Ermittlung viskoelastischer Materialparameter aus thermorheologischen Meßwerten mittels Evolutionsstrategie*)

Manfred Achenbach, Bietigheim-Bissingen **Michael Herdy, Berlin**

Key words: Finite element analysis (FEA), o-ring, evolutionary- strategy, linear -viscoelasticity, elastomers, stress-relaxation, master-curve, Prony-series, glass-transition

Einleitung und Problemstellung

Datenauswertungsvorgänge sind aus der Arbeit eines Berechnungsingenieurs nicht mehr wegzudenken. Nicht in jedem Fall ist man sich aber der Bedeutung der dabei eingesetzten Datenregressionsverfahren (Kurvenanpassung) hinreichend bewußt. Dieser Beitrag soll Anwendern einen Überblick über Regressionsmethoden und die dabei auftretenden Probleme geben.

Oft hat man die Aufgabe, Rohdaten aus Messungen von Materialfunktionen, wie z.B. Modul-Zeit oder Modul-Frequenzkurven auszuwerten, so daß daraus das viskoelastische Relaxationsspektrum gewonnen werden kann. Will man den angenommenen Zusammenhang in den gemessenen Datenwerten erkennen, so versucht man ihre Verteilung mit Hilfe einer Gleichung zu erfassen. Dabei genügt es nicht, die Meßdaten durch einen beliebigen Kurvenzug zu verbinden, vielmehr soll eine „glatte“ Kurve auch die Streuung der Meßwerte berücksichtigen und ausgleichen. Ein Fit-Algorithmus hat die Aufgabe, die Parameter solange zu variieren, bis die resultierende Kurve die bestmögliche Übereinstimmung mit den Meßdaten ergibt.

Im Gegensatz zu einer empirischen Beschreibung der Meßdaten, wo beim Fitten einfache Polynominal- oder Exponentialfunktionen einzusetzen sind, muß bei den Prüfungen einer Modellannahme, etwa dem Konzept des diskreten Relaxationsspektrums thermorheologisch einfacher Stoffe, die Kurve einer physikalischen Gesetzmäßigkeit gehorchen. Falls eine Bestätigung erfolgt, können die Parameter der Fitfunktion zur weiteren Verarbeitung, z. B. in numerischen Simulationsprogrammen wie der FEA-Methode, genutzt werden.

Die meisten Algorithmen verwenden die genannte Fehlerquadratmethode als die zu optimierende Zielfunktion. Hierbei hat man zwei Typen von Gleichungen zu unterscheiden und entsprechend kommen zwei mathematische Methoden zu Anwendung. Im Falle von linearen Funktionen, die sich in der Form:

$$\mathrm{f}(t_i) = \sum_{j=1}^{N} a_j \, \mathrm{g}(t_i) \qquad (1)$$

)gekürzte Fassung des gleichnamigen Vortages ; gehalten auf dem FEM-Kongress 1999 in Baden-Baden.

darstellen lassen, dürfen in der Funktion g (t_i) selbst keine Fit-Koeffizienten auftreten. Solche linearen Funktionen haben für die Datenregression zwei entscheidende Vorteile: Der Fit-Algorithmus benötigt keine Startwerte, und die Lösung ist exakt. Enthält der Term g (t_i) jedoch seinerseits Koeffizienten, so wird die Funktion als nichtlinear bezeichnet . Beispiel:

$$\mathrm{f}(t_i) = \sum_{j=1}^{N} a_j \exp(-t_i / \tau_j) \tag{2}$$

Diese Funktion benötigt man beispielsweise bei der Auswertung von Masterkurven der Relaxationsisothermen von Elastomeren, wo die Regression einer naturgesetzlichen Bedingung genügen muß. Im Vergleich zur Kurvenanpassung mit linearen Funktionen haben nichtlineare Verfahren aber zwei Nachteile. Einerseits muß man dem Fit-Algorithmus Startwerte für die zu optimierenten Koeffizienten vorgeben, andererseits werden diese hier nur iterativ verbessert, d.h. man erhält nach einer endlichen Anzahl von Durchgängen immer nur eine Näherung an die wirkliche Lösung. Man kann sich deshalb nie sicher sein, ob nicht bei geeigneterer Wahl der Startwerte eine noch bessere Lösung herauskäme. Deshalb wird man bei der Regression mit nichtlinearen Funktionen ein und dieselbe Gleichung immer mit mehreren „Sets“ von Startwerten testen müssen, bevor man ihre Eignung beurteilen kann.

Fit-Algorithmen

Die genannte, von *Gauß* entwickelte Methode der kleinsten Fehlerquadrate bildet die Grundlage der meisten Fit-Algorithmen. Wichtig ist hierbei die Voraussetzung, daß die Messwerte unabhängig voneinander und zudem normal verteilt sind. Im Falle der linearen Regression soll es an dieser Stelle genügen, daß sich das Lösungsverfahren auf eine einfache Matrizenoperation zurückführen läßt, die ein eindeutiges Ergebnis liefert.

Methode von Levenberg und Marquardt (Gradientenverfahren)

Anders hingegen sieht es bei nichtlinearen Regressionsgleichungen aus. Der bekannteste Algorithmus ist die Methode von LEVENBERG und MARQUARDT **[1]**. Sie besteht darin, daß die Koeffizienten der Ausgleichsfunktion nach Vorgabe geeignet erscheinender Startwerte in diejenige Richtung weiter optimiert werden, in der die steilste Abnahme der Fehlerquadratsumme verzeichnet wird. Man kann sich leicht vorstellen, daß ein Verfahren, welches einzig in Richtung der größten Abnahme der Fehlersumme optimiert, je nach Startwerten für a_j (j = 1,...,N), d.h. in Abhängigkeit von der Startposition im Parameterraum, in unterschiedliche Minima hineinfallen wird. So rasch das Levenberg/Marquardt-Verfahren auch konvergiert, als Nachteil der Methode bleibt, daß man nie weiß, ob die gefundene Lösung nun lediglich ein lokales Minimum darstellt, oder ob es sich wirklich um das globale handelt. Auch hier muß man deshalb mehrere Startwerte ausprobieren.

Simplex-Verfahren

Ähnlich verfährt das Simplex-Verfahren **[1,2]** , das den Vorteil hat, lediglich Fehlersummen und keine Ableitungen von Fit-Funktionen zu benötigen. Aber auch die Simplex-Optimierung kann sich in einem lokalen Minimum verfangen. Das Simplex-Verfahren versagt leicht, wenn die Parameter der Modellfunktion stark miteinander korreliert sind.

Evolutionsstrategie

Bei der Evolutionsstrategie, die Mitte der sechziger Jahre von RECHENBERG **[3]** entwickelt wurde, wird die Wirkungsweise des ‚biologischen Optimierungsverfahrens' in die Technik übertragen.

Bei dieser Anpassung werden die in der Biologie als POLYGENIE und PLEIOTROPIE bezeichneten Effekte nachgebildet. Als POLYGENIE wird die Tatsache bezeichnet, dass ein phänotypisches Merkmal normalerweise nicht nur durch ein einzelnes Gen sondern durch eine Gen-Kombination bestimmt wird; der Begriff PLEIOTROPIE bezeichnet die Tatsache, dass bei höheren Lebewesen die meisten Gene nicht nur ein Merkmal, sondern gleichzeitig mehrere Merkmale beeinflussen.

