

Optimierungsstrategien zur Parameteridentifikation eines viskoelastischen Materialmodells für Epoxidharzklebstoffe

Jan Göhler*

Robert Bosch GmbH, Waiblingen

Zusammenfassung

Der immer stärker verbreitete Einsatz der Klebtechnik in der Automobilelektronik erfordert entsprechend den harten Anforderungen der Automobilhersteller eine zuverlässige Auslegung von Klebverbindungen. Grundlage für Zuverlässigkeitsbetrachtungen sind Finite Elemente Simulationen um kritische Belastungen in der Klebverbindung aufzuzeigen. Hierfür muss das Materialverhalten der Klebstoffe in Abhängigkeit der Temperatur und der Zeit bekannt sein. Im speziellen Anwendungsfall lassen sich die Klebstoffe mit viskoelastischem Materialverhalten beschreiben. Mittels dem Ansatz der Pronyreihenentwicklung ist das Materialverhalten der Simulation zugänglich. Für die Beschreibung des mechanischen Werkstoffverhaltens in großen Temperatur- und Zeitbereichen sind entsprechend viele Reihenelemente zu entwickeln, aus denen wiederum eine hohe Parameterzahl für das zugrunde liegende Materialmodell resultiert. Die durchzuführende Parameteridentifikation basiert auf einer nichtlinearen Kurvenanpassung zweier Funktionen an vorliegende Messwerte mit nur einem Parametersatz. Dieser Kurvenfit lässt sich als eine Optimierungsaufgabe darstellen. Die Schwierigkeit des Optimierungsproblems liegt in der Einhaltung einer strikten Randbedingung, welche die zu variierenden Parameter beinhaltet. Mit verschiedenen Optimierungsstrategien, wie Genetischer Algorithmen und Gradientenverfahren, wird ein sehr gutes Anpassungsergebnis erreicht. Gleichzeitig stehen die optimierten Parameter direkt als Input für die Simulation zur Verfügung. Die vorgestellte Methode zeigt eine automatisierte Parameteridentifikation viskoelastischer Materialdaten.

Keywords: Optimierung, Parameteridentifikation, Materialmodell, Viskoelastizität

*Kontakt: Dipl.-Ing. Jan Göhler, Robert Bosch GmbH, Zentralbereich Forschung und Vorausentwicklung, Kunststofftechnik, Alte Bundesstraße 50, D-71332 Waiblingen, E-Mail: jan.goehler@de.bosch.com

1 Einführung

Für die zuverlässige Auslegung automobiler Elektronikaufbauten ist die Beanspruchungsanalyse mittels Finite Elemente Berechnung ein heute breit eingesetztes Werkzeug. Hierfür ist die Kenntnis über das mechanische Verhalten der eingesetzten Werkstoffe notwendig. Für Metalle und Keramik sind diese weitgehend bekannt. Statt der klassischen Löttechnik werden heute in der AVT vermehrt elektrisch leitfähige Klebverbindungen zur Kontaktierung von Bauelement und Funktionssubstrat eingesetzt. Daneben sind noch weitere polymere Werkstoffe in der AVT beteiligt. Vorrangige Vertreter sind Moldmassen, Leiterplatten, Underfiller und Fixierklebstoffe. Für die Auslegung von neuen AVT-Lösungen im automotiven Anwendungsbereich sind Temperaturwechsel zwischen -40 °C und 150 °C zu berücksichtigen. Die zuvor genannten Polymere besitzen viskoelastisches Materialverhalten, welches wiederum stark temperaturabhängig ist. Aus diesem Grund ist es von großer Wichtigkeit, die Materialparameter des viskoelastischen Werkstoffmodells für den jeweiligen Stoff im gegebenen Anwendungsbereich zu bestimmen. Der Weg vom Experiment zum simulationstauglichen Input über Optimierungsstrategien wird im Folgenden vorgestellt.

2 Grundlagen

Viskoelastische Materialien zeigen in ihrem technischen Einsatzbereich Relaxations- respektive Kriechverhalten. So lässt sich der Spannungszustand in Abhängigkeit der Zeit t einer belasteten Probe durch folgende Integralgleichung beschreiben:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t E(t - \xi) \dot{\epsilon}(\xi) d\xi \quad \text{für} \quad -\infty < \xi \leq t \quad (1)$$

Diese Gleichung spiegelt ein kontinuierliches Relaxationsspektrum wieder. [1] Für die Finite Elemente Analyse ist jedoch eine Diskretisierung des Spannungsverlaufes notwendig. Durch Parallelschaltung mehrerer Maxwellelemente, bestehend aus jeweils Dämpfer und Feder (Abb. 1) lässt sich das Relaxationsspektrum mit hinreichender Genauigkeit beschreiben. Die mathematische Darstellung des verallgemeinerten Maxwellmodells lässt sich nach einiger Umstellung und Transformationen [1, 2, 3] mit Hilfe einer Prony Reihenentwicklung wie folgt realisieren.

