

# Modellierung mikroskopischer Objektverteilungen mittels eines stochastischen Suchverfahrens

Andreas Öchsner, Christoph Henninger  
Universität Erlangen-Nürnberg

Jürgen Gegner  
SKF GmbH

**Zusammenfassung:** Im Bereich der Materialwissenschaften erfordern computergestützte Simulationen häufig die realistische Modellierung räumlicher Objektanordnungen. Im vorliegenden Artikel wird ein mathematisches Werkzeug vorgestellt, das zwei- oder dreidimensionale repräsentative Modellverteilungen definierter Größe mittels eines stochastischen Suchverfahrens ableitet.

**Abstract:** In the field of materials science, computer-aided simulations often require realistic modelling of spatial object arrangements. In the present paper, a mathematical tool is introduced that derives two- or three-dimensional representative model distributions of definite size by means of a stochastic search method.

**Schlüsselwörter:** Objektanordnung, Modellverteilung, stochastisches Suchverfahren, Optimierung

## 1 Einleitung

In der Werkstoffmechanik und Materialkunde ist man für Simulationsrechnungen häufig auf Modellverteilungen von dreidimensionalen Objekten angewiesen. Wichtige Beispiele hierfür stellen die Beschreibung der kollektiven Versetzungsbewegungen in einer disersionsgehärteten Legierung und der Entwicklung lokaler Schädigungen bis zur Rissbildung, die Untersuchung des Einflusses von Poren auf die mechanischen Eigenschaften von Keramiken, Gussbauteilen und Schweißverbindungen, sowie die Analyse von Diffusionsvorgängen unter Beteiligung von Reaktionen an Partikeloberflächen dar. Die Auswertung experimentell gewonnener Daten, die Prozessvorhersage und auch die gezielte Versuchsplanung können durch eine solche Modellierung in vielen Fällen verbessert oder überhaupt erst ermöglicht werden. Verbieten sich, etwa bei Beteiligung heterogener Ausscheidungsvorgänge, einfache statistische Ansätze als Grundlage für die Beschreibung einer vorliegenden Objektverteilung, geht man dazu von licht- oder elektronenmikroskopischen Aufnahmen aus. Durch die Anwendung der digitalen Bildanalyse lassen sich daraus alle erforderlichen Eingabedaten für die Generierung einer Modellverteilung gewinnen (Gegner und Öchsner, 2001). Eine Motivation liegt in der Vorbereitung verfeinerter Simulationsrechnungen zu Randentkohlungsvorgängen in Stählen (Hoffman, 1984; Wittmann, 1990) unter Beteiligung von Carbiden, wobei auch der Einfluss von Seigerungen (heterogen verteilte Quellen) auf den Kohlenstoff-Tiefenverlauf analysiert werden kann. Das im Folgenden vorgestellte Beispiel bezieht sich auf die Segregation von Sauerstoff

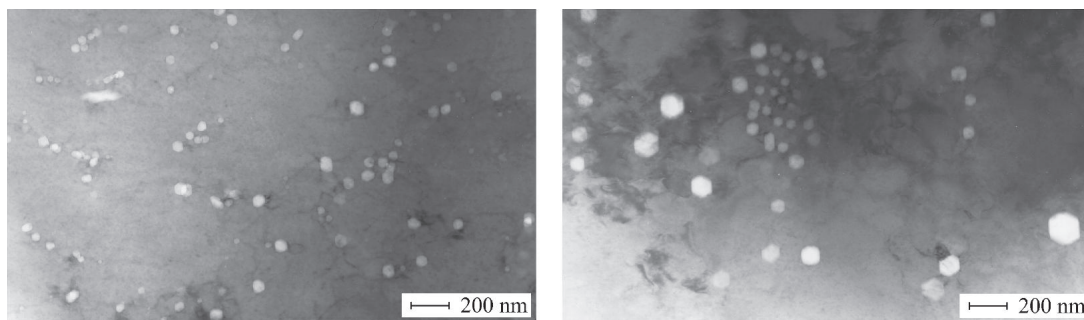


Abbildung 1: TEM-Bilder von MgO-Teilchen, die durch innere Oxidation einer PdMg-Legierung (1 At.-% Mg) an Luft bei 1000 °C in der Pd-Matrix entstanden sind.

bzw. Wasserstoff an inneren Metall-Oxid-Phasengrenzen (Gegner et al., 1997; Gegner, 2002).