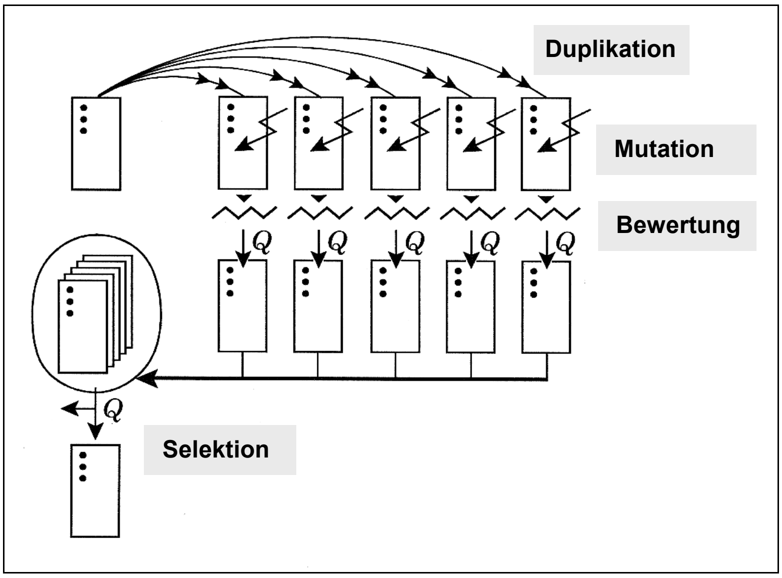

Fig. 1: Ablaufschema einer (1, 5)-ES, nach [3]

Auch in der Technik wird ein Merkmal in der Regel durch mehrere Variablen beeinflusst, und jede Variable beeinflusst meist nicht nur ein einzelnes, sondern mehrere Merkmale. Die Variablen sind miteinander korreliert.

Das Ablaufschema für eine einfache Evolutionsstrategie (***ES***) zeigt **Abb. 1**. Bei dieser (1, 5)-***ES*** werden zunächst fünf identische Kopien der "Eltern" (im folgenden "der Elter" genannt, da kein Paar) erzeugt und dann entsprechend der in den Genen der "Elter" notierten Mutationsverteilung Variationen an den Elter-Koeffizienten durchgeführt. Nach der Bewertung wird der beste der fünf Nachkommen selektiert und wird damit Elter der nächsten Generation. Das Komma in der Bezeichnung der Strategie besagt, dass der Elter in der nächsten Generation nicht mehr in die Selektion mit einbezogen wird, bei einer (1+5)-ES wird auch der Elter zusammen mit den fünf Nachkommen in die Selektion mit einbezogen.

Beim in **Abb. 2** gezeigten Beispiel **[4]** werden mit der Evolutionsstrategie die Parameter eines Modells an einen fiktiven Datensatz angepasst. Das Modell besteht aus einer Überlagerung dreier Gaußfunktionen mit einer linearen Funktion. Es fand hier eine (1, 10)-ES mit adaptiver Anpassung der Mutationsverteilung Anwendung. Dabei werden in jeder Generation ausgehend vom Eltermodell 10 Nachkommenmodelle generiert und mit der Mutationsverteilung des Elter variiert. Das Nachkommenmodell, das die Daten am besten beschreibt, wird Elternmodell der nächsten Generation. Neben den Parametern wird die Mutationsverteilung des Elter dabei ebenfalls vererbt, nachdem sie zuvor proportional zum Unterschied zwischen Elter und dem selektierten Nachkommen modifiziert wurde.

Fig. 2: 'Ahnengalerie' der Anpassung einer aus der Summe dreier Gaußfunktionen und einer linearen Funktion bestehenden Funktion an eine Menge von Datenpunkten. Gezeichnet sind die Teilfunktionen sowie die Summenfunktion.

Ausgehend von einer Starteinstellung der elf Modellparameter (drei Parameter zur Beschreibung jeder Gaußkurve sowie zwei Parameter zur Beschreibung der linearen Funktion) in Generation 0, ist in Generation 50 bereits eine erste Anpassung des Modells an die Daten zu beobachten, in Generation 300 wurde der Optimierungslauf beendet, da die Anpassung des Modells an die Daten nicht mehr zu verbessern war.

In **Abb. 3** ist das Ablaufschema für eine komplexere Evolutionsstrategie abgebildet **[3]** ; es wird hier zusätzlich der Evolutionsfaktor *Selektion* nachgebildet. Bei dieser Strategie wird in mehreren Populationen parallel eine evolutionsstrategische Optimierung durchgeführt; nach Ablauf der Isolationsdauer wird diejenige Population zur Elternpopulation des nächsten Zyklus, die das beste Selektionskriterium Q‘ aufweist. Eine solche Strategie kann angewandt werden, wenn nicht nur die Koeffizienten eines mathematischen Modells angepasst werden sollen, sondern wenn auch nach der Struktur des Modells gefragt ist, die am besten vorgegebene Eigenschaften erfüllt (z.B. möglichst geringe Komplexität des Modells).

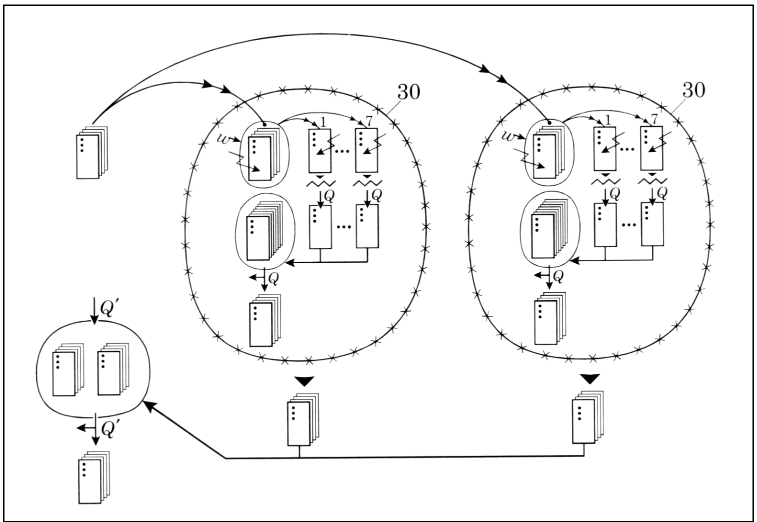

Fig. 3: Ablaufschema einer $(1, 2(4,7)^{30})$-ES, aus **[3]**

Mathematisch gesprochen handelt es sich bei der Evolutionsstrategie um ein stochastisches Suchverfahren. Im Gegensatz zu vielen anderen Optimierungsverfahren wird bei der Evolutionsstrategie lediglich die Rangfolge der Nachkommen nach der Bewertung verwendet; weder Ableitungen der Bewertungsfunktion noch die Funktionswerte werden benötigt. Dies macht die Evolutionsstrategie zu einem sehr robusten und vielseitig anwendbaren Optimierungsverfahren .

Bei der Evolutionsstrategie wird neben den Startwerten für den Elter der ersten Generation ein Koeffizientenbereich vorgegeben. Für die einzelnen Koeffizienten werden also sinnvolle obere und untere Grenzen gewählt.

Das prinzipielle Risiko, ein lokales Optimum anstelle des globalen Optimums zu treffen, ist auch bei der Evolutionsstrategie gegeben. Es läßt sich zwar mathematisch beweisen, dass einfache Evolutionsstrategien mit Sicherheit immer das globale Optimum finden; dies ist aber eher von theoretischem Interesse, da eine solche Konvergenz mit unendlicher Optimierungsdauer erkauft werden muß.