$$\sigma(t)/\epsilon = E(t) = E_{\infty} + \sum_{i=1}^n E_i \cdot e^{-t/\tau_i} \quad (2)$$

Gleichung 2 beschreibt den zeitabhängigen E-Modul. Dabei ist E_{∞} als ausrelaxierter Modul zu verstehen, also die Restelastizität die auch nach unendlich langen Relaxationszeiten nicht mehr unterschritten wird, was bei hochvernetzten Polymeren wie Epoxidharzen typisch ist. E_{∞} ist in Abb. 1b zu den Maxwell-Elementen als parallel geschaltete Feder dargestellt. Um stark zeitaufwändige Relaxationstests zu umgehen, werden *Bulk*-Proben des ausgehärteten Klebstoffes einer *Dynamisch-Mechanischen-Analyse DMA* unterzogen. Dabei werden die Proben bei verschiedenen Frequenzen und Temperaturen schwellend auf

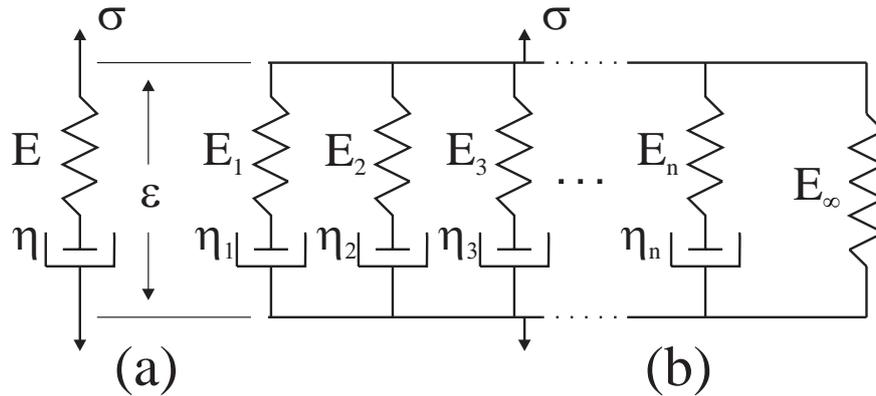


Abbildung 1:

(a) Maxwell-Element, bestehend aus einer linear elastischen Feder und einem Dämpfer. (b) Verallgemeinertes Maxwell-Modell bestehend aus n parallel geschalteten Maxwell-Elementen.

Zug belastet und mittels Kraft und Dehnungsmessung die elastischen Moduln berechnet. Die mechanische Antwort auf die zyklische Belastung ist für viskoelastische Materialien komplex. Man definiert die zwei Komponenten des komplexen Moduls (5) zu Speichermodul (3) und Verlustmodul (4).

$$E'(\omega) = E_0 + \int_0^\infty \dot{E}(\xi) \cos(\omega\xi) d\xi \quad (3)$$

$$E''(\omega) = - \int_0^\infty \dot{E}(\xi) \sin(\omega\xi) d\xi \quad (4)$$

Dabei steht ω als Kreisfrequenz und lässt sich über $\omega = 2\pi f$ aus der DMA Prüffrequenz f bestimmen. E' und E'' setzen sich wie folgt zum komplexen dynamischen Modul E^* zusammen:

$$E^*(\omega) = E'(\omega) + iE''(\omega) \quad (5)$$

Dabei spiegelt der Speicheranteil E' die Feder im Maxwell-Element wieder und steht für die elastische Spontanantwort des Systems. Der Verlustanteil E'' quantifiziert dagegen das Maß der Materialdämpfung und somit die Energiedissipation im Werkstoff. Beide Größen lassen sich wie der Relaxationsmodul in Form einer Reihenentwicklung als diskretisiertes Spektrum darstellen.

$$E'(\omega) = E_\infty + E_0 \sum_{i=1}^n \frac{\bar{e}_i \tau_i^2 \omega^2}{1 + \tau_i^2 \omega^2} \quad (6)$$

$$E''(\omega) = E_0 \sum_{i=1}^n \frac{\bar{e}_i \tau_i \omega}{1 + \tau_i^2 \omega^2} \quad (7)$$

Dabei stellen die Parameter \bar{e}_i in Gleichung 6 und 7 die auf $1 = E_\infty/E_0 + \sum \bar{e}_i$ normierten Moduln dar. Die Parameter \bar{e}_i und τ_i der Reihenentwicklung können direkt als Inputparameter für die Finite Element Simulation verwendet werden. Der in (6) und (7) auftretende Parameter E_0 ist als Initialmodul des Materials zu verstehen — das heißt, die

