, 98
  - für die Überspannung, 94
- Differentialgleichungssystem, 24, 51, 97
- Differenzenquotient, 119
- Dimension, 17, 34, 59, 60
- Dimensionalität, 1
- Dimensionsanalyse, 50, 145, 163, 186
- dimensionsbehaftete Größen, 78
- dimensionslose
  - Ausgabewerte, 49
  - Darstellung, 220
  - Eindrucktiefe, 170
  - Hysterese, 222
  - Kenngröße, 50
  - Last, 147
  - Öffnung, 147, 153
  - Weite, 147
- Dimensionsmatrix, 50
- direktes Problem, 1, 2, 4–6, 15–17, 41, 44, 212, 214, 233
- Diskretisierung, 149, 189
  - der Oberfläche, 171
- Dissipationsungleichung, 86, 87
- Drei-Parameter-Modell, 67–69, 76, 77
  - verallgemeinertes, 69–71
- dreidimensionale Formulierung
  - des Drei-Parameter-Modells, 71
- dreidimensionale Strukturen, 64
- Druck, 64
- Druckdifferenz, 66
- Druckeinlaßöffnung, 73
- Druckkurve, 102, 116
- Druckphase, 114, 138
- Druckunterschied, 66
- Druckverteilung, 74
- duale
  - Dehnungsgeschwindigkeiten, 13
  - Dehnungstensoren, 86
  - Dehnungsvariablen, 11
  - Spannungstensoren, 13
  - Spannungsvariablen, 11
  - Variablen, 8, 12
- duktil, 171
- dünne Schicht, 64, 65, 144, 181, 208, 230
- dyadisches Produkt, 9
- Eigenfrequenzen, 6
- einachsige Deformation, 83, 86
- einachsige Experimente, 141
- einachsiger Zug, 165, 177
- einachsiges Verhalten, 217
- eindeutige
  - Aufspaltung, 144
  - Ermittlung, 202
  - Lösbarkeit, 2
- Eindeutigkeit, 16, 17, 21, 46–48, 79, 83, 92, 206, 232
  - Herstellung, 2, 3, 7, 21, 53, 58, 84
- Eindeutigkeitsprobleme, 3, 21, 84
- eindimensionale
  - Deformationen, 91
  - Materialgleichungen, 7

- Minimierungen, 28
- Eindruck, 65, 73, 144, 181, 208
- Eindruckexperiment, 8, 142–144, 148, 150
- Eindrucksimulation, 7
- Eindrucktiefe, 7, 142, 144, 149, 150, 154, 157, 163, 164, 166–168, 170, 171, 174, 178, 181, 184, 186, 192, 194, 196–201, 203, 204, 206–208, 212, 213, 218, 220, 227, 230
  - dimensionslose, 146, 164, 170
  - kleine, 216
  - maximale, 146, 152, 153
  - verbleibende, 146, 184
- Eindrucktiefe-Last-Trajektorie, 7, 146, 157, 177, 189, 191, 203, 212, 214, 225, 227
  - des Schicht-Substrat-Verbundes, 8
  - dimensionslose, 164
  - fiktive, 8, 214
- Eindrucktiefenabhängigkeit, 167, 213, 217
- eindrucktiefengesteuert, 181
- Eindruckversuch, 144, 146, 160, 208
- Einflußgrößen, 206
- Eingabedaten, 3, 7, 42, 44, 46, 49, 50, 78, 103, 110, 166, 196, 197, 199, 205, 207, 220, 224, 232
- Eingabedefinition, 46, 49, 52, 56, 78, 108, 110, 115, 118, 121, 123, 127, 145, 153, 156, 159, 167, 170, 171, 174, 194, 197, 198, 200, 202, 220, 224
- Eingabegrößen, 182
- Eingabeneuron, 35, 43, 54, 123, 168, 172, 175
- Eingabeschicht, 35, 79
- Eingabevektor, 36, 50, 51, 55, 58
  - dimensionsbehafteter, 49
- Eingabewert, 43, 44
- Eingangsdaten, 35
- Eingangsgrößen, 1, 2, 4, 16, 44, 185, 189
  - des direkten Problems, 5, 6
- Eingangsparameter, 2
- Einheitstensor
  - 2. Stufe, 9, 71
  - 4. Stufe, 9
- Einschnürung, 86, 91
- Einsinken, 154, 166, 169
- Einstein'sche Summationskonvention, 8
- elastisch-plastische Prozesse, 87
- elastisch-plastischer Übergang, 101, 192, 196
- elastische Eigenschaften, 142, 147
- elastische Lösung, 211
- elastische Prozesse, 87
- elastische Verzerrungen, 85, 94
- elastischer Kontakt, 182
- elastisches Material, 143
- elastisches Materialverhalten, 169
- Elastizität, 51, 83
- Elastizitätsgesetz, 71
- Elastizitätsmodul, 81, 91, 93, 107, 109, 126, 143, 146, 158, 159, 164, 178, 181, 182
  - Bestimmung, 65
- Elastizitätstheorie, 206
- elektrisch isolierend, 66
- elektromagnetische Einflüsse, 17
- Elektromechanik, 51
- Elemente

achtknotige, 188  
 axialsymmetrische, 188  
 Eltern, 30  
 Empfindlichkeit, 197  
 empirische  
   Relationen, 51  
   Variation der Materialparameter, 76  
 empirisches Modell, 220  
 Entdimensionierung, 50, 52, 92, 103, 123,  
   124, 153, 154, 171, 205, 207, 220  
 Entlastung, 80, 159, 163, 185, 187, 191,  
   192, 194, 196, 197, 200, 204, 205  
   spontane, 93  
 Entlastungs-Wiederbelastungs-Zyklus,  
   150, 218, 227  
 Entlastungsdaten, 196, 205  
 Entlastungskurve, 142, 143, 146, 147,  
   163, 181, 192, 220  
 Entlastungssteifigkeit, 142, 143, 170,  
   171, 181, 218, 219, 221, 222  
 Entlastungssteigung, 158, 178, 196, 199  
 Epoche, 39, 42  
 Epochenzahl, 46, 109, 112, 117, 120, 193,  
   194, 197, 199, 200, 202, 222, 225  
 Erden, 5  
 Erfahrung, 1, 44, 51, 62  
 Erholungsbetrag, 124  
 Erholungseffekte, 7, 96, 110, 121, 124,  
   138  
 Erholungsparameter, 112, 123, 124, 135  
 Erholungsverlauf, 122  
 Erlernen, 39  
   der Trainingsmuster, 47  
   kontinuierlicher Zusammenhänge,  
     34, 41