Mit der ES können lokale Minima mit kleinerem Einzugsbereich überwunden werden, wohingegen Gradientenverfahren diese zielsicher ansteuern. Gegenüber dem Simplexverfahren weist die Evolutionsstrategie mit Anpassung der Mutationsverteilung den Vorteil auf, dass sie auch keine Probleme bei Modellfunktionen hat, deren Parameter stark miteinander korreliert sind.

Anforderungen an Regressionsprogramme

Regressionsprogramme zur Ermittlung einer Ausgleichskurve berechnen meist eine ganze Reihe von Werten. Die primär gesuchten Größen sind natürlich die Fit-Koeffizienten, die Lage und Form der Kurve bestimmen. Weiterhin ist die Standardabweichung der Koeffizienten zu nennen, die häufig als zweite Zahl an die Fit-Koeffizienten angehängt wird, z. B. 0,61 ± 0,01. Sie drückt die Sicherheit der Koeffizienten aus und sollte aber gegenüber diesen möglichst klein sein. Wechselt der Fit-Koeffizient durch Addition oder Subtraktion der Standardabweichung das Vorzeichen, ist er für das Modell nicht relevant. Neben der bereits genannten Fehlerquadratsumme sollten Regressionsprogramme auch den Korrelationskoeffizienten berechnen. Je näher dieser bei 1 liegt, desto besser beschreibt das Modul die gemessenen Daten. Für Zwecke der Auswertung von Materialfunktionen zur Parametrisierung in Finite Elemente Programmen sind folgende Mindestanforderungen an Regressionsprogramme zu stellen:

- Graphische Darstellung mehrerer Kurven pro Diagramm
- Fehlerdarstellung
- Graphikbereiche beliebig skalierbar (zoomen)
- Ausgleichsfunktion (nichtlinear !)
- Vordefinierte Funktionen zur Auswahl
- Datenaustausch mit Kalkulationsprogrammen
- Erstellen von Interpolationstabellen

Auswertung von Materialfunktionen

In diesem Abschnitt werden Beispiele aufzeigen, wie man im Falle der Ermittlung nichtlinearer Materialkoeffizienten vorgehen kann. Dazu verwenden wir das Programm *VISCODATA* **[6]**, welches nach der Methode der Evolutionsstrategie arbeitet. Zuvor wollen wir aber aufzeigen, wie man aus Rohdaten von Relaxationsmessungen zu einer Masterkurve gelangt. Diese Masterkurve ist dann das Objekt der Messdatenreduktion durch Regression.

Thermomechanische Eigenschaften der Elastomere

Zu den wichtigsten Eigenschaften der Elastomere gehört neben der hohen reversiblen Verformbarkeit der Glasübergang, d.h. die Beobachtung, daß ein Elastomer mit zunehmender Deformationsgeschwindigkeit steifer reagiert. Dieses bei Raumtemperatur beobachtete Versteifungsverhalten finden wir auch in der Nähe der Glasübergangstemperatur bei langsamer Verformung (Boltzmann'sches Zeit-Temperatur Superpositionsprinzip). Damit besteht ein grundlegender Zusammenhang zwischen der Verformungsgeschwindigkeit und der Beweglichkeit der Kettenmoleküle, bzw. der Temperatur. Das Versteifungsverhalten von Elastomeren bei hohen Verformungsgeschwindigkeiten sowie die Sprödigkeit bei tiefen Temperaturen ist auf diesen Zusammenhang zurückzuführen. Diese Relation findet ihre quantitative Ausprägung in der Zeit-Temperatur-Transformationsfunktion nach WILLIAM, LANDEL UND FERRY (WLF-Shift-Funktion) **[7].** Diese Eigenschaft ist für Polymere universell; lediglich die charakteristische Temperatur bei welcher der Anstieg der Steifigkeit ein Maximum besitzt, ist vom Polymertyp abhängig.

4.2 Viskoelastizität

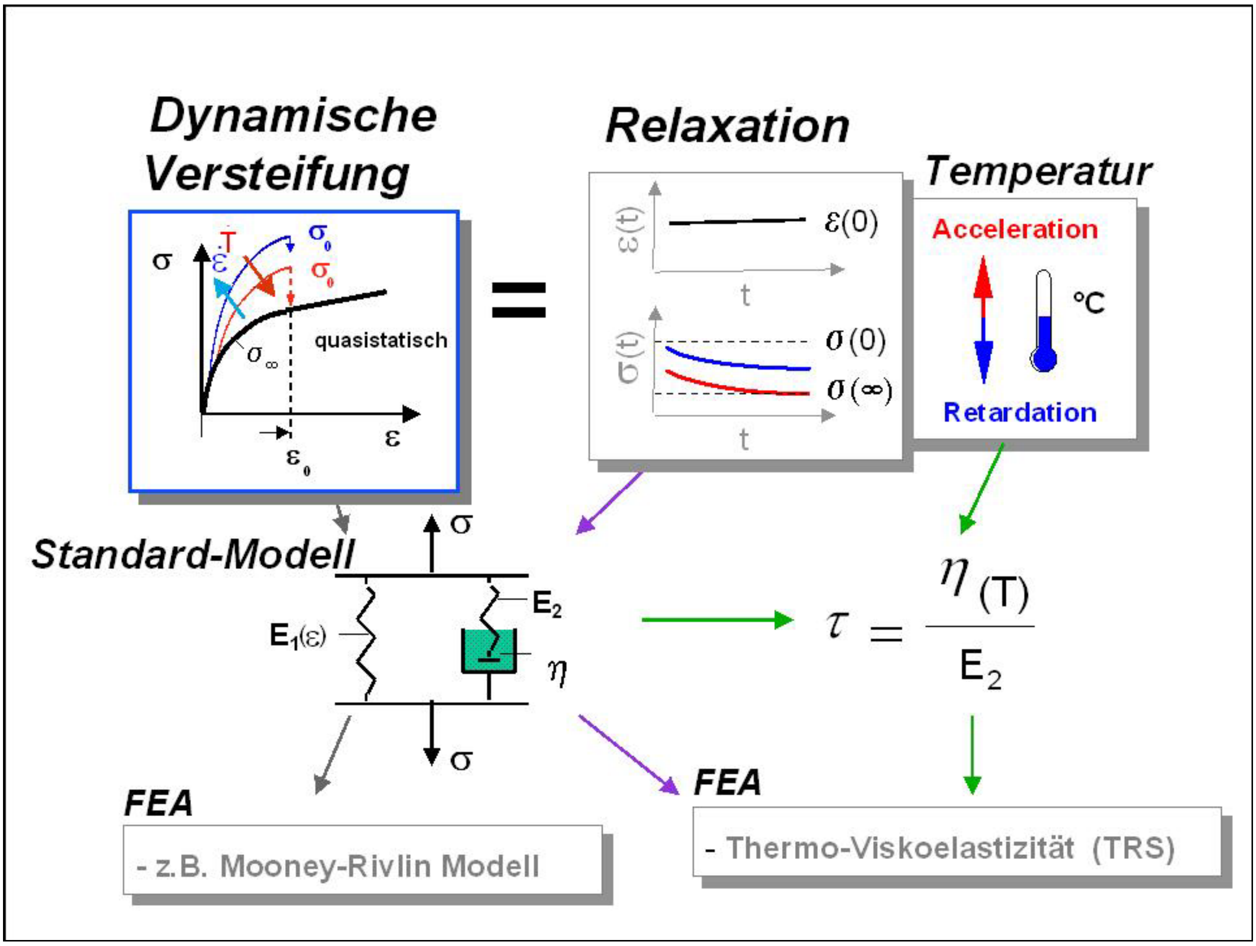

Fig.4: Mathematische Modellierung der Relaxation. Das Standard Modell der Viskoelastizitätstheorie kann viele der beobachteten Relaxationsphänomene bei Gummiwerkstoffen qualitativ gut beschreiben.

