

Künstliche neuronale Netze approximieren den Prozess zur Rezepturherstellung von Naturfaser-Compounds



Rezepturenentwicklung mit künstlichem Gehirn

Softcomputing. Die geschickte Verknüpfung von künstlicher Intelligenz mit Optimierungsalgorithmen reduziert den Versuchsaufwand bei der Rezepturenentwicklung von Naturfaser-Compounds und findet bestmögliche Materialkombinationen.

**LARS ULKE-WINTER
LOTHAR KROLL
STEFAN SCHIERL**

Steigende Preise für erdölbasierte Kunststoffe und die öffentliche Unterstützung biobasierter Kunst- und Verstärkungstoffe erhöhen die Nachfrage nach teilweise biobasierten Kunststoffen [1, 2, 3]. Damit wird diese neue Werkstoffgruppe auch wirtschaftlich immer attraktiver. Einen wesentlichen Anteil bilden hier die naturfaserverstärkten Kunststoffe (NFK), die jedoch derzeit für viele technische Anwendungen ein unzureichendes Eigenschaftsspektrum aufweisen

ARTIKEL ALS PDF unter www.kunststoffe.de
Dokumenten-Nummer KU111090

[4]. Mit der gezielten Entwicklung von an das jeweilige Anforderungsprofil angepassten NFK-Compounds kann deren Anwendungsbereich deutlich erweitert werden. Für NFK existiert, im Unterschied zu den erdölbasierten Kunststoffen, keine Materialdatenbank, aus der das anwendungsgerechte Compound ausgewählt werden kann. Dies erfordert die Entwicklung einer zum Einsatz passenden Rezeptur, was in der Regel umfangreiche Materialcharakterisierungen mit einer großen Variantenvielfalt erforderlich macht. Kommen darüber hinaus mehrere Verstärkungssysteme wie beispielsweise Hanf-, Flachs- oder Holzfasern in Frage und sind zusätzlich verschiedene Anwendungen mit unterschiedlichen Anforderungsprofilen geplant, ist

ein immenser Versuchsaufwand derzeit unumgänglich. Die Kosten für eine derartige optimale Rezepturenentwicklung übersteigen oft das geplante Budget, was den Wettbewerbsvorteil solcher Kunststoffcompounds zunichte macht. Daher wurde an der Professur Strukturleichtbau und Kunststoffverarbeitung (SLK) der Technischen Universität Chemnitz eine Methode entwickelt, die den Versuchsaufwand minimiert und eine numerische Beschreibung des Materialsystems in Verbindung mit deren Herstellung liefert. Unter Zuhilfenahme eines eigens entwickelten Optimierungsalgorithmus erlaubt dieses selbstlernende System, ausgehend von den individuellen Anforderungen, bestmögliche Rezepturen für den jeweiligen Anwendungszweck vorzu-

schlagen. Zusätzlich kann bei Rohstoffengpässen, beispielsweise verursacht durch Ernteausfälle vorab ermittelt werden, wie sich eine Veränderung der verfügbaren Ausgangsstoffe auf das Eigenschaftsspektrum des Compounds auswirkt.

Einflussgrößen im Netz gefangen

Im ersten Schritt wurden die Einflussgrößen der einzelnen Rezepturbestandteile auf die mechanischen Eigenschaften in einem künstlichen neuronalen Netz approximiert. Künstliche neuronale Netze vereinfachen und abstrahieren die wesentlichen Prinzipien natürlicher Nervensysteme von Tieren und Menschen. Deren Gehirn besteht aus einer sehr großen Anzahl an Neuronen, die über Synapsen verbunden sind und über elektrochemische Signale kommunizieren. Die Nachbildung dieser Strukturen werden im Rahmen der Forschungen zur künstlichen Intelligenz und der Bionik durchgeführt. Aufgrund ihrer Selbstorganisation und Adaptionfähigkeit sind sie zur Abbildung von Prozessen mit sehr vielen und teilweise unbekanntem Einflussgrößen besonders prädestiniert [5, 6].

Das Modell eines künstlichen Neuronen besteht aus einem logischen Schwellwertelement mit im Allgemeinen mehreren gewichteten Eingängen und einem Ausgang. Dazu werden die Eingangsgrößen (e_i) entsprechend ihrer Gewichte (w_i) aufsummiert und in Anhängigkeit eines Schwellwertes (Bias Θ) der Ausgang (a_1) des Neuron über eine Transferfunktion aktiviert. Der Ausgang kann damit nur die beiden Zustände annehmen: aktiviert und nicht aktiviert (Bild 1).