Steifigkeit bei unendlich schneller Belastung oder bei Temperaturen am absoluten Nullpunkt. Für die Simulation ist die Bekanntheit von einem der beiden Parameter E_0 bzw. E_∞ Voraussetzung. Sie lassen sich anhand Gleichung 8 [4] ineinander umrechnen.

$$E_0 = \frac{E_\infty}{1 - \sum_{i=1}^n \bar{e}_i} \quad (8)$$

Für ausreichende Werte von E' und E'' wird über die für amorphe viskoelastische Polymere zulässige *Zeit-Temperatur-Verschiebung* Masterkurven (Abb. 4 und 5) erstellt. Das Relaxationsverhalten lässt sich aus den Masterkurven für E' und E'' über eine Transformation in den Zeitbereich ableiten. Hierbei fällt auf, dass bei der Beschreibung des E-Moduls in Abhängigkeit der Zeit (9) exakt die gleichen Parameter wiederzufinden sind wie in den Gleichungen 6 und 7. Der Zusammenhang zwischen dem Relaxationsmodul (9) und dem komplexen Modul E^* kann über eine Fouriertransformation ermittelt werden. [1, 2, 3]

$$E(t) = E_\infty/E_0 + \sum_{i=1}^n \bar{e}_i \cdot e^{-t/\tau_i} \quad (9)$$

Dieser Zusammenhang erlaubt somit die direkte Bestimmung des Relaxationsmoduls $E(t)$, wenn mittels Kurvenanpassung ein guter Fit von (6) und (7) an die zugehörigen Masterkurven (vgl. Abb. 4 und 5) gefunden wird.

3 Optimierungproblem

Wie im vorangegangenen Kapitel bereits angesprochen ist für die Bestimmung des Relaxationsmoduls mittels Pronyreihenansatz eine nichtlineare Kurvenanpassung notwendig. Die Schwierigkeit der Anpassung liegt darin, dass gleichzeitig zwei Funktionen an zwei verschiedene Messreihen, jedoch mit ein und demselben Parametersatz gefittet werden müssen. Erschwerend kommt hinzu, dass für die vollständige Beschreibung des viskoelastischen Materialverhaltens der Klebstoffe im Temperaturbereich von -40 °C bis 150 °C bis zu 26 Pronyreihelemente anzusetzen sind. Bei zwei Parametern pro Reihenelement sind das 53 zu bestimmende Parameter (inkl. E_0 oder E_∞). Diese sehr parameterreiche Kurvenanpassung kann als ein Optimierungsproblem aufgefasst werden.

Die zu minimierende Zielfunktion lässt sich entsprechend folgender Gleichung darstellen.

$$\lg \chi^2 = \sum_{i=1}^M \frac{1}{\lg E_\infty^2} [(\lg E' - \lg \bar{E}')_i^2 + 10 \cdot (\lg E'' - \lg \bar{E}'')_i^2] \quad (10)$$

Hierbei sind E' , E'' als die berechneten Werte aus den Gleichungen 6 u. 7, und \bar{E}' , \bar{E}'' als die Messwerte der Masterkurven zu verstehen. Da sich bei Über- bzw. Unterschreiten der Glasübergangstemperatur T_G die Steifigkeit des Materials teilweise um mehr als zwei Größenordnungen ändert, werden die Komponenten der Zielfunktion (10) logarithmiert. Damit besitzt der niedermodulige Bereich oberhalb der Glasübergangstemperatur T_G die gleiche Wichtung wie der hochmodulige Bereich unterhalb von T_G . Des Weiteren

muss bei der Optimierung die Randbedingung

$$0 \stackrel{!}{=} 1 - \left(\frac{E_\infty}{E_0} + \sum_{i=1}^n \bar{e}_i \right) \quad (11)$$

entsprechend der Normierung aus Gleichung 11 eingehalten werden. Die Parametrisierung, die Implementierung der Zielfunktion und der Gleichheitsrandbedingung, wurden in *optiSLang* umgesetzt. Als Lösungsprozessor wird ein Fortranprogramm verwendet, welches $\lg \chi^2$ und die Randbedingung für jeden Optimierungslauf berechnet. Ein schematischer Ablauf der Optimierung ist Abb. 2 zu entnehmen.