Ermittlung  
   der inneren Variablen, 112  
   der Plastizitätsparameter, 98, 112,  
     118  
   der statischen Erholung, 121  
   der Viskositätsparameter, 110  
   des Elastizitätsmoduls, 107  
   des Gradienten, 24, 37, 38  
   eines Schätzwertes, 50  
   konjugierter Richtungen, 28  
   rekursive, 23  
   von Materialparametern, 17  
 Erwärmung, 82  
 Euklidische Norm, 9  
 Evolution, 30  
 Evolutionsgleichung  
   der isotropen Verfestigung, 88, 90  
   der kinematischen Verfestigung, 88,  
     90  
 Evolutionsgleichungen, 86, 91, 94, 127,  
   144  
   Analyse, 92  
   der isotropen Verfestigung, 96  
   Integration, 94  
 Evolutionsstrategie, 6, 30–32  
 Existenz, 16, 206  
 Experiment, 2, 5, 6, 15–18, 36, 64, 73,  
   74, 83–85, 98, 99, 103, 113, 116,  
   131, 133, 136, 138, 140–142, 144,  
   158, 161, 178, 183, 220, 232  
   besonders angepaßtes, 64  
   einachsig homogenes, 6, 7  
   inhomogenes, 6  
 experimentelle  
   Realisierung, 17



- Streuung, 196
- Unsicherheit, 20
- Exponentialfunktion, 58, 97
- Extrapolation, 34, 212, 213
- Extremwerte, 43
- Familie 1, 11, 12
- Familie 2, 11
- Federn, 64, 67
- Feedforward-Netze, 34
- Feedforward-Schritt, 36, 39
- Fehler, 24, 31, 50, 109, 110, 112, 117, 120, 126, 127, 131, 193, 194, 197, 199, 200, 202, 222
  - absoluter, 52
  - bezogener, 45
  - durch Overlearning, 48
  - Gradient des, 38, 40
  - in der Systemantwort, 17
  - Kompensation, 17
  - Meßfehler, 17
  - Modellabweichung, 18
  - numerischer, 52, 197
  - relativer, 50, 59
  - systematischer, 17
- Fehlerbeträge, 45
- Fehlereinflüsse, 18
- Fehlerfläche, 26
  - quadratische, 27
- Fehlerfortpflanzung, 17
- Fehlermaß, 41, 45, 52, 168
- Fehlerverteilung, 59
- Festigkeit, 81, 181
- Feuern, 34
- fiktive
  - Belastungskurve, 217, 218, 227
  - Eindrucktiefe-Last-Trajektorie, 214, 217, 230, 233
  - Entlastungssteifigkeit, 217
  - Hysterese, 217, 222, 224, 227
  - Schichtlast, 221
- fiktives Experiment, 136
- Filme, 208
- Filterung, 4
- Finite Elemente
  - Analyse, 165
  - Daten, 196
  - Lösungen, 187, 218
  - Methode, 86, 186, 214
  - Netz, 149, 170, 188
  - Programm, 23, 139, 144, 232
  - Simulation, 6, 73, 74, 79, 143, 145, 146, 149, 159, 160, 162, 164, 188, 190, 192, 197, 200, 202, 203, 211, 215
  - stochastische, 18
  - Studien, 208
- finite Vorwärtsdifferenzen, 23
- Flachproben, 81
- flexibler Operator, 34
- Fließfläche, 101, 113, 114, 117
- Fließfunktion, 89, 183, 188
- Fließradius, 113
- Fließspannung, 81, 115, 119, 121, 143, 146, 173, 174, 188, 212, 227
- Fließtiefe, 183, 184, 189, 194, 196, 199, 202, 207
- Flugweite, 31
- Folien, 64
- Föppl-Symbol, 93
- forminvariant, 12

- Formulierung, 3
  - der Ausgabedaten, 3
  - der Theorie, 11
  - dreidimensionale, 7
  - konstitutiver Gleichungen, 11
- freie Energiefunktion, 86–89
- Funktional, 16, 17
  
- Gehirn, 1
- Genauigkeit, 3, 49, 50, 55, 92, 136, 141, 168, 175, 178, 189, 192, 193, 196, 200–202, 205, 207, 208
  - Erhöhung, 3
- Generalisierung, 3, 46, 49, 103, 164, 200, 207
- Generalisierungsfähigkeit, 41, 47, 175
- Generierung
  - der Ein- und Ausgabedaten, 106
  - der Muster, 76, 84, 103, 149, 163, 164, 191, 197, 202, 216, 217
  - von Identifikationsmodulen, 85
- Geometrie, 64, 65, 74, 181, 185, 187, 218
  - kugelförmige, 182
- geometrisch ähnlich, 143, 212
- geometrische Kenngröße, 164, 212
- Gesamtspannung, 121, 177, 218
- Gesamtverfestigung, 173
- Gesamtverfestigungsverhalten, 159, 165
- Geschwindigkeit, 5
  - eines materiellen Punktes, 11
- geschwindigkeitsabhängige Effekte, 84
- Geschwindigkeitsabhängigkeit, 67, 99, 128
- Geschwindigkeitsgradient, 11
- gewalzte Proben, 6
- gewichteter Cauchy'scher Spannungstensor, 13
- Gewichtsreduktion, 15
- Gewichtung, 23, 59
- Glas, 211
- Glattheit, 41, 48
- Gleichgewichtsgerade, 69
- Gleichgewichtsmodul, 67, 81
- Gleichgewichtstrajektorie, 93
- Gleichgewichtswerte, 81
- Gleichgewichtszustand, 74
- Gleichmaßbereich, 85, 131
- gleichverteilt, 164
- globale Größen, 7, 65, 144, 192, 196, 208
- globaler Gradient, 41
- globales Minimum, 20
- Glühbehandlung, 148
- Gradient, 25
  - analytische Bestimmung, 23, 38
  - bezüglich der Lernrate, 40
  - bezüglich der Momentankonfiguration, 9
  - der Zielfunktion, 20, 22
  - des Fehlers, 38
  - globaler, 41
  - lokaler, 38
  - numerische Bestimmung, 24
  - rekursive Bestimmung, 23
- Gradientenverfahren, 6, 25, 32, 39
  - konventionelle, 37
  - ohne Dämpfung, 40
- Green'scher Verzerrungstensor, 10, 71
- große Deformationen, 7, 11, 73, 86
- Größeneffekte, 51
- GSL-Transformation, 44, 92, 152, 177