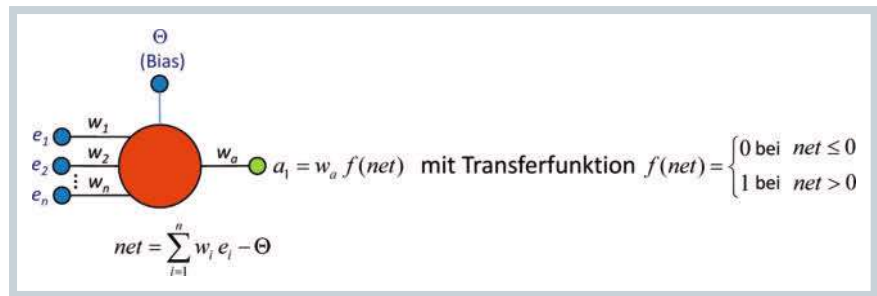


Bild 1. Neuron mit Transferfunktion (Bilder: Professur Strukturleichtbau und Kunststoffverarbeitung (SLK) der TU Chemnitz)

Mehrere Neuronen zu einem gerichteten Graphen aneinandergesetzt bilden dann ein sogenanntes vorwärtsgerichtetes, künstliches neuronales Netz. Dies geschieht typischerweise über mehrere aufeinander aufbauende Schichten (Stufen), wobei die Ausgänge der vorangegangenen Stufe die Eingänge der nachfolgenden bilden. Durch sukzessive Anwendung der Transferfunktion für jede Schicht sowie einer geeigneten Belegung von Wichtungsfaktoren und Schwellwerten der einzelnen Neuronen kann damit das Verhalten eines Prozesses oder Systems in einer derartigen Netzstruktur abgebildet und gespeichert werden (Bild 2).

Zur Beschreibung einzelner Einflussgrößen des Compoundierungsprozesses verschiedener Rezepturen sind damit keine vielschichtigen mathematischen Modelle erforderlich. Vielmehr werden ausgehend von Messdaten die freien Parameter (Wichtungsfaktoren, Schwellwerte) einer konkreten Netzarchitektur unmittelbar bestimmt. Die konkrete Parameterermittlung geschieht dabei durch eine Kombination verschiedener Optimierungsverfahren. Dazu wurden Trainingsdaten anhand von Materialversuchen ermittelt und über eine Regressionsanalyse die Abweichung zwischen den Versuchsdaten und künstlichem neuronalen Netz minimiert. Über Testdaten kann anschließend die Abbildungsgüte beurteilt werden.

Dieses beispielbasierte Lernen erlaubt somit eine sukzessive Verbesserung der Netzqualität während der Rezepturerstellung, wobei auch sich dynamisch ändernde Randbedingungen Berücksichtigung finden. Dies ist insbesondere bei der Herstellung von Kunststoffcompounds in Verbindung mit Naturfasern ein wesentlicher Vorteil, da von unterschiedlichen Chargenqualitäten ausgegangen werden muss.