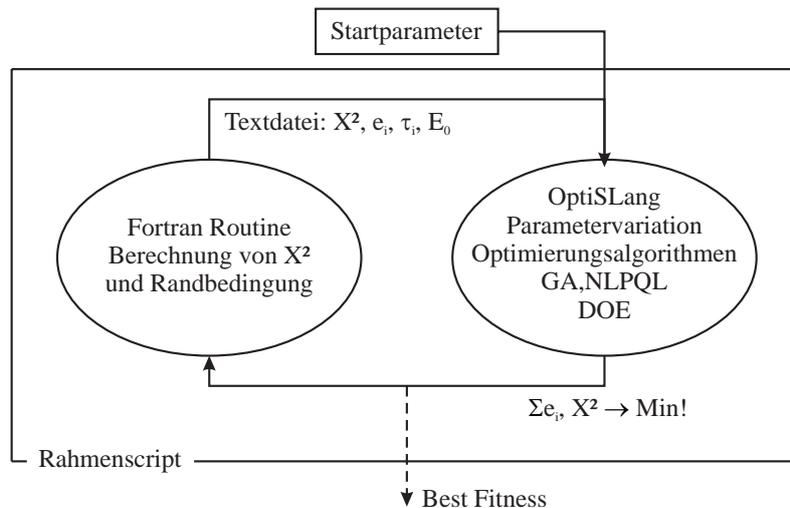


Abbildung 2:

Ablaufschema des Optimierungsworkflows.

3.1 Parametrisierung

Eine simple Textdatei dient als Input für die Optimierung. In dieser Datei sind alle auftretenden Parameter eingetragen. Für die Startwerte werden für die \bar{e}_i Werte zwischen 0 und 1 gewählt, jedoch so, dass deren Summe kleiner als 1 ist. Für die Parameter τ_i werden Werte für jeweils eine Zeitdekade gewählt — mit den Grenzen von ± 1 Dekade. Gleichzeitig entscheidet sich die Anzahl der zu wählenden Reihenelemente nach der Anzahl der überdeckten Frequenzdekaden der Masterkurven. Der Wert für E_∞ wird Relaxationsmessungen bei erhöhten Temperaturen entnommen und als Konstante gesetzt. E_0 wird dagegen als freier Parameter definiert, dessen Untergrenze jedoch nicht kleiner als der größte Wert von $E'(\omega)$ sein darf.

Die Zielfunktion setzt sich aus zwei Termen zusammen. *Term 1* ist die logarithmierte Fehlerquadratsumme χ^2 , *Term 2* ist der absolute Betrag der Randbedingung (11), welche mit 100-facher Wichtung in die Zielfunktion einfließt.

4 Ergebnisse

4.1 Optimierung

Da das hier präsentierte Optimierungsproblem durch viele kleine lokale Minima geprägt ist, und es viele Parameter gibt, wurde als erste Optimierungsstrategie die Genetischen Algorithmen *GA* gewählt. Diese eignen sich hervorragend zur Suche nach einem globalen Optimum über große Designräume hinweg. [5, 6]

4.1.1 Ergebnisse Genetik

Abbildung 3 zeigt den Verlauf von Zielfunktion und Randbedingung in Auftragung über die berechneten Designs. Man kann gut erkennen, dass die Zielfunktion permanent minimiert wird und sich bei über 3000 Designs nicht mehr signifikant ändert. Im gleichen Zuge wird auch die Randbedingung minimiert und pendelt sich bei Werten um 0 ein.