- GSL-Transformationsfunktion, 44, 153,  
154, 156, 167, 168, 170, 171, 174
- Gültigkeitsbereich, 49
- Güte  
der Identifikation, 59  
eines Individuums, 29
- Haftfestigkeit, 181
- Halbraum  
elastisch-plastischer, 190  
elastischer, 181
- Haltephase, 74
- Härte, 144, 208, 211, 212, 218, 227
- Härtemeßgerät, 6  
registrierendes, 73
- Härteverhältnis, 227
- hemmend, 34
- Herstellungsparameter, 5, 64
- Herstellungsverfahren, 15, 66, 81, 216
- Hesse-Matrix, 26
- Hidden-Layer, 35
- homogen, 6, 7
- homogene Deformation, 83, 86
- homogenes Material, 65, 142, 209, 213,  
214, 220
- Homogenität, 51
- Hyperboloid, 53–57  
einschaliges, 53  
Kontur, 53  
verallgemeinertes, 53  
zweischaliges, 53
- Hyperelastizität, 87
- Hysterese, 84, 126, 127, 136, 146, 150,  
156–159, 162, 163, 170, 171, 177,  
218, 221, 224, 225, 227  
dimensionslose, 222  
schmale, 154  
stabilisierte, 98, 99, 101, 102
- Hysteresebildung, 148
- Hysteresengeometrie, 147, 148, 170, 178,  
225
- Hysteresenzahl, 164
- ideale Plastizität, 169, 205
- Identifikation, 2, 4, 6, 7, 15, 51, 58–60,  
145  
der kinematischen Verfestigung, 146,  
147  
der Materialparameter, 6, 17, 73, 83  
der Verteilung der Plattendicke, 6  
der Verteilung des Elastizitätsmo-  
duls, 6  
des Rißwachstumsverhaltens, 6  
schrittweise, 83  
von Defekten, 6
- Identifikationsaufgabe, 36
- Identifikationsaufwand, 154
- Identifikationsexperiment, 136, 138
- Identifikationsfehler, 125, 196
- Identifikationsgenauigkeit, 109, 112, 117,  
120, 194, 232
- Identifikationskette, 120, 125, 177
- Identifikationsmethode, 19, 165, 203
- Identifikationsproblem, 64, 65
- Identifikationsqualität, 52, 60, 62, 91,  
128, 155, 156, 173, 178
- Identifikationsverfahren, 159
- Identifikationsvermögen, 178
- Identifikationsmodule, 85
- Implementation, 23, 144
- IDENTIFY, 177, 178, 213, 218, 227
- Indexschreibweise, 8

- indifferentes Minimum, 20
- Indifferenz, 20
- Individuum, 29, 30
- Informationsquellen, 50
- inhomogene
  - Belastung, 65
  - Deformation, 86, 143, 145, 161
  - Druckverteilung, 74
- inhomogener Balken, 6
- inhomogenes Experiment, 6, 7
- initialer Tangentenmodul, 95
- Inkompressibilität, 85
- innere Variablen, 19, 102, 112, 117, 120, 121
- Input-Layer, 35
- Input-Neuronen, 35
- Integration, 23, 68, 94, 95, 98
  - analytische, 23
  - effiziente, 90
  - numerische, 23, 90
  - partielle, 69
  - von konstitutiven Gleichungen, 23
- Integrationsalgorithmus, 23, 144
- Integrationskonstante, 97
- Integrationsverfahren, 23
- integrierender Faktor, 69
- Intelligenz, 3
- interner Spannungstensor, 86, 90
- Interpolation
  - lineare, 44, 107, 135, 197, 199, 205
- Interpolationsfähigkeit, 157
- Interpolationsfunktionen, 44
- Interpolationsverfahren, 196, 205
- interpolieren, 42
- Intervall, 42, 50
- Intervallgröße, 31
- invariant, 19, 147, 206
- invariante Maße, 163
- Invarianz, 13, 49, 178, 204
- Invarianzeigenschaften, 10
- Invarianzforderung, 12, 14
- Invarianzpostulat, 12
- Inverse, 9
- inverses Problem, 1, 2, 5, 6, 15–17, 58, 145, 182, 191, 206, 212, 214, 230
- Inversion, 206
- isotherme Prozesse, 86
- isotrope Verfestigung, 7, 83, 88–90, 95, 96, 98, 101, 112–115, 117, 119, 121–123, 126, 128, 133, 138, 139, 143, 144, 146, 148, 158, 159, 162, 163, 183, 188, 203, 215, 222
- Isotropie, 51, 86, 87
- Istwert, 131
- Iteration, 29, 31
- Iterationsschritt, 29
- Iterationsvorschrift, 23, 40
- iterative Methode, 171
- iterativer Prozeß, 233
- Kelvin-Element, 67, 71, 74
- Kenngrößen, 95, 103, 128, 171
  - dimensionslose, 186, 189
- Kinematik, 9
- kinematische Verfestigung, 7, 19, 83, 86, 88, 90, 95, 97, 98, 101, 112, 113, 115, 117, 119, 122, 123, 126–128, 139, 144, 146, 148, 158, 159, 162, 163, 173, 177, 183, 215, 222
- Klassen inverser Probleme, 5
- Klassifikation, 4, 42, 49, 103, 164