In Tabelle 1 sind exemplarisch einige Materialrezepturen mit ihren Mischungs-

→

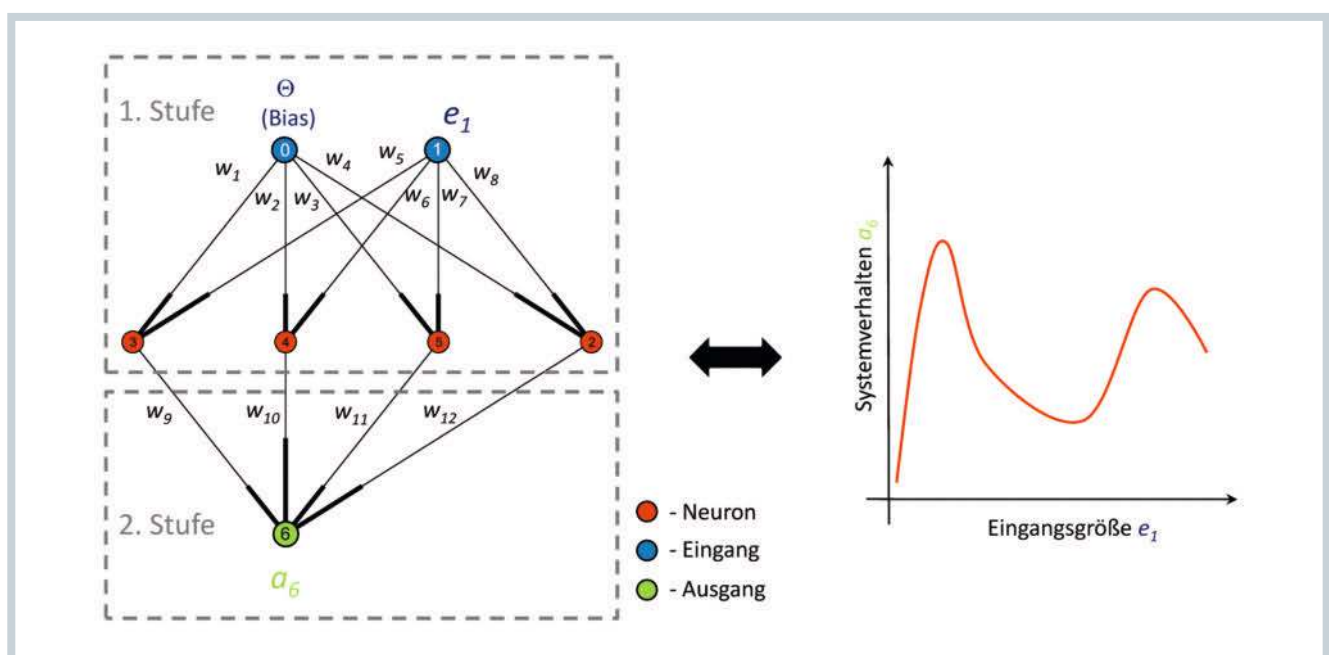


Bild 2. Künstliches neuronales Netz bildet Systemeigenschaften ab



Bild 3. Schematischer Ablauf der Rezepturentwicklung

anteilen in Gew.-% sowie deren zugehörigen, gemessenen Materialeigenschaften wie Zug-Elastizitätsmodul E, die Zugfestigkeit R und die maximale Dehnung ϵ_{\max} dargestellt. Als Matrixmaterial wurden zwei Polypropylyentypen (PP1 und PP2) sowie ein Polyethylen (PE) ausgewählt. Diese wurden mittels Zweischneckencompounder mit unterschiedlichen Flachsfasermaterialien (FL1 und FL2) und einem Holzfasermaterial (HF) unter Zugabe eines Haftvermittlers (HV) compoundiert. Anschließend erfolgte die Materialcharakterisierung der jeweiligen Compounds im Zentrum Integrative Leichtbautechnologien (ZIL) der Professur SLK. Hierzu wurden NFK-Schulterstäbe nach DIN 527 hergestellt und am Strukturprüfstand die mechanischen Eigenschaften ermittelt (**Bild 3**).

Diese Daten dienen im Weiteren als Trainings- und Testmenge zur Approximation in einem vorwärtsgerichteten dreistufigen, künstlichen neuronalen Netz.

Expertenwissen extrahieren

Die Abbildung des Compoundierungsprozesses in Form eines künstlichen neuronalen Netzes gestattet es für noch unbekannt Rezepturen die zu erwartenden Materialeigenschaften zu bestimmen. Das wesentliche Ziel ist dabei, auf Basis eines solchen künstlichen neuronalen Netzes über einen weiteren Algorithmus optimale Rezepturen zu extrahieren. Dafür wurde an der Professur ein entsprechendes Programmsystem entwickelt, das dem Anwender konkrete Rezepturvorschläge mit den individuell geforderten Material-

eigenschaften z.B. hohe Steifigkeit bei ausreichender Festig- und Zähigkeit liefert. Die Grundlage des Optimierungsprogramms bildet dabei ein angepasster genetischer Algorithmus, der biologische Vererbungskonzepte in abstrakter Form (Selektion, Mutation, Kreuzen) nachahmt [7]. Diese Vorgehensweise liefert im Allgemeinen verschiedene Rezepturen mit ähnlichen Materialcharakteristiken. In einem weiteren Schritt können diese unter zusätzlichen Randbedingungen wie etwa Materialkosten, Verfügbar- und Verarbeitbarkeit bewertet werden (**Tabelle 2**).