Wirken äußere Kräfte auf einen visko-elastisch reagierenden Körper, wird ein Teil der Verformungsenergie gespeichert und der andere Teil in Wärme umgewandelt. Besonders deutlich ist das bei Gummimischungen zu beobachten **[7, 8].**

Modelle

Die Elastizität wird gewöhnlich durch eine Feder, die dem Hooke'schen Gesetz folgt, und die Viskosität durch einen Dämpfer, der dem Newton'schen Gesetz gehorcht, dargestellt.

Das einfachste Modell einer viskoelastischen Substanz wäre dann die Parallelschaltung einer Feder mit einer in Reihe geschalteten zweiten Feder mit Dämpfer. Die Reihenschaltung von Feder und Dämpfer wird als Maxwell-Element bezeichnet. Die erste Feder ohne Dämpfer ist notwendig, um den Festkörper-Charakter sicherzustellen. Dieser Feder verleiht man eine nichtlineare Charakteristik, um das nichtlineare Spannungs-Dehnungs Verhalten von Elastomeren beschreiben zu können (**Abb. 4**).

Um auch die Übergänge vom gummielastischen in den glasartigen Zustand korrekt darzustellen, ist es notwendig, eine ganze Reihe von Maxwell-Elementen parallel zu schalten; alle mit verschiedenen Federkonstanten E und Relaxationszeiten τ. Wird eine solche Reihe auf unendlich viele Elemente erweitert, spricht man vom kontinuierlichen Relaxationsspektrum eines Materials **[7],** andernfalls vom diskontinuierlichen. Es enthält alle Informationen, die notwendig sind, um das viskoelastische

Verhalten eines Gummis zu beschreiben und ist deshalb grundsätzlicher Natur. Es kann aus unterschiedlichen Experimenten abgeleitet werden (z.B. Spannungsrelaxation).

Temperaturabhängigkeit

In den Beziehungen für viskoelastisches Verhalten eines Feder-Dämpfer-Modells treten Zeit oder Frequenz und Relaxationszeit des Modells immer als Produkt auf. Da die Relaxationszeit die Viskosität enthält und diese erfahrungsgemäß stark temperaturabhängig ist, ist ein Temperatureinfluß des Moduls im Modell a priori enthalten (**Abb. 4**).

Unter der Annahme, daß die Zeitabläufe mit steigender Temperatur alle gleichmäßig beschleunigt werden, kann man experimentell schwierige Zeitabläufe durch Temperaturänderungen zugänglich machen. Wichtig dabei ist, daß der Temperaturbereich so gewählt wird, daß chemische Reaktionen noch nicht oder nur sehr langsam ablaufen.

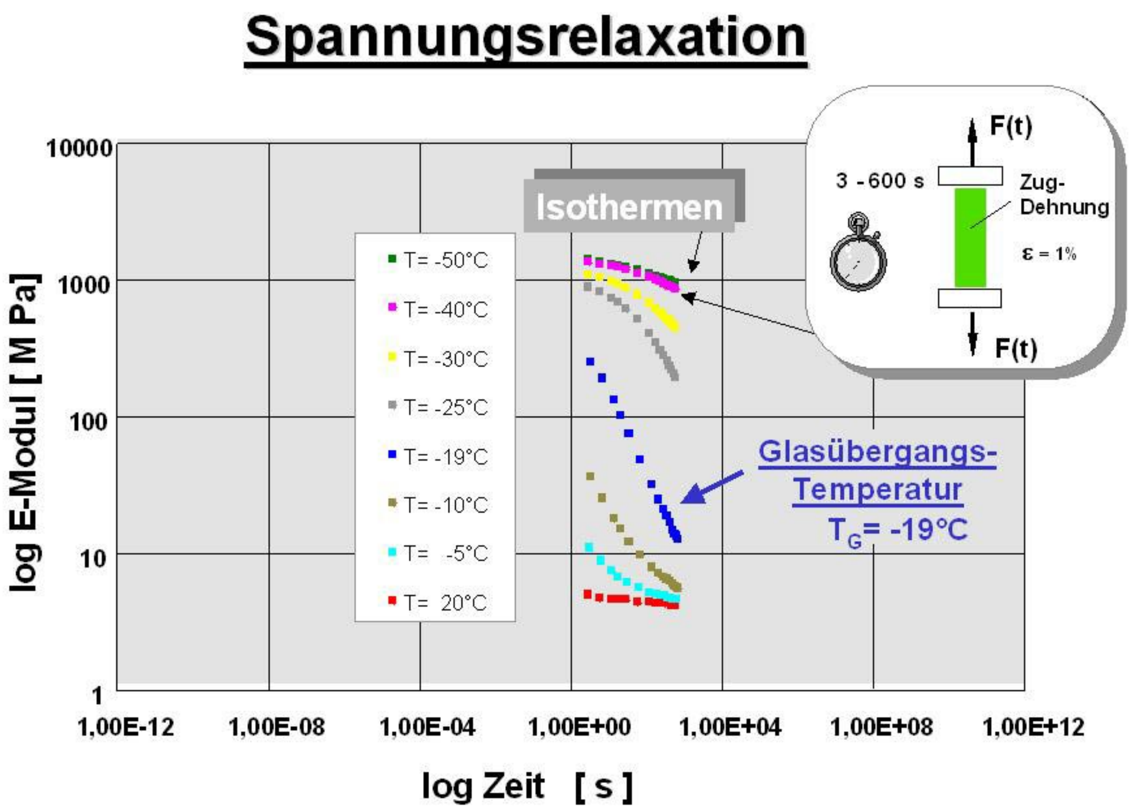

Fig. 5: Messung von Relaxationsisothermen eines typischen Fluorelastomeren.

Reaktionen noch nicht oder nur sehr langsam ablaufen. Experimentell wird der Modul oder jede andere viskoelastische Funktion über ein bestimmtes Zeit- oder Frequenzintervall bei verschiedenen Temperaturen gemessen und in einem doppelt logarithmischen Diagramm eingetragen. Für den Fall der Relaxation, also der Modul-Zeit Kurve, ist das in **Abb. 5** zu sehen.

Wird die Zeitvariable mit einem Faktor multipliziert, was auf der logarithmischen Achse einer Verschiebung entspricht, so lassen sich tatsächlich die experimentellen Datensätze als eine kontinuierliche Kurve auf einer erweiterten Zeitachse darstellen (**Abb. 6**).