- kleine
  - Abmessungen, 6, 142
  - Deformationen, 51, 83, 143
  - Volumina, 64, 142, 208
- Kohlenstoffstähle, 5
- Kompensation, 17
- Kompositmodul, 209, 211
- Kompressionsbelastung, 73
- Kompressionsmodul, 72
  - spontaner, 72
- Konfidenzintervall, 53, 117, 120, 124, 155, 222, 225
- Konfiguration, 12
- konjugiert, 26
- konjugierte Richtung, 29
- konjugierte Spannung, 89
- Konjugiertheit, 28
- konstitutive Gleichungen, 23, 72, 90, 145, 181, 188
- konstitutives Modell, 21
- Kontakt, 170, 181
- Kontaktbereich, 182
- Kontaktdruck, 154
- Kontaktelemente, 171
- Kontaktfläche, 7, 142, 144, 153, 165, 218
  - effektive, 166, 167
  - geschätzte, 166
  - maximale, 188
  - tatsächliche, 168
- Kontaktgebiet, 165, 188, 189
- Kontaktproblem, 145, 188, 209
- Kontaktradius, 142, 143, 153
  - geschätzter, 166
  - tatsächlicher, 166, 168
- Kontaktrand, 7, 73, 166, 168
- Kontaktsteife, 171
- kontinuierliche Aussage, 41
- kontinuierliche Probleme, 42
- kontinuierlicher Zusammenhang, 34, 41, 46
- Kontinuumsmechanik, 8
- Kontrolle
  - der Allgemeingültigkeit, 19
  - des Lernfortschritts, 45
- Konvergenzgeschwindigkeit, 20, 25
- Konvergenzvergleich, 32
- Konvergenzverhalten, 32
- Konzept der dualen Variablen, 8, 11
- Koordinaten, 54
- Koordinatentransformation, 26
- Kopplung, 15, 51
- Körper, 6, 9
  - elastische, 182
  - halbunendlicher, 8
  - nicht konforme, 182
- Korrektur, 17, 51, 52, 233
- Korrelation, 44, 51, 84, 171, 174, 192, 193, 224, 233
- Kosten, 4
- Kraft, 7, 65, 74, 85, 144
- Kreuzung, 30
- Kreuzungsoperator, 30
- Kriechen, 75
- Kriechexperiment, 18, 83
- Kriechkurve, 76, 77, 79
- Kriechphase, 158
- Kriechprozeß, 69, 74
- Kriechverhalten, 79
- Kugel, 142, 215
- Kugeleindruck, 142, 145, 159, 183, 213

- Kugeleindruckexperiment, 7, 142, 144,  
 158, 181, 184  
 Kugelradius, 164, 213, 216  
 Kunststoff, 6  
 Kupfer-Nickel Legierungen, 5  
  
 Lagerungsbedingungen, 15  
 Lamé'sche Konstanten, 71  
 Längsdehnung, 21  
 Last, 142, 154, 181, 182, 196, 198, 208,  
 209, 218, 221  
 des Verbundes, 218  
 dimensionslose, 147  
 Last-Kontaktradius-Verlauf, 165  
 Lastaufbringung, 75  
 Lastgeschichte, 15, 16, 18, 19, 131, 138,  
 181, 185  
 Lastspiele, 98  
 Lastumkehr, 106  
 Lastumkehrpunkt, 106, 114, 119, 232  
 Lastverhältnisse, 167, 171, 197, 220  
 Lastzyklen, 138, 164  
 Layer, 35  
 Lerndauer, 48  
 Lernfortschritt, 45–47  
 Lerngeschwindigkeit, 40  
 Lernparameter, 25, 32, 41, 42, 58  
 Lernprozeß, 34, 37, 40, 46, 92, 233  
 Lernrate, 39, 41  
 individuelle, 40  
 Lernratenadaption, 40, 41  
 linear elastischer Körper, 71  
 linear unabhängige Kenngrößen, 50  
 lineare  
 Feder, 67  
 Interpolation, 44, 107, 135, 197, 199,  
 205  
 isotrope Verfestigung, 143, 183  
 kinematische Verfestigung, 146  
 Skalierung, 43  
 Verfestigung, 203, 205  
 lineare Verfestigung, 139  
 linearer Dämpfer, 67  
 Linearität, 51  
 Linearkombination, 28, 186  
 Literaturdaten, 76, 81  
 logarithmische Dehnung, 85  
 lokale Deformation, 73, 142  
 lokale Iterationen, 144  
 lokale Minima, 20  
 lokaler Gradient, 38  
 Luftfeuchte, 17  
  
 Makromoleküle, 81  
 Makroproben, 81  
 Mandel'scher Spannungstensor, 86–88,  
 90  
 Maschinennachgiebigkeit, 207  
 Maschinensteifigkeit, 142  
 Maschinensteuerung, 131  
 massiv, 208  
 Material, 185  
 elastisch-plastisches, 146, 181  
 Materialeigenschaften, 64, 211  
 Materialmodell, 15, 18, 21, 51, 67, 83, 86,  
 139, 203, 207, 212, 215  
 der Plastizität, 7, 144, 183  
 der Viskoelastizität, 6, 74  
 der Viskoplastizität, 7, 19, 86–91,  
 143, 159