Je nach Größe der im Grundgefüge eingebauten Teilchen können die Modellparameter bildanalytisch aus Aufnahmen am Raster- oder Transmissionselektronenmikroskop bzw. lichtoptisch ermittelt werden (Abb. 1). Während die Ableitung thermodynamischer Gleichgewichtsdaten aus gemessenen Isothermen nur die Bestimmung der gesamten Phasengrenzfläche in einer Probe erfordert (Gegner, 1995), setzt die auf Diffusion und Segregation beruhende mathematische Beschreibung der Prozesskinetik die genaue Kenntnis von Ort und Größe der Teilchen voraus. Meist verbietet sich dabei die direkte Verwendung von Objektverteilungen aus mikroskopischen Aufnahmen, da diese gerade bei beschränkter Partikelanzahl nicht repräsentativ sein können. Das im Folgenden vorgestellte automatisierte Verfahren ermöglicht es, die geometrischen Modellparameter zunächst aus einer *beliebigen Anzahl von Bildern* zu gewinnen und anschließend daraus ein Modell in der gewünschten Größe zu generieren.

## 2 Wahl der geometrischen Modellparameter

Als Modellparameter zur Beschreibung der räumlichen Anordnung werden sog. Abstandsverteilungen  $D$  herangezogen. Durch Einteilung des Wertebereichs der Objektabstände in Gruppen erhält man ein Histogramm, das die Häufigkeitsverteilung beschreibt (sog. Abstandshäufigkeitsverteilung 1. Ordnung; Abb. 2 a)). Analog dazu erhält man durch Auswertung der Distanz zum jeweils übernächsten Nachbarobjekts die Verteilung 2. Ordnung, usw.

Um einen realistischen Zusammenhang zwischen der räumlichen Umgebung eines Objekts und dessen Ausdehnung zu erhalten, wird dessen Größe jeweils mit dem die geometrische Anordnung beschreibenden Parameter, den Nächstnachbarabständen, in Zusammenhang gebracht. Berücksichtigt man im Modell nur die Abstandsverteilung 1. Ordnung, so ergibt sich ein 2D-Histogramm, in dem jeweils die Anzahl der Objekte für eine Größenklasse und eine Abstandsklasse aufgetragen wird (Abb. 2 b)).

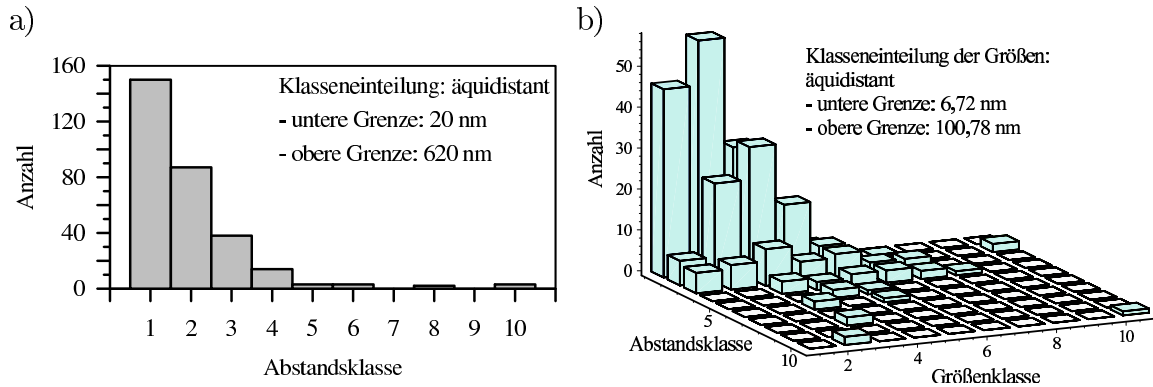


Abbildung 2: a) Aus Abb. 1 gewonnene Abstandshäufigkeitsverteilung 1. Ordnung; b) Größe der Objekte aus Abb. 1 in Abhängigkeit von der Verteilung 1. Ordnung.

### 3 Erstellung des Modells

Da der Modellparameter *Abstandshäufigkeitsverteilung* entkoppelt ist vom Parameter *Größenhäufigkeitsverteilung* ist es möglich, zunächst nur das Problem der räumlichen Anordnung der Objekte zu lösen. In einem zweiten Schritt erfolgt dann die Zuordnung der Objektgrößen.