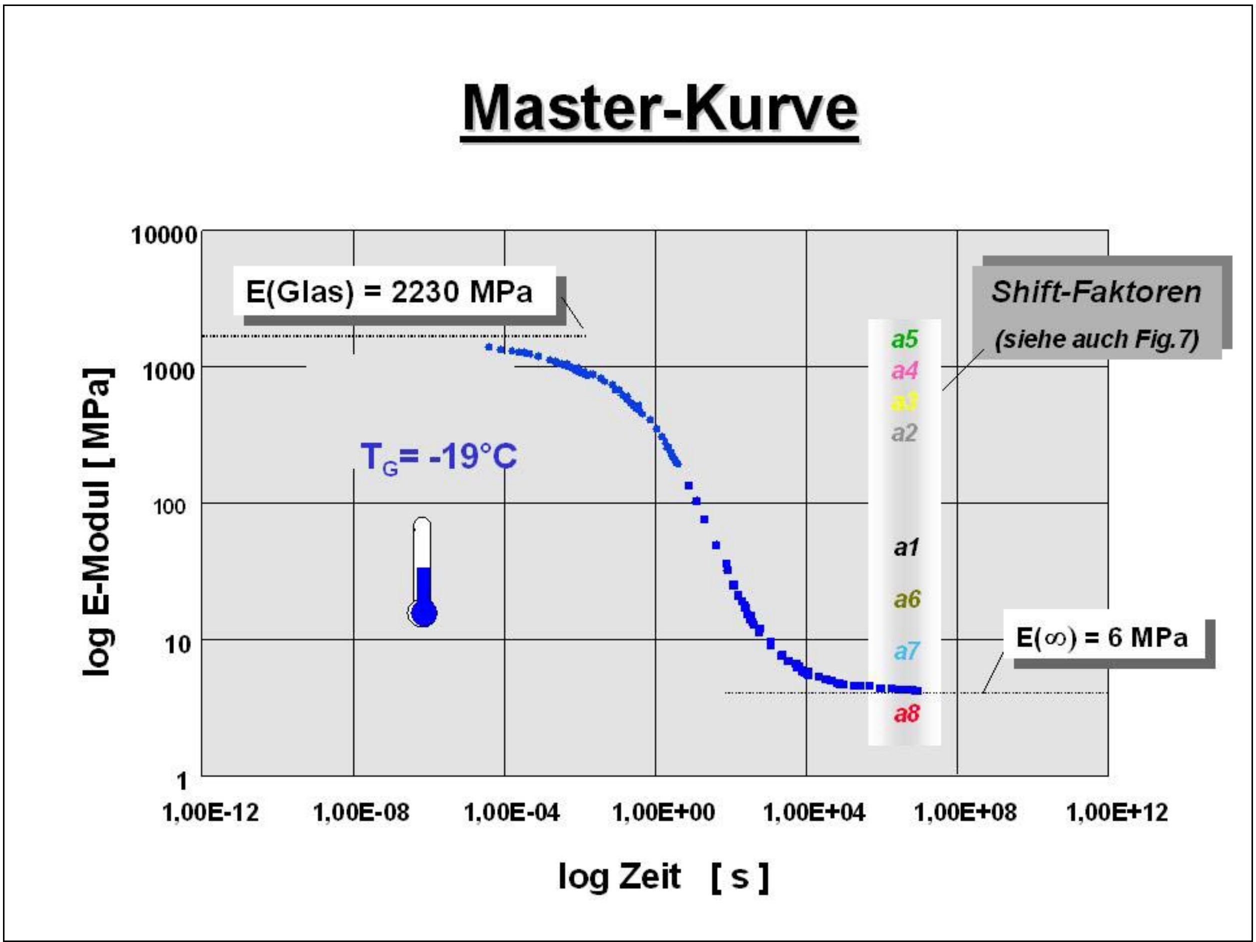

Fig. 6: Geshiftete Relaxationsisotherme; die Referenzrelaxations-Isotherme bleibt unverschoben (siehe Fig.5).

Diese Schiebefaktoren (**Abb. 7**), die allgemein mit log a_T bezeichnet werden, um welche die einzelnen experimentellen Kurvensegmente (Relaxationsisotherme) verschoben werden müssen, stellen dann die Temperaturabhängigkeit der Relaxationszeiten dar.

William, Landel und Ferry haben herausgefunden, daß für Polymere in der Übergangsphase vom elastischen zum glasartigen Verhalten die Temperaturabhängigkeit der Verschiebefaktoren durch eine allgemeingültige Beziehung ausgedrückt werden kann, die bekannte WLF-Gleichung, in der das Material durch eine einzige Konstante vertreten ist, die Glasübergangstemperatur T_g **[9].**

Durch diese Transformation ist es möglich, die viskoelastischen Eigenschaften als Funktion der Zeit und der Temperatur darzustellen (**Abb. 6** und **Abb.7**). Diese Kurve, die sogenannte Masterkurve, enthält dann die gesamte viskoelastische Information. Die darüber hinaus enthaltene Temperaturabhängigkeit der Relaxationszeiten hat allgemeingültigen Charakter (**Abb.7**) gezeigt.