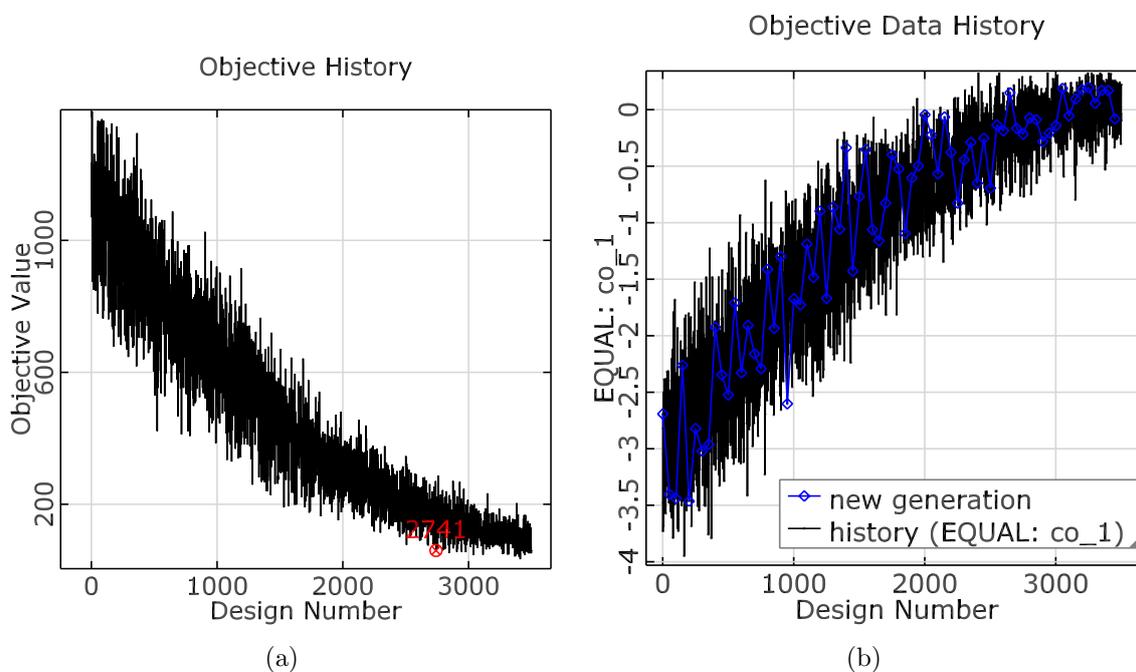


Abbildung 3:

Verlauf der (a) Zielfunktion und (b) der Randbedingung während des Genetiklaufes. Über 70 Generationen wird eine Population mit jeweils 50 Eltern gebildet. Genetische Parameter: 1 Elite, 3 Ersetzungen, hoher Selektionsdruck, hohes Crossover.

Um jedoch die Güte der Optimierung zu bewerten, ist es notwendig die durchgeführte Kurvenanpassung grafisch darzustellen. In Abbildung 4 sind die berechneten Kurvenverläufe von E' und E'' mit den Masterkurven (Messwerten) für zwei verschiedene Optimierungsläufe mit *GA* dargestellt. In beiden Fällen sind signifikante Oszillationen auf dem Verlauf des Verlustmoduls E'' zu erkennen. Diese sind für dieses Optimierungsproblem charakteristisch, da in Gleichung 7 die Kreisfrequenz ω quadratisch im Nenner steht, im Zähler jedoch nur linear. Um die Amplituden der Oszillationen möglichst klein zu halten, wird im Fortranprogramm zur Berechnung von $\lg \chi^2$ (10) der zweite Term zehnfach

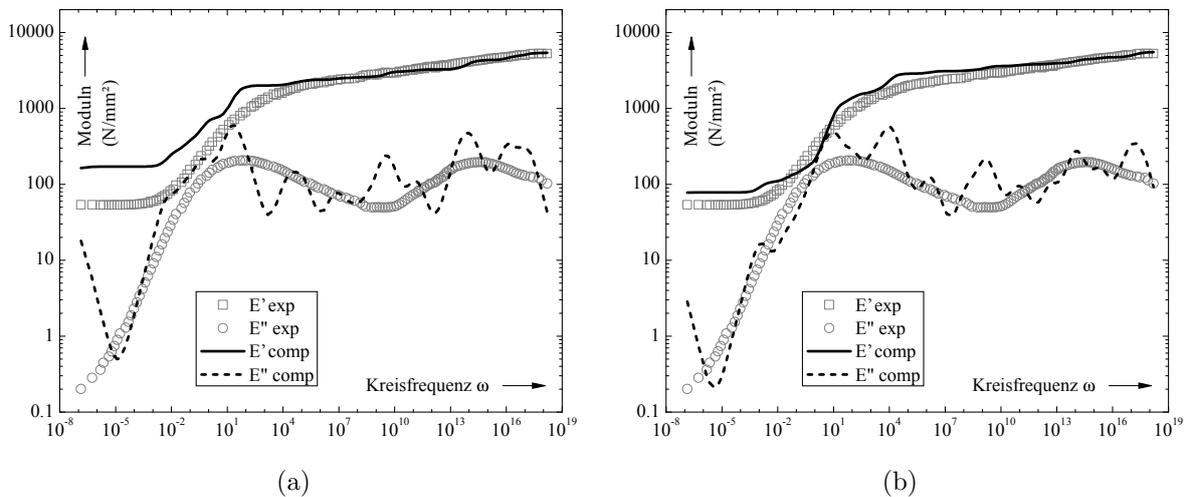


Abbildung 4:

Ergebnisse der Optimierung mittels GA bei (a) mit je 50 Eltern über 70 Generationen, und (b) mit 70 Eltern über ebenfalls 70 Generationen.

gewichtet. Größere Wichtungen bewirken keine Verbesserungen. Weiterhin kann man erkennen, dass das Resultat mit einem ausgewogenen Verhältnis von Anzahl der Eltern und berechneter Generationen zu einem besseren Anpassungsergebnis führt. Dies spiegelt auch die Philosophie der Anwendung genetischer Algorithmen wieder. [6]