Fazit

Durch die kombinierte Anwendung von künstlichen neuronalen Netzen zur Approximation der Eigenschaftscharakteris-

PP1 [Gew.-%]	PP2 [Gew.-%]	PE [Gew.-%]	FL 1 [Gew.-%]	FL 2 [Gew.-%]	HF [Gew.-%]	Haftverm. [Gew.-%]	E [MPa]	R [MPa]	ϵ_{\max}
0	57	0	40	0	0	3	2562	25	3,93
47	0	10	40	0	0	3	2860	27	5,31
0	79	0	0	20	0	1	2219	23	2,72
.
.
0	0	60	40	0	0	0	814	8	2,63

Tabelle 1. Materialrezepturen als Trainings und Testmenge für ein künstliches neuronales Netz

PP1 [Gew.-%]	PP2 [Gew.-%]	PE [Gew.-%]	NF 1 [Gew.-%]	NF 2 [Gew.-%]	NF 3 [Gew.-%]	Haftverm. [Gew.-%]	E [MPa]	R [MPa]	ϵ_{max}
36	18	0	23	22	0	1	3065	25	3,44
44	13	1	21	20	0	1	3065	25	3,54
35	16	2	23	23	0	1	3065	25	3,18

Tabelle 2. Verschiedene Materialrezepturen nach Optimierungsdurchlauf

tiken von Materialcompounds in Verbindung mit naturalogenen Optimierungsverfahren kann mit einer deutlichen Zeit und Kostenersparnis bei der Rezepturentwicklung gerechnet werden. Dies ist insbesondere bei schwer zu beschreiben Wechselwirkungen zwischen den Einzelmaterialien oder einer hohen Materialvielfalt vorteilhaft. Da es sich bei dieser Methode um ein selbstlernendes Verfahren handelt, ist eine Erweiterung auf zusätzliche Prozessparameter und den daraus resultierenden Materialeigenschaften zudem unkompliziert möglich. ■

DIE AUTOREN

DIPL.-ING. LARS ULKE-WINTER, geb. 1977, ist wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Chemnitz (SLK); lars.ulke-winter@mb.tu-chemnitz.de
 UNIV.-PROF. DR.-ING. HABIL. LOTHAR KROLL, geb. 1959, ist Leiter der Professur Strukturleichtbau und

Kunststoffverarbeitung (SLK), Direktor des Instituts für Strukturleichtbau der TU Chemnitz sowie Direktor des An-Instituts Cetex gGmbH der TU Chemnitz.
 DIPL.-ING. STEFAN SCHIERL, geb. 1986, ist wissenschaftlicher Mitarbeiter an der TU Chemnitz (SLK).

LITERATUR

- Sherman, L. M.: Commodity & engineering resin prices climb higher. *Plastics Technology* 58 (2012) 4, S. 80–82
- European Commission Enterprise and Industry 2009: Taking Bio-Based From Promise to Market. Measures to promote the market introduction of innovative bio-based products. A report from the Ad-hoc Advisory Group for Bio-based Products, Brussels, 2009
- Druwen, S.-M.: Compounds: Der Natur auf der Spur. *Kunststoffe*, 100 (2010) 3, S. 94–95
- Huber, T. et al.: Naturfaser-Polypropylen: Verstärkung aus der Natur. *Kunststoffe*, 98 (2008) 7, S. 97–101

- Sapuan, S.M., Mujtaba, I.M.: *Composite Materials Technology Neural Network Applications*. CRC Press 2010
- Zakharian, S. et al.: *Neuronale Netze für Ingenieure*. vieweg 1998
- Dréo, J. et al.: *Metaheuristics for Hard Optimization, Simulated Annealing, Tabu Search, Evolutionary and Genetic Algorithms, Ant Colonies, Methods and Case Studies*. Springer 2006

SUMMARY

DEVELOPING FORMULATIONS WITH AN ARTIFICIAL BRAIN

SOFT COMPUTING. Skillful linking of artificial intelligence with optimization algorithms reduces the trial and error in formulating natural fiber compounds, and achieves optimum material combinations.

*Read the complete article in our magazine **Kunststoffe international** and on www.kunststoffe-international.com*