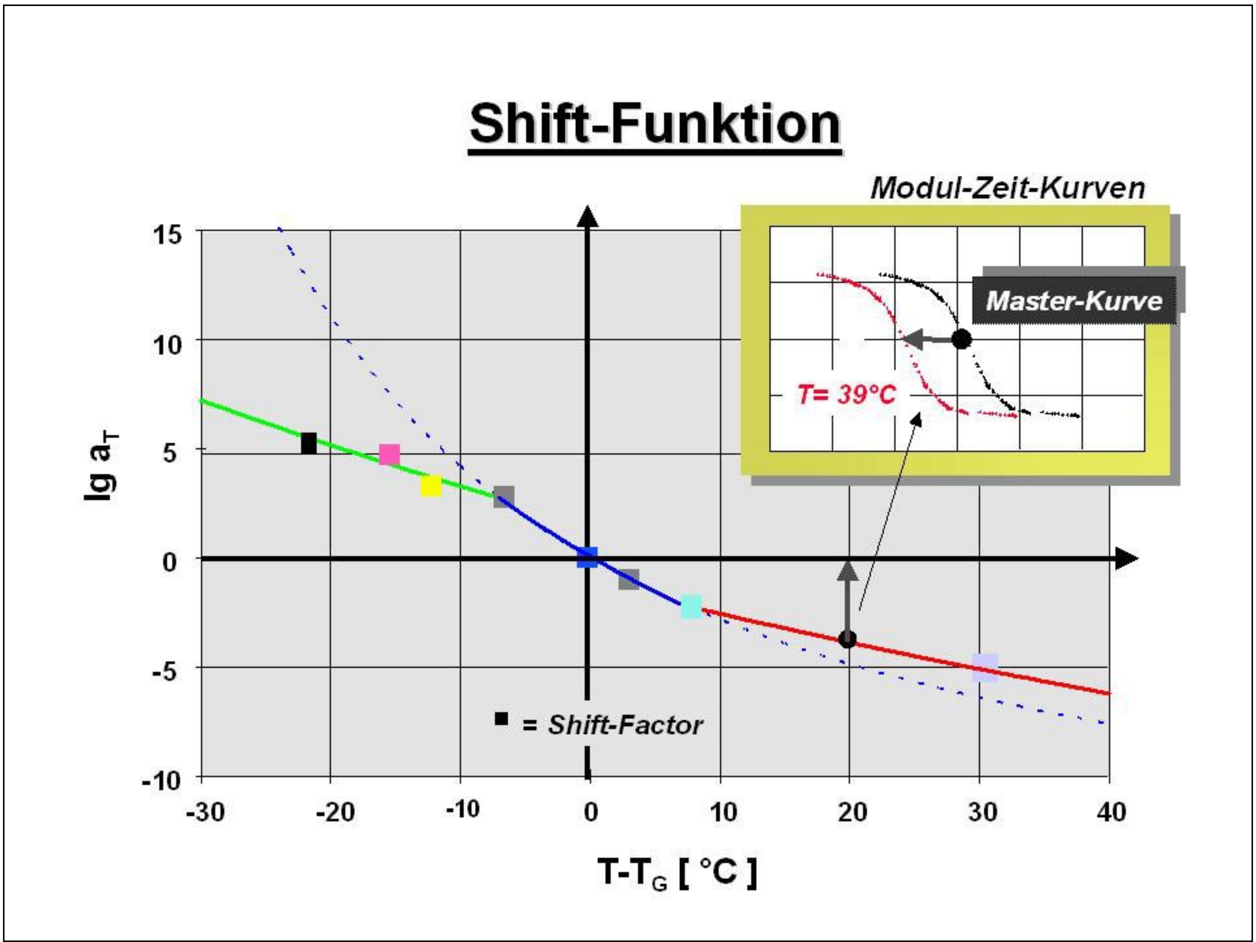

Fig. 7: Temperaturfunktion der Relaxationszeiten; Referenztemperatur $T_{Ref}=T_G=-19°C$.

Fit-Prozess

Es besteht die Aufgabe, die experimentelle Masterkurve durch eine passende Modellfunktion zu fitten. Diese Funktion muß die gesuchten Relaxationszeiten sowie ihre Intensitäten als Parameter enthalten, die es so zu bestimmen gilt, dass die gewählte Fit-Funktion und die experimentelle Masterkurve möglichst gut übereinstimmen.

Mit Hilfe des Marquardt-Algorithmus gelingt es die Messdaten nur dann zu fitten, wenn die eingesetzten Startwerte der Koeffizienten bereits nahe an den Lösungswerten liegen. Da Lösungen jedoch a priori meist nicht bekannt sind, eignen sich Verfahren, die mit einem Koeffizientenbereich arbeiten, wie z. B. das Programm *VISCODATA*, bei komplexeren Funktionen besser als Startwertmethoden (z.B. Regression nach Marquardt).

In den **Abb**. **8a** bis **8d** werden Lösungen des Fitprozesses mit *VISCODATA* für die Fälle N=1, N=3, N=10 und N=15 gezeigt. Die vertikalen Linien stellen die Relaxationsstärken E_i dar (siehe Gleichung 4). Der Fall N=1 (**Abb**. **8a**) entspricht dem sogenannten Standardmodell (3-P-Modell, siehe auch **Abb. 4**) der Viskoelastizitätstheorie. Zwar kann dieses Modell mit nur einer Relaxationszeit die Plateaus im Glaszustand und im gummielastischen Zustand zufriedenstellend beschreiben, aber der Übergang zwischen beiden Zuständen wird nur mangelhaft erfasst.

Der Glasübergang realer Gummimaterialien ist breiter, als es das einfache Drei-Parameter-Modell zu beschreiben gestattet. Um den Übergang korrekt beschreiben zu können, benötigt man nicht nur ein Maxwell Element, sondern mehrere. Die **Abb. 8b** und **8c** zeigen die Verbesserung durch Hinzufügen weiterer Elemente. In **Abb. 8d** besitzt das Modell 15 Maxwell-Elemente, gegenüber dem Modell mit 10 Elementen in **Abb. 8c** ist kaum noch eine Verbesserung des Fehlers zu registrieren. Der Fit-Fehler ist jeweils im Bild angegeben.

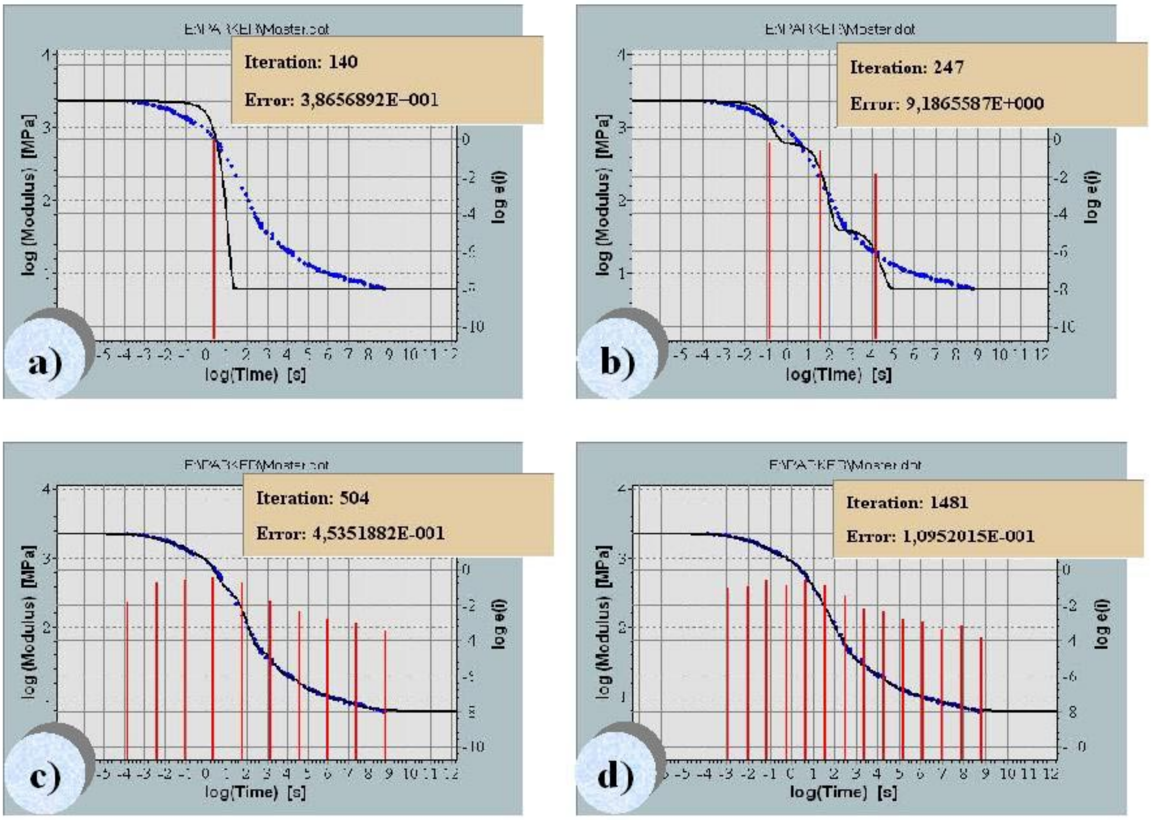

Bild 8: Vergleich von experimenteller Masterkurve und Fitfunktion bei Berücksichtigung unterschiedlich vieler Maxwell-Elemente, respektive Relaxationszeiten: **a)** nach dem Standardmodell; **b)** Modell 3'ter Ordnung; **c)** Modell 10'ter Ordnung; **d)** verallgemeinertes Maxwell-Modell 15'ter Ordnung. Zusätzlich zur Fit-Funktion (schwarze Kurve) ist auch das Linenspektrum der Relaxationszeiten gezeigt (rote Linien).