4.1.2 Ergebnisse Gradientenverfahren

Als alternative Optimierungsstrategie zu den genetischen Algorithmen steht der in *optiSLang* implementierte Gradientensolver *NLPQL*. Es besteht jedoch die Gefahr, dass bei Einsatz des Gradientenverfahrens nur ein lokales Optimum im Designraum aufgefunden wird. Befindet man sich jedoch in der näheren Umgebung des globalen Optimums führt der Gradientensolver sehr schnell und zuverlässig zum Ziel. Für das hier gestellte Problem wurden Optimierungsläufe mit dem Gradientensolver durchgeführt. Wenn die richtigen Parameter des Gradientensolvers gefunden sind, lassen sich sehr gute Ergebnisse erreichen. Die Qualität der Kurvenanpassung ist gegenüber den mit GA gefundenen Optima etwas besser. Besonders im niedermoduligen Bereich ist die Übereinstimmung von berechneten Werten und Messdaten höher (vergl. Abb. 4 mit 5). Eine nochmalige Verbesserung ist mittels den GA nachgeschalteten Gradientenverfahren (Abb. 5b) zu erzielen. In diesem Fall konnte die Zielfunktion um 80 % bezüglich des GA-Optimums verbessert werden, die Randbedingung um 70 %. Besonders auffällig ist die Verbesserung der Anpassung für den Verlustmodul E'' . Die Oszillationen sind wesentlich kleiner als nach Optimierung mit GA. Die Methode *GA + NLPQL* ist die Vorzugsvariante, da die GA relativ zuverlässig und robust bezüglich der Genetikparameter die Lage des globalen Optimums auffinden. Mit den Gradientenverfahren wird im Anschluss sehr genau das *wahre* Optimum aufgesucht.

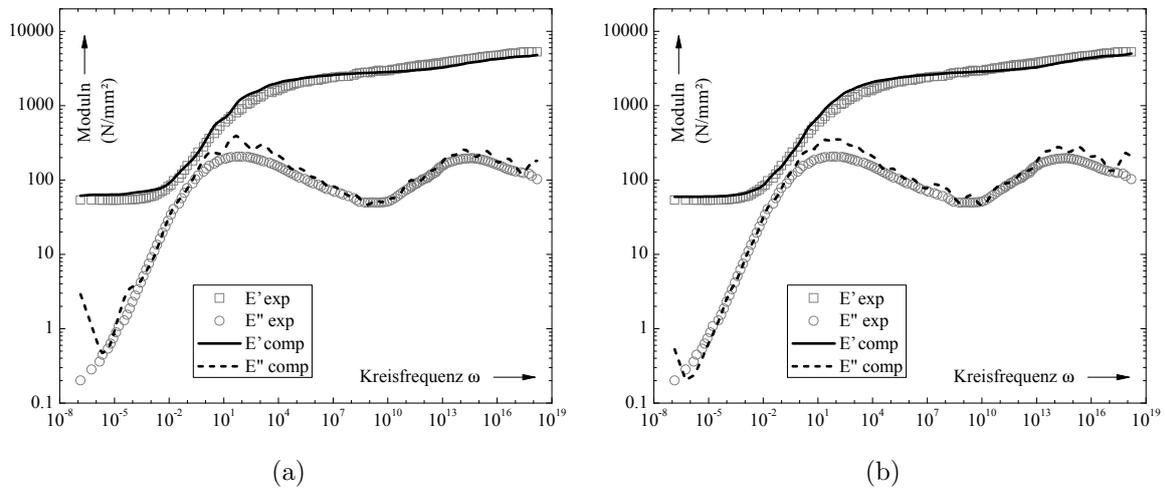


Abbildung 5:

Ergebnisse der Optimierung mit Gradientensolver (a) bezüglich der Startparameter und (b) bezüglich des "Best Design" der Optimierung mit genetischen Algorithmen.

4.2 Sensibilitätsanalyse

Nach der Optimierung mit verschiedenen Strategien, stellt sich die Frage nach der Sensibilität des gefundenen Optimums bezüglich kleiner Schwankungen der einzelnen Parameter. Hierzu wurde eine Sensibilitätsanalyse auf das mit dem *NLPQL*-Lauf gefundene Optimum durchgeführt. Um dieses 'best design' wurden eintausend *Latin Hypercube* Zufallswerte generiert. Der Zufallsraum wurde dabei auf 10 % der ursprünglichen Parametergrenzen eingeschränkt. In Abbildung 6 ist das Ergebnis des *Latin Hypercube Samplings* bezüglich der berechneten Zielfunktion (10) und Randbedingung (11) dargestellt.