- Materialparameter, 2, 6–8, 15–19, 72–76,  
78–80, 84, 85, 91, 103, 105, 128,  
135, 136, 144, 154, 159, 168, 177,  
181, 188, 192, 212, 214  
der Plastizität, 98, 121, 142, 143,  
208, 212  
der Schicht, 214, 218  
der statischen Erholung, 101  
der Viskosität, 92, 99, 126  
des Substrats, 218  
Identifikation, 17
- Materialparametersatz, 18, 77, 79, 138,  
144
- Materialparametervektor, 217
- Materialstreuung, 18
- Materialverhalten, 7, 8, 15, 16, 65, 74,  
84, 127, 188, 194, 207  
elastisches, 16, 169  
ideal plastisches, 169  
linear elastisches, 75, 80  
viskoelastisches, 67  
viskoplastisches, 6
- materielle  
Flächen, 10  
Körper, 9  
Linie, 10  
Punkte, 9–11, 168  
Zeitableitung, 9, 11
- maximale Eindringtiefe, 146, 153, 189,  
199
- Maximallast, 187, 220
- Maxwell-Element, 67, 71
- Meßdaten, 152
- mechanische Charakterisierung, 146  
mechanische Eigenschaften, 142  
bei kleinen Abmessungen, 6  
dünner Schichten, 8, 208
- mechanische Eigenschaften von  
Aluminiumoxid, 5  
Beton, 5  
Erden, 5  
Kohlenstoffstählen, 5  
Kupfer-Nickel Legierungen, 5  
Metall-Matrix Komposite, 5  
Polymeren, 5  
Silikon-Gel, 5
- mehrachsig Belastung, 71
- Mehrdeutigkeit, 232
- Mehrfachgewichtung, 59
- Membran, 64–66, 73–75, 82
- Meßbereich, 131
- Meßdaten, 105, 113
- Meßfehler, 17, 105, 112
- Meßrauschen, 110
- Metall, 144
- Metall-Matrix Komposite, 5
- Metalle, 83, 161, 178
- Methode der  
konjugierten Gradienten, 6, 26–29,  
32, 60  
konjugierten Variablen, 11
- Mikrobalken, 65
- Mikrobiegung, 64
- Mikrodrucksensor, 65, 66, 82
- mikroelektronische Komponenten, 49
- Mikroprüftechnik, 64
- Mikroskop, 73
- Mikrostrukturen, 66
- mikrostrukturierte Bauteile, 144
- Miniaturisierung, 64

- Minima, 20
- Minimierung, 37
  - der Zielfunktion, 20
  - eindimensionale, 28
- Minimum, 20, 25–27, 29, 41
  - Durchlaufen des, 48
  - globales, 20
  - indifferentes, 20
  - Krümmung im, 26
  - lokales, 20
- Mischungsformel, 220
- Mischungsregel, 209
- Mitteldehnung, 98
- Mittelpunktsregel, 23
- Mittelung, 17
- mittlerer Druck, 153, 165, 171, 174
- Modell von Chaboche, 83, 84
- Modellabweichung, 18, 112
- Modellantwort, 113
- Modellgleichungen, 232
- Moleküle, 82
- Molekülketten, 82
- Momentankonfiguration, 9, 10, 12–14, 90
- Montage, 15
- MSE-Wert, 45, 47, 48, 54, 55, 57, 109,
  - 112, 117, 120, 168, 172, 175, 193,
  - 194, 197, 199, 200, 202, 222, 225
- Multiplikative Verknüpfung, 9
- Muster, 36, 39, 41, 43–46, 52, 54, 76, 77,
  - 79, 119, 121, 164, 200
  - am Rand, 59
  - äquidistante, 217
  - Erzeugung, 53
  - zufällige, 217
- Mustererkennung, 49
- Mutation, 30
- Mutationsoperator, 30
- Nachkommen, 29, 30
- Näherungen, 51, 52
- Näherungslösungen, 7, 51, 52, 83, 91, 95,
  - 124, 141
- Nanoindentation, 181, 208
- Nanoindentation-Experiment, 65
- Nanoindentations-Experiment, 64
- Nanoindenter, 73, 142, 144
- Nennspannung, 18
- Nervenzelle, 34
- Netzstruktur, 3, 49
- Netzunabhängigkeit, 189
- Neuronale Netze, 1, 5, 7, 15, 34–62, 76,
  - 79, 83, 84, 92, 105, 109, 112, 117,
  - 120, 125, 127, 128, 133, 136, 141,
  - 145, 170, 202, 205, 207, 212, 216,
  - 217, 227, 232
- Neuronales Netz, 77, 108, 113, 123, 150,
  - 154, 157, 164, 166, 182, 191, 197,
  - 202, 219
  - AeNet, 166–168, 177
  - HystNet, 222, 225, 227
  - IP1, 213–215, 230
  - IP2, 215, 217, 220, 230
  - LoadNet, 222, 227
  - ModuliNet, 170, 173–175, 177
  - Set 1, 192–194, 199, 206
  - Set 2, 194, 196, 199, 200, 202
  - Set 3, 196, 199, 201, 202, 205
  - StressNet, 170, 172, 173, 175, 177
- Neuronen, 34
- Neuronenzahl, 35
- Nichteindeutigkeit, 20, 48, 83, 92, 155



- nichtlineare
  - Aktivierungsfunktion, 34
  - Inversionsaufgaben, 92
  - isotrope Verfestigung, 83, 143
  - kinematische Verfestigung, 83
  - Materialmodelle, 51
  - Probleme, 2, 8
  - Terme, 90
  - Verfestigung, 7, 19, 83, 84, 112, 114, 144, 146, 158, 171, 196, 203
  - Verteilung, 44
- nichtlinearer Operator, 214
- nichtlinearer Zusammenhang, 44
- Nichtlinearität, 15, 19, 44, 115, 152, 205
- Normale an materielle Flächen, 10
- Normalenregel, 89
- Normalenrichtung, 89
- Nulldurchgang, 52
- Nullpunktfehler, 207
- numerische
  - Daten, 197
  - Fehler, 52
  - Gradientenermittlung, 24
  - Implementation, 23
  - Integration, 23, 83, 86, 90
  - Lösung, 1, 5, 181, 190
  - Realisierung, 17, 31
  - Simulation, 232
  - Streuung, 196
  - Unsicherheiten, 20
- numerisches Verfahren, 16
- obere Schranke, 42
- Oberfläche, 170, 183
- Oberflächenelemente, 188
- Oberflächengeometrie, 144
- objektive Ableitung, 13, 14
- Öffnung, 147, 153, 162, 163, 171, 178, 209, 220, 224, 225
- Öffnungsverlauf, 156
- Oldroyd-Ableitung, 14
- Optimierung, 4, 5
  - von Stahlträgern, 5
- Optimierungsverfahren, 1, 2, 6, 15, 20–233
  - deterministische, 20, 22, 83
  - Eigenschaften, 6
  - stochastische, 20, 29, 60, 83
- optisches Verfahren, 144
- orthogonal, 29
- Ortsvektor, 9
- Oszillationen, 25, 41, 42
- Output-Layer, 35
- Output-Neuronen, 35
- Overlearning, 41, 42, 48
- Parameteridentifikation, 15, 21, 44, 83, 84
- Parameterraum, 26, 29
- Parametersatz, 18, 20, 76, 157, 160, 165, 177, 189
- Parametervektor, 20, 22, 23, 29, 32, 58
- partielle Integration, 69
- Pattern by Pattern-Verfahren, 39
- phänomenologische Effekte, 83
- Phasen, 65
- PI-Theorem, 50, 163
- Piola Verzerrungstensor, 11
- plastische
  - Bogenlänge, 88, 95, 166
  - Deformation, 122, 142
  - Dehnung, 114, 119, 166, 173, 177