Es resultiert hieraus jeweils ein Satz von Koeffizienten, die sogenannten Prony-Koeffizienten **[10]** E_i und τ_i, welche die experimentelle Masterkurve in Abhängigkeit von der Ordnung N mit hinreichender Genauigkeit beschreiben können. **Gl.3** zeigt die Fit-Funktion für ein verallgemeinertes Maxwell-Modell N'ter Ordnung:

$$\mathrm{E}(t,T_G) = E_\infty + \sum_{i=1}^{N} E_i \cdot e^{-(t/\tau_i)} \qquad (3)$$

Optimierte Koeffizienten kann man anhand ihrer Kenngrößen, wie z.B. Standardabweichung oder Konfidenzintervall beurteilen. Das Programm *VISCODATA* bietet dazu aber noch ein mehr intuitives Verfahren, indem es die Änderungen der Fit-Koeffizienten im Verlauf der iterativen Verbesserung durch die Evolutionsstrategie im Graphikmodus zeigt. Verändern sich die

Parameter in der nächsten Generation (Iteration), so liefert das Programm die neue Ausgleichskurve. Dieses animierte Vorgehen vermittelt dem Berechnungsingenieur einen besseren Eindruck von der Sensitivität einzelner Koeffizienten als numerische Kennzahlen dies vermögen.

FEA - Resultat des thermoviskoelstischen Verformungsverhaltens einer statischen Dichtung.

In Finite-Elemente-Programmen wird gummielastisches Materialverhalten auf der Grundlage eines elastischen Potentials beschrieben (z.B. MOONEY-RIVLIN Beschreibung). Spielen in einer Anwendung neben rein elastischen Eigenschaften auch noch Zeit- und Temperatureffekte eine Rolle, so überlagert man in der Regel das Konzept der linearen oder nichtlinearen Thermovisko-elastizität mit dem nichtlinearen elastischen Potential. Solche Modelle kommen zum Einsatz, wenn man z.B. das dynamische Verformungsverhalten einer Dichtung in Betracht ziehen muß. An einem bekannten Fall, der Challenger Katastrophe **[12],** soll das Tieftemperatur - Zeit - Verhalten einer statischen Abdichtung mit O-Ringen untersucht werden. An diesem Beispiel läßt sich anschaulich die Bedeutung einer vollständigen Charakterisierung der thermo-viskoelastischen Eigenschaften von Elastomeren zeigen. Hierbei kann die Evolutionsstrategie ein gutes Hilfsmittel sein, weil sie eine schnelle und zuverlässige Ermittlung der viskoelastischen Materialparameter erlaubt.

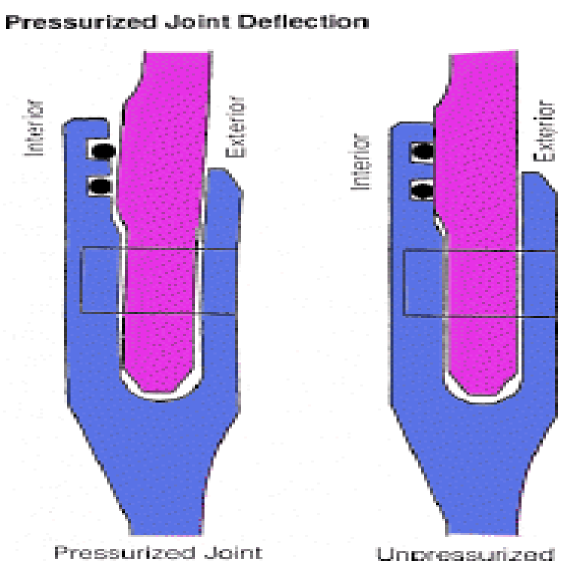

Fig. 9: Fügestelle zwischen zwei Segmenten der Feststoffrakete mit den Dichtringen (aus **[12]**).

Die Verbindungsstelle am unteren Ende der rechten Feststoffrakete **[13,14]** zwischen dem letzten und vorletzten Segment erregte den Hauptverdacht, das Unglück ausgelöst zu haben, da nach der Zündung der Raketen an dieser Stelle Rauch austrat und sich eine Flamme von hier aus während des Fluges ausbreitete. Einzelheiten des Herganges können einer HTML-Päsentation des Internets **[11]** entnommen werden.

Die Temperatur spielte beim Versagen der O-Ringe offensichtlich eine ganz entscheidende Rolle. An dem kalten Vormittag des 28. Januar 1986 wurde eine Temperatur um den Gefierpunkt gemessen. Die Wirkung tiefer Temperaturen bei O-Ringen zeigt sich in einer eingeschränkten Dichtfunktion. Kalte O-Ringe werden sehr steif und bewegen sich nicht so schnell, wie man es von ihnen erwartet.

Abb. 10 zeigt die Konfigurationen des relevanten O-Ring-Querschnittes nach erfolgter Spaltaufweitung bei verschiedenen Temperaturen. Die Bewegung der Wand erfolgt innerhalb von 0.7s aus Position A nach Position B und erreicht dabei einen Wert von 0.73mm