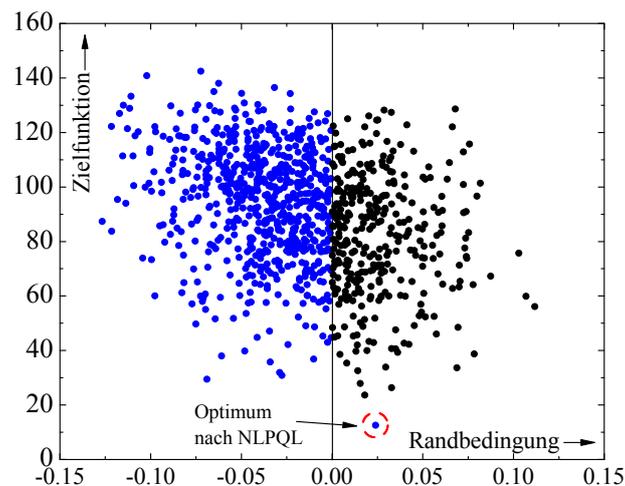


Abbildung 6:

1000 *Latin Hypercube Samplings* mit der berechneten Zielfunktion und Randbedingung. Die negativen Werte (blau) der Randbedingung verletzen die Gültigkeit Selbiger.

Es ist gut zu erkennen, dass die Werte der Zielfunktion sofort das durch *NLPQL* gefundene Optimum verlassen. Die Randbedingung streut im Intervall $(-0.125, +0.125)$. Dabei liegen die negativen Werte im nicht gültigen Bereich der Randbedingung, werden aber trotzdem in die Auswertung der Sensibilität mit einbezogen. Es gilt zu analysieren, ob bestimmte Parameter dominanten Einfluss auf die Qualität der Zielfunktion und Randbedingung haben. Die durch *optiSLang* bestimmte lineare Korrelationsmatrix (7) gibt eine gute Übersicht über die linearen Zusammenhänge zwischen Input- und Outputgrößen.

OUTPUT: X2 vs. INPUT: e24, $r = 0.757$

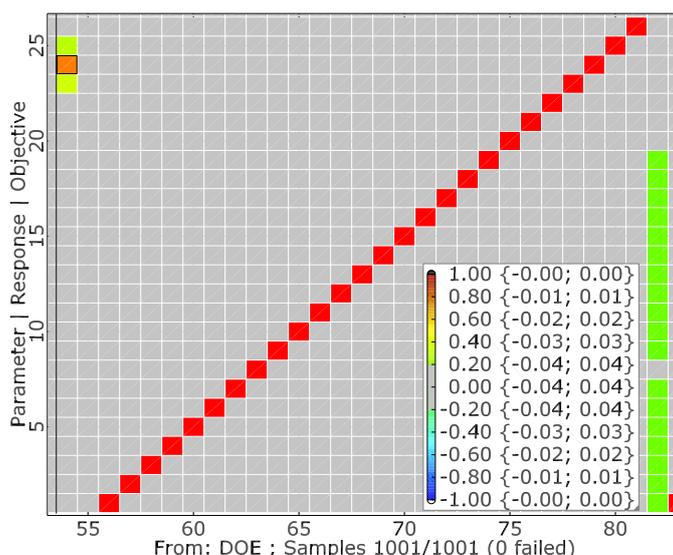


Abbildung 7:

Lineare Korrelationsmatrix basierend auf 1000 Latin Hypercube samplings. Darstellung aller Korrelationskoeffizienten $|R| > 0.2$ mit den in der Legende angegebenen Konfidenzintervallen. Die Zielfunktion χ^2 entspricht Outputspalte 54, die Randbedingung $\sum \bar{e}_i$ ist Outputspalte 82. Die Zeilen 1 – 26 stellen die Inputparameter \bar{e}_i dar.

In Abbildung 7 ist leicht zu erkennen, dass nur die Inputparameter $\bar{e}_{23} \dots \bar{e}_{25}$ eine nennenswerte Korrelation mit der Zielfunktion χ^2 besitzen. Bezüglich der Randbedingung $\sum \bar{e}_i$ korrelieren mehrere \bar{e}_i mit $R \geq 0.2$. Um genauere Aussagen über die Auswirkungen einzelner Parameteränderungen auf die beiden Outputgrößen χ^2 und $\sum \bar{e}_i$ zu treffen sind in Abbildung 8 deren Abhängigkeiten von den Inputparametern im Einzelnen dargestellt.

Die Zielfunktion χ^2 (Abb. 8a) zeigt eine dominierende Abhängigkeit vom Inputparameter \bar{e}_{24} gefolgt von \bar{e}_{23} und \bar{e}_{25} . Alle drei Parameter liegen im Bereich oberhalb der Glasübergangstemperatur der Masterkurven. Das heißt, bei kleinen Änderungen dieser drei Parameter wird das Anpassungsergebnis im niedermoduligen Bereich der Masterkurven stark beeinflusst. Alle anderen Inputparameter haben isoliert keinen dominanten Einfluss auf die Zielfunktion. Betrachtet man die Randbedingung $\sum \bar{e}_i$ dann ist zu erkennen, dass kein Parameter isoliert einen wesentlich Einfluss auf die Änderung der Summe hat. Dies ist leicht verständlich, da jeder Parameter \bar{e}_i linear in die Summenbildung eingeht. Aufgrund der strikten Bedingung (11), wirken sich jedoch kleine Änderungen der Inputparameter auf die Gültigkeit der Randbedingung aus.