- Inkompressibilität, 85
- Moduli, 173
- Zwischenkonfiguration, 86
- plastisches Fließen, 183, 186, 194, 199, 231
- plastisches Materialverhalten, 163
- Plastizität, 7, 11, 83, 94, 98, 144, 146, 158, 160
- Plastizitätsmodell, 165
- Plastizitätsparameter, 178
- Platin, 211
- Platte, 65, 66, 73–75, 82, 131
- Polarkoordinaten, 55
- Polyimid, 6, 64–66, 73, 82
- Polymer, 5, 66, 81
- Polypropylen, 81
- Population, 29–31
- Postulat von Ill'iushin, 89
- Potentialbeziehung, 87
- Prädiktion, 4, 5, 232
- Prädiktor-Korrektor, 144
- Preprozessor, 188
- Probe, 18, 81, 207
- Probengeometrie, 65
- Probenoberfläche, 143, 182
- Probenpräparation, 208
- Probenvolumen, 144, 208
- Prozeß, 17, 19–21, 79, 88, 92, 98, 105
- Prozeßführung, 16, 74, 84, 96, 136, 140, 163, 232, 233
- Prozeßgeschwindigkeit, 103
- Prüfgeräte, 64
- Prüfkörper, 73, 142, 182, 189, 207, 216
  - deformierbarer, 184
  - kugelförmiger, 143
  - pyramidenförmige, 142, 143
  - starrer, 189
- Prüfkörperdeformation, 142
- Prüfkörperform, 207
- Prüfkörpergeometrie, 142, 211
- Prüfkörperradius, 146, 153, 188
- Prüfmaschine, 131
- Prüfspitze, 74
- punktweise, 1, 5, 7
- punktweise Lösung, 181
- Pyramiden, 212
- Querdehnung, 21
- Querkontraktionszahl, 21, 65, 91, 140, 144, 164, 181, 182, 186, 192, 202, 205–207, 216
- Radius der Fließfläche, 89, 101
- Radius des Prüfkörpers, 146, 182
- Rampe, 131
- Randbedingungen, 15, 232
- Rang, 50, 186
- Raster-Kraftmikroskopie, 144
- Rauhigkeit, 171, 207
- Raum der Trainingsmuster, 105
- Raumtemperatur, 158
- Rauschen, 21, 62, 196, 197
- Reaktorbau, 131
- Rechenaufwand, 39
- Rechenzeit, 2, 5, 24, 177
- Recovery, 83
- Reduktion
  - der Schichtdicke, 211
  - der Simulationszahl, 103, 150
  - der Trainingsmusterzahl, 91
  - des Wertebereichs, 49, 197, 198

- Redundanz, 110, 200  
 reduzierter Modul, 65, 143, 144, 159,  
     170, 171, 173, 178, 181, 186, 189,  
     208, 209, 212, 213  
 Referenzkonfiguration, 9, 10, 15–17, 170  
 Regelgenauigkeit, 131  
 Regelung, 4  
 Regelungsaufgaben, 232  
 registrierende Härtemessung, 142  
 registrierendes Härtemeßgerät, 6, 73  
 Regler, 4  
 Regressionsanalyse, 166, 171  
 Regressionsparameter, 167  
 Regularisierung, 44, 92, 103, 170, 233  
 Reidentifikation, 59, 194  
 Rekonstruktion, 62  
 Relaxation, 94, 97, 98, 101, 102, 110, 112,  
     117, 121, 128, 131, 138, 163, 178,  
     179  
 Relaxationsdauer, 96, 98, 107, 110, 116,  
     121  
 Relaxationsendpunkt, 102  
 Relaxationsendpunkte, 160  
 Relaxationsfunktion, 70, 72  
 Relaxationskurve, 84  
 Relaxationsphase, 107, 158, 160  
 Relaxationsphasen, 99, 101  
 Relaxationsprozeß, 68, 96, 101  
 Relaxationsspanne, 116  
 Relaxationsverhalten, 72  
 Relaxationsverlauf, 136, 138, 139  
 Relaxationszeit, 161  
 repräsentative  
     Dehnung, 165  
     Spannung, 165, 166  
 Reproduzierbarkeit, 131  
 reversibel, 146  
 rheologische Modelle, 66  
 Robustheit, 21, 200, 205  
 ROM, 49  
 Rotation der Zwischenkonfiguration, 12  
 Rotationssymmetrie, 55  
 Rprop-Verfahren, 41  
 Rückskalierung, 43  
 Rückverformung, 146, 163  
 Runge-Kutta Verfahren, 91  
  
 Sättigung der isotropen Verfestigung, 99  
 Sättigungswert, 93, 96  
 Schädigung, 80  
 Schallemissionen, 6  
 Schalteigenschaften, 42  
 Schätzwert, 197, 207  
 Schätzwerte, 120  
 Scherung, 73  
 Schicht, 8, 35, 65, 81, 181, 208, 209, 211–  
     215, 217, 225, 227, 230  
     unendlich weiche, 220  
 Schicht-Substrat-System, 209  
 Schicht-Substrat-Verbund, 8, 211, 213,  
     214  
 Schichtdicke, 211, 215, 216, 227  
 Schichteigenschaften, 212  
 Schichteigenspannungen, 231  
 Schichtmaterial, 8, 144, 212, 217, 224,  
     227  
 Schichtmodul, 211  
 Schubeffekte, 76  
 Schubmodul, 72  
     spontaner, 72  
 Schwarmuche, 6, 31, 32, 60