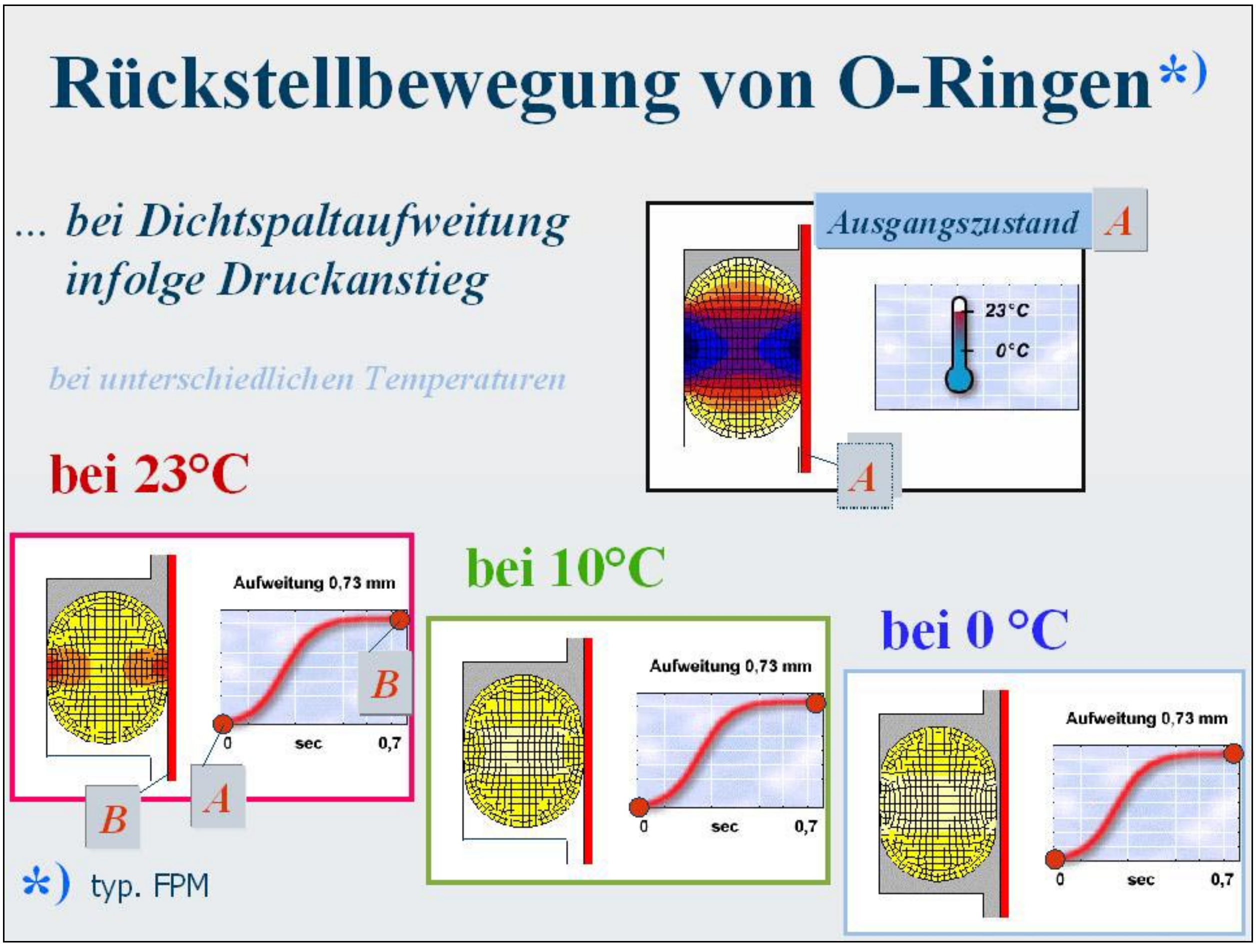

Fig. 10: Gezeigt wird die Konfiguration eines FPM O-Ring jeweils am Ende einer vorgegebenen Deckelbewegung (Aufweitungs-Charakteristik: **A ➔ B**) bei verschiedenen Temperaturen. Unter [12] sind Computeranimationen der hier dargestellten Fälle einsehbar.

Berücksichtigt man, daß sich nach Angaben der NASA der Spalt erst nach einer halben Sekunde zur vollen Größe ausbilden konnte, wird aus Fig.10 offensichtlich, daß bereits bei 10°C keine Dichtkraft mehr gegeben war und bei 0°C mit einem Spalt zwischen dem Gehäuse und dem O-Ring zu rechnen ist, der sich erst allmählich wieder schließen würde (stark verzögerte Rückstellung der zuvor eingeprägten O-Ring Verformung). Damit läßt sich auch erklären, warum bei fast allen Challenger-Missionen die O-Ringe stark beschädigt waren. Nur bei solchen Starts, die bei sommerlichen Temperaturen (>20°C) erfolgten, wiesen die O-Ringe keine Beschädigungen auf. Bei diesen Temperaturen konnte der O-Ring offensichtlich dem sich entwickelnden Spalt folgen, so daß zu jeder Zeit ein Kontakt des O-Ringes mit der Gehäusewand gegeben war und damit Dichtheit gewährleistet werden konnte.

Die obigen Betrachtungen legen nahe, den Grund für die Explosion der Challenger im Versagen der Dichtungen zu suchen. Dieses Versagen kann der unzureichenden Dichtfunktion bei niedrigen Temperaturen zugeschrieben werden, die an jenem Vormittag am Ort des Raketenstarts herrschten. Die O-Ringe waren in ihrem Einbauraum praktisch "eingefroren" und konnten dem schnell entstehenden Spalt nicht ausreichend schnell folgen. In Folge wurden sie von den heißen Gasen "überblasen" und dabei so stark beschädigt, dass sie ihre Funktion einbüßten und es damit zur Entstehung einer Flamme und schließlich zur Explosion der "Challenger Seven" kommen konnte **[11]** .

Die Nachrechnung dieses spektakulären Falles zeigt augenfällig die Bedeutung der Kenntnis des Zeit-Temperatur Zusammenhangs der elastischen Eigenschaften von elastomeren Dichtungsmaterialien. Es ist wichtig, diese Eigenschaften in quantitativer Form zu kennen, damit die Einsatzgrenzen verwendeter Materialien besser eingeschätzt werden können.

Überall, wo Elastomere in der Technik eingesetzt werden und man ihre besonderen thermo-viskoelastischen Eigenschaften vorteilhaft nutzen möchte (z.B. als Dämpfungselement für Motorlager etc.), ist es für die konkrete Auslegung solcher Bauteile von großer Wichtigkeit, über quantitative Angaben der thermo-viskoelastischen Eigenschaften zu verfügen.

6. Ausblick

Es konnte gezeigt werden, dass mit Hilfe der Evolutionsstrategie die Modul-Zeit-Temperatur Materialfunktion von Elastomeren ausgewertet werden kann. Das Programm *ViscoData* wurde inzwischen auch auf Modul-Frequenz-Temperatur Funktionen erweitert. Damit wird der Tatsache Rechnung getragen, dass häufig Dynamisch-Mechanische-Analysen (DMA) im Frequenzraum durchgeführt werden. Speicher- und Verlustmodul liegen in diesem Fall in Abhängigkeit von der Verformungsfrequenz vor. Das Verfahren zur Erzeugung einer zugehörigen Masterkurve verläuft hier ähnlich wie für den vorliegenden Fall der Relaxationsmessungen.

Das Programm *ViscoData*, welches die Evolutionsstrategie als Lösungs-Algorithmus verwendet, wird in Zukunft weitere Funktionalitäten erhalten mit dem Ziel, alle relevanten Materialfunktionen von Elastomeren einer analytischen Auswertung zugänglich zu machen. Als Beispiele hierfür können genannt werden: Kriechmodul-Masterkurve, lineare Ausdehnungsfunktion, quasistatische nichtlineare Formänderungsenergiefunktion u.a.m. Ziel ist eine zuverlässige und schnelle Auswertung experimenteller Daten zur Erzielung aussagefähiger analytischer Materialfunktionen, die u.a. in Finite Elemente Programmen zur anspruchsvollen Materialcharakterisierung eingesetzt werden können.

Literatur

[1] W.H. Press, Numerical Recipes in PASCAL, Cambridge University Press, 1980.

[2] E. Stiefel, Einführung in die numerische Mathematik, Bd.2, 5., erweiterte Auflage 1976, Teubner Verlag.

[3] I. Rechenberg:
Evolutionsstrategie ' 94, frommann-holzboog, Stuttgart-Bad Cannstatt (1994)

[4] M. Herdy:
„Evolutionsstrategie - Grundlegende Methodik und Anwendungen";
HEKONN 96, Herbstschule Konnektionismus und Neuronale Netze, Münster (1996)

[5] M. Herdy: "Beiträge zur Theorie und Anwendung der Evolutionsstrategie", Mensch&Buch, Berlin (2000).

[6] M. Herdy: http//www.ViscoData.de

[7] Ferry, J. D.:
Viscoelastic properties of polymers 3rd. edition; John Wiley, New York (1980)

[8] Ward, I. M.; Hardley, D. W.:
An introduction to the mechanical properties of solid polymers;
John Wiley & Sons (1993)

[9] Achenbach, M., Stehmans, H:
MARC Analysis Research Corporation, European User Conference, 1995.

[10] Prony, R. (1795) "Essai experimentale et analytique" , Journal d' Ecole Polytechnique de Paris 1: 24-76.

[11] Stehmans, H.:
11'te Internationale Dichtungstagung in Dresden, Mai 1999.

[12] Stehmans, H.:
Internet Adresse: http://www.s.netic.de/teamweb; hier findet man weiter Informationen zum Hergang der Challenger Katastrophe

[13] Davinder S. Mahal,
„Space Shuttle Challenger Accident", multimedia research paper,
Internet - Adresse:
http://www.jlhs.nhusd.k12.ca.us/classes/social_science/challenger.html/challenger.html

[14] R. J. Seltzer,
„Faulty joint behind space shuttle disaster", Chemical and Engineering, June 1986