#### 3.1 Die räumliche Anordnung der Objekte als nichtlineares Optimierungsproblem

Die Aufgabe, eine möglichst gleichmäßige räumliche Anordnung von Punkten gemäß einer gegebenen Abstandshäufigkeitsverteilung zu erstellen, lässt sich nicht explizit durch das Setzen von Punkten nach einem bestimmten Schema lösen. Das Problem besteht darin, dass sich durch das Hinzufügen eines neuen Punktes die Nachbarschaftsbeziehungen der bereits bestehenden Punkte ändern können. Die endgültigen Nachbarschaftsbeziehungen eines neuen Punktes hängen also nicht nur von der Position des Punktes und den bereits bestehenden, sondern auch von den noch in Zukunft hinzuzufügenden Punkten ab.

Betrachtet man eine beliebige Anordnung von  $P$  Punkten, so wird die Abstandshäufigkeitsverteilung  $D_{ist}$  im Allgemeinen nicht der geforderten Verteilung  $D_{soll}$  entsprechen. Da  $D_{ist}$  allein von der räumlichen Position der Punkte abhängt, werden die Koordinaten  $\xi_i = \{\xi_{i1}, \xi_{i2}, \xi_{i3}\}^T$  der Punkte als freie Parameter gewählt und im Parametervektor  $\mathbf{x}$  zusammengefasst:

$$\mathbf{x} = \{\xi_1 \ \xi_2 \ \dots \ \xi_P\}^T; \ \mathbf{x} \in \Phi \quad (1)$$

$\Phi$  bezeichnet dabei den zulässigen Parameterraum. Bei  $DOF$  räumlichen Freiheitsgraden beträgt die Dimension des Parametervektors (und damit des Optimierungsproblems):

$$N = DOF \cdot P \quad (2)$$

Für die Formulierung der Optimierungsaufgabe muss nun eine geeignete Zielfunktion  $F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  definiert werden, die den Parametervektor  $\mathbf{x}$  auf einen reellwertigen Skalar

derart abbildet, dass gilt:

$$F(\mathbf{x}_1) < F(\mathbf{x}_2) \forall \mathbf{x}_1 := \{\mathbf{x} \in \Phi | D_{ist}(\mathbf{x}) = D_{soll}\}, \mathbf{x}_2 := \{\mathbf{x} \in \Phi | D_{ist}(\mathbf{x}) \neq D_{soll}\} \quad (3)$$

Es ist derjenige Parametervektor  $\mathbf{x}$  zu finden, der  $F$  minimiert. Berücksichtigt man nur die Nachbarschaftsbeziehungen erster Ordnung, bietet sich folgende Zielfunktion an:

$$F(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^A (D_{ist,i}(\mathbf{x}) - D_{soll,i})^2 \quad (4)$$

wobei  $A$  die Anzahl der Gruppen im Abstandshistogramm darstellt und  $D_{ist,i}(\mathbf{x})$  und  $D_{soll,i}$  die Stärke der  $i$ -ten Gruppe im jeweiligen Abstandshistogramm bezeichnen. Es gilt

$$F = 0 \text{ für } D_{ist} = D_{soll} \text{ und } F > 0 \text{ für } D_{ist} \neq D_{soll} \quad (5)$$

womit die Bedingung nach Gl. (3) für eine Zielfunktion erfüllt ist. Entscheidend für die Wahl der Lösungsmethode sind die Eigenschaften der Zielfunktion.

### Eigenschaften der Zielfunktion

Variiert man die Position eines Punktes geringfügig (Abb. 3), so ändern sich zwar die Abstände zu seinen Nachbarn, nicht jedoch unbedingt die daraus resultierende Abstandsklasse. Aufgrund der Tatsache, dass sich die Zielfunktion nicht direkt aus dem Parametervektor  $\mathbf{x}$  berechnet, sondern aus den Klassenstärken der Abstandshäufigkeitsverteilung  $D_{ist}(\mathbf{x})$  hervorgeht, ist sie nicht stetig, sondern weist einen Stufencharakter auf (Abb. 4). Aus diesem Grund scheiden zur Lösung des Problems alle Optimierungsverfahren aus, die einfache und höhere Ableitungen der Zielfunktion benötigen. Einen Überblick über diese Verfahren gibt z.B. (Chong und Žak, 1996).

Bei der Auswertung der Zielfunktion ist zu berücksichtigen, dass sich durch die Verschiebung eines Punktes die Nachbarschaftstopologie ändern kann (Abb. 3, Position ② und ④). Es ist also nötig, die Nachbarschaftstopologie nach jeder Variation des Parametervektors  $\mathbf{x}$  neu zu bestimmen.