- Schwellwert, 34, 107
- Schwingungsanalyse, 6
- Schwingungsprobleme, 181
- Sensitivitätsanalyse, 21
- Sigmoidalfunktion, 42
- Silikon-Gel, 5
- Siliziumwafer, 81
- Simulation, 84, 85, 125, 232, 233
- Simulationsaufwand, 59, 60, 163
- Simulationsbereich, 52, 103, 149
- Simulationsdaten, 105
- Simulationszahl, 60, 150
- Skalarprodukt, 9, 26, 29
- Skalierung, 43, 49
  - lineare, 43
- Skalierungsparameter, 43
- SNNS, 42, 45
- Sollwert, 131
- Sonderfälle, 7, 233
- Spannung, 67, 69
  - repräsentative, 165
- Spannungs-Dehnungs-Kennlinie, 143, 153, 159, 165, 171, 173, 174, 178, 208
- Spannungs-Dehnungs-Kurve, 142, 203
- Spannungs-Dehnungs-Punkte, 165, 166, 168
- Spannungsantwort, 68
- Spannungsdaten, 105
- Spannungsfeld, 16
- Spannungsinterpolation, 136, 138
- Spannungsleistung, 13
- Spannungsminimierung, 15
- Spannungstensor, 12, 13
  - Cauchy'scher, 13
  - gewichteter Cauchy'scher, 13
  - interner, 86
  - zweiter Piola-Kirchhoff, 14
- Spannungswerte, 131
- Spannungszustand, 66, 73
- spontane Entlastung, 93
- spontaner Elastizitätsmodul, 81
- spontaner Kompressionsmodul, 72
- spontaner Schubmodul, 72
- spontanes Elastizitätsgesetz, 68, 72
- spontanes Verhalten, 74
- Spur, 9
- Spur-Anteil, 71
- SSE-Wert, 45
- stabilisierte Hysterese, 99, 101, 102, 108, 113, 115
- Stahl, 146, 189
  - ferritischer, 131
- Standard Backpropagation, 37
- Standardexperimente, 84
- Starrkörperrotation, 12
- Startvektor, 32
- Startwert, 42
- statische Erholung, 7, 24, 83, 84, 95–134
- statische Spannung, 117
- statistische Verteilungen, 18
- steilster Abstieg, 25, 28
- Stempel, 209
- stetige Abhängigkeit, 16
- stochastische
  - Finite Elemente, 18
  - Methoden, 6
  - Optimierungsverfahren, 29
  - Verfahren, 20
- Störungen, 17

- Strahlungsöfen, 131
- Streuung, 79, 197, 200, 207, 212  
 der Daten, 98  
 der Materialeigenschaften, 18
- Struktur  
 der Differentialgleichungen, 21  
 der verdeckten Schichten, 55  
 des Materialmodells, 21  
 des Neuronalen Netzes, 54  
 dreidimensionale, 64
- Strukturoptimierung, 5
- Stuttgart Neural Network Simulator, 42
- Stützpunkte, 53, 58, 84, 103, 106  
 Wahl der, 23, 24, 217
- Substrat, 8, 144, 181, 208, 209, 211, 212,  
 214, 215, 217, 219, 220, 222, 225,  
 227, 231  
 unendlich weiches, 220
- Substrat-Curvature-Test, 64
- Substrateffekt, 209, 213, 227, 230
- Substratmaterial, 214, 217, 218, 224
- Substratmodul, 211
- Synapsen, 34
- synaptische Gewichte, 34, 37, 38, 40, 42,  
 79, 175
- Systemantwort, 16, 17, 19, 20, 24, 64, 73  
 gemessene, 17, 18, 32  
 nichtlineare Verteilung, 44  
 simulierte, 22
- Tangentenmodul, 139, 146, 183, 188, 206
- Tangentenvektor, 10
- Taylor-Reihe, 10
- technische Dehnung, 85
- technische Realisierbarkeit, 4
- technische Spannung, 85, 86
- Teilprobleme, 233
- Temperatur, 5, 17, 131, 134, 136
- Temperaturabhängigkeit, 18
- Temperaturbereich, 133
- Temperaturinterpolation, 135, 136, 138,  
 232
- Tensor  
 1., 2., 4. Stufe, 8, 91  
 orthogonaler, 11, 12  
 Rechenregeln, 8
- Tensor der kinematischen Verfestigung,  
 86, 88
- Theorie großer Deformationen, 86
- thermische Belastung, 142
- thermodynamisch konjugiert, 87
- thermodynamische Konsistenz, 7
- Thermomechanik, 51
- Totaldehnung, 114, 115
- Trägermembran, 66, 74
- Training, 5, 34, 46, 52, 54, 55, 60, 78–80,  
 92, 109, 112, 117, 119, 120, 154,  
 157, 164, 168, 193, 194, 202, 205,  
 232
- Trainingsalgorithmus, 3, 6, 36, 49, 92
- Trainingsbereich, 164
- Trainingsdaten, 51
- Trainingsdauer, 48, 57, 109, 112, 117,  
 120, 168, 172, 175, 193, 194, 197,  
 199, 200, 202, 222
- Trainingsfehler, 46–48
- Trainingsgrenzen, 207
- Trainingsmuster, 41–45, 47, 50, 53, 55,  
 58, 62, 78, 91, 103, 104, 108, 110,  
 117, 120, 121, 124, 125, 149, 154,  
 156, 164, 168, 172, 175, 191, 192,