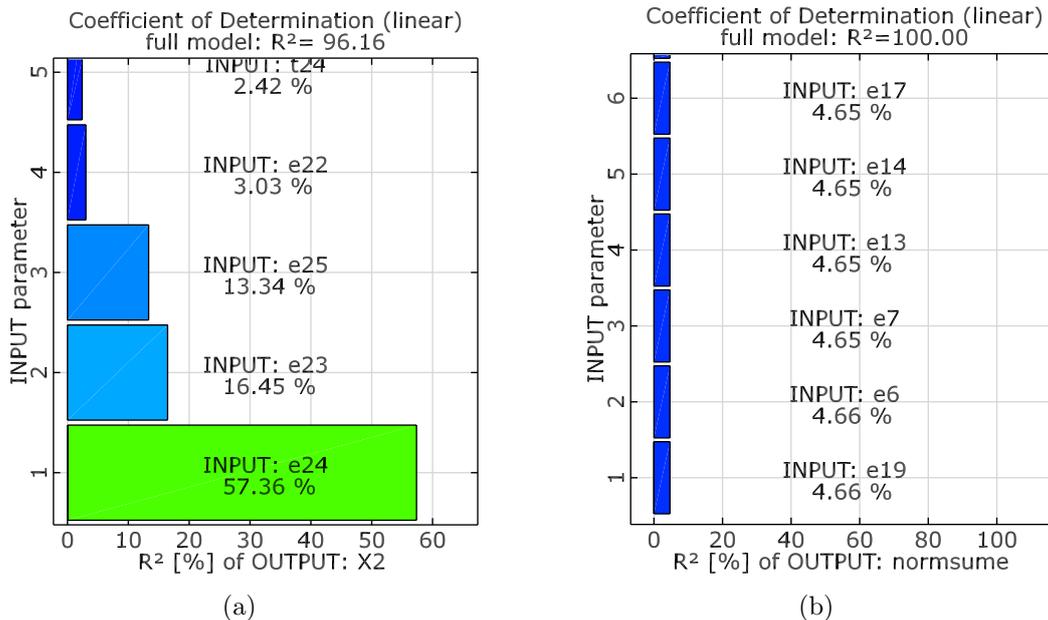


Abbildung 8:

Lineare Abhängigkeiten von (a) χ^2 und (b) $\sum \bar{e}_i$ von den Inputparametern entsprechend derer Einflussstärke

5 Zusammenfassung

Die direkte Bestimmung der Parameter der Pronyreihenentwicklung für die Abbildung des Relaxationsverhaltens viskoelastischer Klebstoffe stellt ein komplexes Optimierungsproblem dar. Mit der Kombination von Genetischen Algorithmen und Gradientenverfahren lässt sich eine sehr gute Kurvenanpassung der Funktionen von Speicher- und Verlustmodul an die experimentell bestimmten Masterkurven finden. Anhand der durch die Optimierung gefundenen Parameter hat man den direkten Input für das viskoelastische Materialmodell zur Belastungsanalyse von AVT-Lösungen mit beteiligten Klebstoffen in Finite Elemente Programmen.

Eine Sensibilitätsanalyse zeigt die Empfindlichkeit des gefundenen Optimums bezüglich kleiner Inputparameterstreuungen. Die dominanten Parameter wurden mittels Auswertung der linearen Korrelationsmatrix basierend auf einem *Design Of Experiments* DOE identifiziert.

Literatur

- [1] F. R. Schwarzl. *Polymermechanik*. Springer-Verlag, 1990.
- [2] I. M. Ward and D. W. Hadley. *An Introduction to the Mechanical Properties of Solid Polymers*. John Wiley & Sohns, 1998.

-
- [3] B. Wunderle. *Thermo-Mechanical Reliability of Flip-Chip Assemblies with Heat-Spreaders*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2002.
- [4] ABAQUS Inc. *ABAQUS User's Manual*, vers. 6.5 edition, 2004.
- [5] J. Will, C. Bucher, and J. Riedel. Stochastik und optimierung: Anwendung genetischer algorithmen und stochastischer verfahren zur multidisziplinären ooptimierung in der fahrzeugentwicklung. Technical report, VDI-Berichte, 2004.
- [6] J. Will. OptiSLang – the optimizing Structural Language. product presentation, Oct 2005.