#### 3.1.1 Lösung mittels einer stochastischen Konstruktionsheuristik

Die geschilderten Eigenschaften der Zielfunktion legen eine Lösung mit Hilfe eines stochastischen Suchverfahrens nahe. Bei diesen Verfahren erfolgt die Ermittlung des optimalen Parametervektors  $\mathbf{x}$  unter Zuhilfenahme von Zufallsprozessen, so dass keine Ableitungen der Zielfunktion benötigt werden.

Für die Lösung des Optimierungsproblems kommen grundsätzlich zwei verschiedene Vorgehensweisen in Frage. Die *Verbesserungsheuristiken* gehen von einem gültigen Lösungsvektor aus und versuchen, diesen durch mehr oder weniger große Veränderungen zu verbessern (hierzu gehören z.B. die sog. MONTE-CARLO-Verfahren). Die *Konstruktionsheuristiken* versuchen dagegen, eine Lösung ohne Vorgabe eines Startvektors aufzubauen. Der Vorteil der Konstruktionsheuristiken liegt in dem meist wesentlich geringeren Rechenaufwand (Wong et al., 2001; Mindl, 1997). Nachteilig erweist sich jedoch, dass

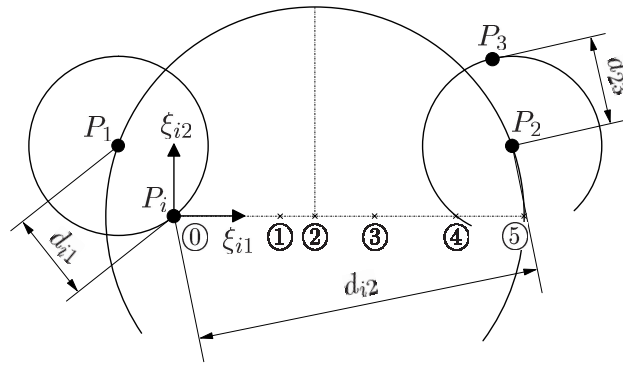


Abbildung 3: Nachbarschaftstopologie beim Verschieben des Punktes  $P_i$  in 1-Richtung:  
 ①:  $P_1$  ist direkter Nachbar von  $P_i$  und  $P_2$  von  $P_3$ .  
 ②:  $d_{i1}$  erhöht sich so weit, dass  $P_i$  einer neuen Abstandsklasse zugeordnet wird.  
 ③:  $d_{i1} = d_{i2} \rightarrow$  Wechsel der Nachbarschaftsbeziehung für  $P_i$ .  $P_2$  ist neuer Nachbarpunkt.  
 ④: Wechsel der Abstandsklasse von  $P_i$ .  
 ⑤:  $d_{i2} = d_{23} \rightarrow$  Wechsel der Nachbarschaftsbeziehung für  $P_2$ .  $P_i$  ist neuer Nachbarpunkt.  
 ⑥: Wechsel der Abstandsklasse von  $P_2$ .

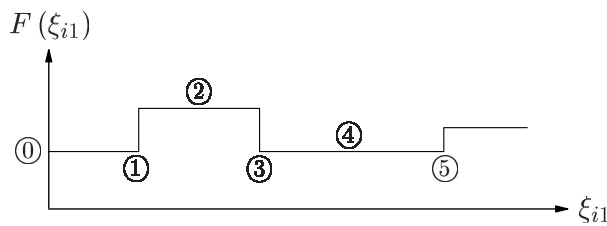


Abbildung 4: Verlauf der Zielfunktion bei Verschieben des Punktes  $P_i$  gemäß Abb. 3.

sich Konstruktionsheuristiken ausschließlich an der lokalen Optimalität in einem Konstruktionsschritt orientieren, welche nicht unbedingt in Einklang mit der geforderten globalen Optimalität stehen muss (Mindl, 1997).