- 197, 199, 200, 202, 222, 225  
 Generierung, 84  
 Trainingsraum, 53  
 Transformation, 90, 92  
 Translationstensor, 88, 89  
 Transposition, 9
- Überlebenswahrscheinlichkeit, 29, 30  
 Überspannung, 19, 93, 99, 101, 103, 106,  
 110, 113, 114, 117, 126–128, 161  
 Ultraschall, 6  
 Umgebungsmedium, 15  
 UMIS 2000, 73  
 unabhängige Information, 194  
 Unempfindlichkeit, 171, 202  
 Ungleichung, 88  
 Unsicherheiten, 18  
 numerische, 20  
 Unvollständigkeit, 20, 92, 114, 126, 155,  
 173–175, 193, 232
- Validierung, 19, 84, 127, 138, 178, 196,  
 203  
 Validierungsexperiment, 138  
 Validierungsmuster, 205  
 Vektor, 8, 9, 15  
 Vektorfunktion, 49  
 verbleibende Eindringtiefe, 146  
 Verbund, 181, 209, 212, 218–222, 224,  
 225  
 Verbundlast, 220  
 verdeckte Schicht, 35, 38, 54, 55, 79, 109,  
 112, 117, 120, 193, 194, 197, 199,  
 200, 202, 222, 225  
 Vereinfachung, 51, 52
- Verfestigung, 83, 84, 86, 88, 90, 95–99,  
 101, 104, 112, 120, 123, 126–128,  
 138, 143, 144, 148, 161, 182, 183,  
 193, 194, 203, 205  
 Begrenzung der, 146  
 isotrope, 139  
 lineare, 139  
 nichtlineare, 144, 146  
 Verfestigungseffekte, 212  
 Verfestigungseigenschaften, 122, 146,  
 167, 212, 213  
 Verfestigungsexponent, 143  
 Verfestigungsverhalten, 19, 116, 148  
 Verfestigungsverlauf, 138  
 Verformungsfeld, 143  
 Vergessen, 39  
 Verifikation, 19, 52, 79, 109, 112, 117,  
 120, 125, 154, 164, 168, 177, 193,  
 194  
 Verifikations  
 -muster, 59  
 Verifikationsfehler, 46–48  
 Verifikationsmuster, 45, 47, 48, 59, 79,  
 103, 104, 117, 120, 121, 124, 125,  
 149, 154, 156, 157, 168, 172, 175,  
 178, 191, 197, 199, 200, 202, 222,  
 225  
 Verschiebung, 65, 74, 75  
 Verschiebungs-Kraft-Trajektorie, 74  
 Verschiebungsfeld, 16  
 Verschiebungsvektor, 10  
 Verschmutzung, 73  
 Versteifung, 82  
 Versuchsanordnung, 73  
 Versuchseinrichtung, 65

- Versuchssteuerung, 106, 196  
 Verteilung, 18, 30, 92  
     nichtlineare, 44  
 Verteilung des relativen Fehlers, 109,  
     112, 117, 120, 155, 173, 222, 225  
 Verteilungsfunktion, 44  
 Vervollständigung, 4  
 Verzerrungsfeld, 16  
 Verzerrungsgeschwindigkeiten, 12  
 Verzerrungsmaß, 10, 11, 13  
 Verzerrungstensor, 10–12, 14, 71  
 vikoelastisches Fluid, 71  
 Viskoelastizität, 64  
 viskoplastisches Materialverhalten, 178,  
     231  
 Viskoplastizität, 7, 83, 84, 86, 143, 160  
 viskose Effekte, 94, 138, 158, 159, 163,  
     171, 178  
 viskoses Verhalten, 116  
 Viskosität, 83, 92, 99, 159, 160, 163  
 Viskositätsparameter, 83, 103, 117, 160  
 VLSI, 49  
 Vollbrückenschaltung, 17  
 vollständig, 146  
 Vollständigkeit, 3, 16, 17, 21, 46, 92, 206,  
     232  
     Herstellung, 21  
 Vollständigkeitsprobleme, 3  
 Volumeneinheit, 13  
 von Mises Fließfunktion, 89  
 Voraussage, 84, 136, 138  
 Vorgeschichte, 16  
 Vorhersage, 51  
 Vorspannung, 64  
 Vorwärtsdifferenzen, 23  
 Vorwissen, 3, 49, 50, 54, 56, 145, 152,  
     153, 182, 206, 220  
     Einbringen von, 3, 6, 7, 49, 52  
     Formulierung von, 52  
 Waben, 64  
 wahre Dehnung, 85  
 wahre Spannung, 85  
 Wahrscheinlichkeit, 30  
 Weite, 147, 156, 162, 163, 209, 224  
 Werkstoff, 15, 18, 64, 127, 196  
 Werkstoffkenngröße, 208  
 Werkstoffmechanik, 92  
 Werkstoffprüfung, 64  
 Werkstoffverhalten, 19  
 Wertebereich, 31, 50, 103, 108, 110, 224  
     der Ausgabedaten, 42, 49  
     der Materialparameter, 76  
     der Sigmoidalfunktion, 42  
     der Trainingsmuster, 50, 53  
 Wiederbelastung, 163  
 Wiederbelastungskurve, 146, 153  
 Wirbeltensor, 11  
 Zeit-Spannungs-Trajektorie, 84, 125, 128  
 Zeitabgleich, 131  
 zeitabhängiger  
     Kompressionsmodul, 72  
     Schubmodul, 72  
 Zeitableitung, 87, 89  
 Zeitdaten, 105  
 Ziehen, 82  
 Zielfunktion, 18, 20–22  
 zufällig, 103, 104, 164, 217  
 zufällige Richtungen, 31  
 Zufallsmuster, 164, 169, 217

- Zufallsvektoren, 31
- Zufallszahl, 30, 31, 62, 103
- Zugbelastung, 110, 113
- Zugexperiment, 18, 21, 91, 142
- Zugkurve, 84, 139
- Zugphase, 114
- Zugprobe, 85, 131
- Zugprüfmaschine, 131
- Zugversuch, 81
- Zusammenhang, 1–3, 5, 7, 46
  - Beschreibung, 1
  - eindeutiger, 48
  - expliziter, 171
  - Generierung, 3
  - Glattheit des, 48
  - kontinuierlicher, 34, 41, 46
  - nichtlinearer, 44
  - unbekannter, 53, 232
  - vorgegebener, 58
  - zu erlernender, 42
  - zugrundeliegender, 58
- zweiter Piola-Kirchhoff Spannungstensor, 86, 90
- Zwischenkonfiguration, 11–14, 86, 87
- Zwischentemperatur, 135, 136
- Zwischenwerte, 41
- Zyklen, 99, 150
- Zyklisierung, 19, 98, 101, 115, 119, 139
- zyklische Belastung, 83, 84, 106, 232
- zyklische Experimente, 148
- zyklische Verfestigungskurven, 84
- zyklisches Experiment, 18, 98