Zur Lösung des Problems mittels einer einfachen stochastischen Konstruktionsheuristik wird zunächst eine gewisse Anzahl von Punkten mittels Zufallszahlengenerator möglichst gleichmäßig verteilt (Phase 1). Eine gleichmäßige Verteilung wird dadurch gewährleistet, dass nur jene Punkte zugelassen werden, die einen Mindestabstand zu ihrem nächsten Nachbarn einhalten. Anschließend werden weitere Punkte erzeugt (Phase 2). Diesmal entscheidet jedoch die Zielfunktion (Gl. (4)) darüber, ob ein erzeugter Punkt ein „guter Punkt“ ist oder nicht. Ein Punkt wird nur übernommen, wenn sich der Wert der Zielfunktion durch das Hinzufügen verringert (sog. *greedy*-Heuristik). In einer dritten Phase werden jene Initialisierungspunkte entfernt, die nach wie vor einen zu großen Abstand zu ihrem nächsten Nachbarn aufweisen, die also keiner Abstandsklasse zugeordnet werden können. Für jeden entfernten Punkt muss nun ein neuer erzeugt werden (Vorgehen wie in Phase 2).

Der einzige vorzugebende Parameter ist die Anzahl der Initialisierungspunkte. Bei gleichmäßigen Verteilungen spielt dieser eine geringe Rolle, beeinflusst aber den Rechenaufwand. Es hat sich gezeigt, dass ein Wert von ca. 10% der Gesamtpunktzahl gute

Ergebnisse liefert. Bei Anordnungen mit Agglomeratbildung lässt sich über die Initialisierungspunkte die Zahl der Punktglomerate steuern. Um die Entstehung vereinzelt liegender Punkte mit einem großen Abstand zum nächsten Nachbarn (Abb. 1, rechts) zu ermöglichen, darf die Anzahl der Initialisierungspunkte nicht zu hoch gewählt werden.

### 3.2 Die Zuordnung der Objektgröße

Da in dem gewählten Modell die Größe eines Objekts nur von seiner Abstandsklasse, nicht jedoch von der Größe benachbarter Objekte abhängt, kann die Zuordnung *explizit* in Abhängigkeit der Abstandsklasse erfolgen. Den Objekten einer Abstandsklasse werden dann die Größenwerte entsprechend der Größenhäufigkeitsverteilung der Abstandsklasse zugewiesen. Als Wert wird dabei der Mittelwert der betreffenden Klasse zugewiesen.

## 4 Beispiel

In Abb. 5 sind zwei Ersatzverteilungen der MgO-Teilchen in der Pd-Matrix dargestellt, deren Modellparameter aus den eingangs gebotenen TEM-Aufnahmen (Abb. 1) ermittelt wurden. Um eine gewisse visuelle Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurden nur diese beiden Bilder ausgewertet, obwohl zur Konstruktion der Ersatzverteilung beliebig viele Aufnahmen berücksichtigt werden können. Exemplarisch wurden Modellverteilungen mit 30 und 300 Objekten generiert. Da die Objektdichte stets mit derjenigen der Ausgangsverteilungen übereinstimmt, ändert sich mit der Objektanzahl entsprechend die äußere Abmessung des jeweiligen Modells. Die Zahl der Initialisierungspunkte betrug 20 bzw. 5.

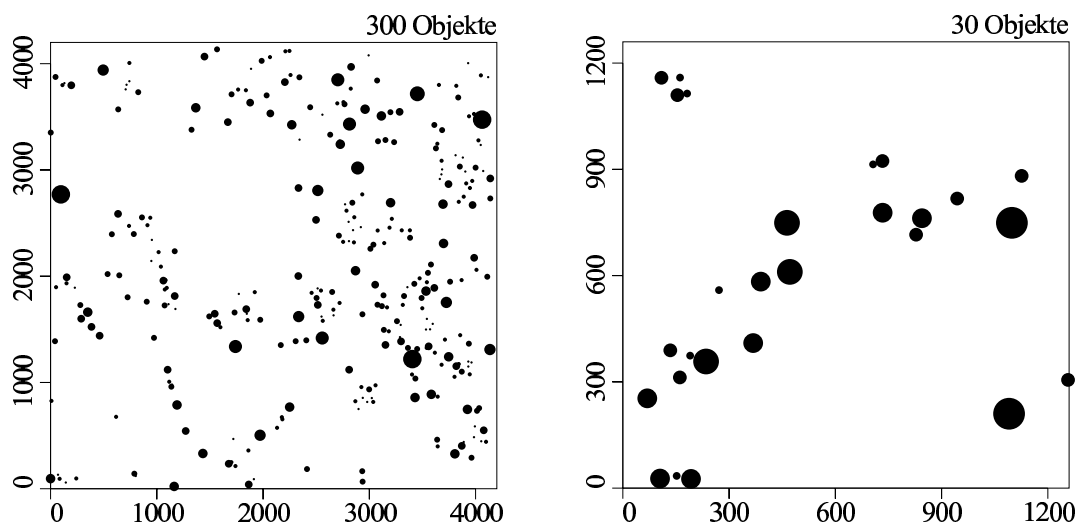


Abbildung 5: Modellverteilungen nach Abb. 1 für 300 und 30 Objekte.

## 5 Ausblick

Für die Erzeugung einfacher Ersatzverteilungen hat sich der beschriebene Algorithmus als geeignet erwiesen. Um die Güte des Modells weiter zu verbessern, ist es wünschenswert,

auch höhere Nachbarschaftsordnungen bei seiner Erzeugung zu berücksichtigen. Die Verwendung einer einfachen Konstruktionsheuristik wie der hier vorgestellten erweist sich dann als ungünstig, da durch die Berücksichtigung höherer Nachbarschaftsordnungen der Zusammenhang zwischen lokaler und globaler Optimalität zunehmend schwindet. Aus diesem Grund muss zunächst geprüft werden, ob eine Verbesserung der Konstruktionsheuristik möglich ist, etwa durch Unterteilen des Problems in kleinere, gleichgeartete Probleme (Wong et al., 2001), oder ob hier die Verwendung von Verbesserungsheuristiken sinnvoller ist (z.B. das *Tabu-Search*, das *Simulated Annealing* oder etwa *Evolutionstrategien*; (Rayward-Smith et al., 1996)). Weiterhin tritt das Problem auf, dass mit Berücksichtigung höherer Nachbarschaftsordnungen nicht mehr nur ein, sondern mehrere Optimierungskriterien erfüllt werden müssen (Mehrkriterienoptimierung).

## Literatur

- E.K.P. Chong and S.H. Zak. *An Introduction to Optimization*. Wiley-Interscience Publications, 1996.
- J. Gegner, G. Hörz, and R. Kirchheim. Segregation of oxygen at metal/oxide-interfaces. *Interface Science*, 5:231–243, 1997.
- J. Gegner und A. Öchsner. Digitale Bildanalyse in der quantitativen Metallographie. *Praktische Metallographie*, 38:499–513, 2001.
- J. Gegner. *Segregation von Sauerstoff an inneren Metall/Oxid-Phasengrenzen*. PhD thesis, Universität Stuttgart, 1995.
- J. Gegner. On the kinetics of oxygen segregation at internal metal-oxide interfaces. In Werkstoffwoche-Partnerschaft, editor, *Proceedings of the Materials Week 2001, International Congress on Advanced Materials, their Processes and Applications, 1st-4th October 2001, 2002*. CD-ROM.
- R. Hoffman. Oxidationsvorgänge bei Wärmebehandlungen unter Schutzgas. Teil I: Allgemeines, Voraussetzungen und Kinetik der Oxidationsvorgänge. *Härtereitech. Mitt.*, 39:61–70, 1984.
- R. Mindl. Anwendung von Methoden der statistischen Physik auf Optimierungsprobleme. Master's thesis, Universität Regensburg, Januar 1997.
- V.J. Rayward-Smith, I.H. Osman and C.R. Reeves, and G.D. Smith. *Modern Heuristic Search Methods*. John Wiley, 1996.
- K. Wittmann. *Zum Einfluß von Randentkohlungerscheinungen auf das Schwingfestigkeitsverhalten verschiedener Wärmebehandlungszustände der Stähle 42 CrMo 4 und 100 Cr 6*. PhD thesis, Universität Karlsruhe, 1990.
- J.L. Wong, Farinaz Koushanfar, Sephan Meguerdichian, and Miodrag Potkonjak. A probabilistic constructive approach to optimization problems. In *IEEE/ACM International Conference on Computer Aided Design (ICCAD)*, pages 453–456, November 2001.

## Adressen der Autoren:

Dr.-Ing. Andreas Öchsner; cand.-ing. Christoph Henninger,  
Universität Erlangen-Nürnberg, Lehrstuhl für Technische Mechanik,  
Egerlandstraße 5, 91058 Erlangen, Deutschland  
E-mail: [oechsner@ltm.uni-erlangen.de](mailto:oechsner@ltm.uni-erlangen.de), [christoph.henninger@gmx.de](mailto:christoph.henninger@gmx.de)

Dr. Jürgen Gegner,  
SKF GmbH, Abt. Werkstoff-Physik,  
Ernst-Sachs-Straße 5,  
97424 Schweinfurt, Deutschland  
E-mail: [juergen.gegner@skf.com](mailto:juergen.gegner@skf.com)