

## **Abstract**

In recent years the consumption of polymer based composites in many engineering fields where friction and wear are critical issues has increased enormously. Satisfying the growing industrial needs can be successful only if the costly, labor-intensive and time-consuming cycle of manufacturing, followed by testing, and additionally followed by further trial-and-error compounding is reduced or even avoided. Therefore, the objective is to get in advance as much fundamental understanding as possible of the interaction between various composite components and that of the composite against its counterface. Sliding wear of polymers and polymer composites involves very complex and highly nonlinear processes. Consequently, to develop analytical models for the simulation of the sliding wear behavior of these materials is extremely difficult or even impossible. It necessitates simplifying hypotheses and thus compromising accuracy. An alternative way, discussed in this work, is an artificial neural network based modeling. The principal benefit of artificial neural networks (ANNs) is their ability to learn patterns through a training experience from experimentally generated data using self-organizing capabilities.

Initially, the potential of using ANNs for the prediction of friction and wear properties of polymers and polymer composites was explored using already published friction and wear data of 101 independent fretting wear tests of polyamide 46 (PA 46) composites. For comparison, ANNs were also applied to model the mechanical properties of polymer composites using a commercial data bank of 93 pairs of independent Izod impact, tension and bending tests of polyamide 66 (PA 66) composites. Different stages in the development of ANN models such as selection of optimum network configuration, multi-dimensional modeling, training and testing of the network were addressed at length. The results of neural network predictions appeared viable and very promising for their application in the field of tribology.

A case example was subsequently presented to model the sliding friction and wear properties of polymer composites by using newly measured datasets of polyphenylene sulfide (PPS) matrix composites. The composites were prepared by twin-screw extrusion and injection molding. The dataset investigated was generated from pin-on-disc testing in dry sliding conditions under various contact pressures and slid-

ing speeds. Initially the focus was placed on exploring the possible synergistic effects between traditional reinforcements and particulate fillers, with special emphasis on sub-micro TiO<sub>2</sub> particles (300 nm average diameter) and short carbon fibers (SCFs). Subsequently, the lubricating contributions of graphite (Gr) and polytetrafluoroethylene (PTFE) in these multiphase materials were also studied. ANNs were trained using a conjugate gradient with Powell/Beale restarts (CGB) algorithm as well as a variable learning rate backpropagation (GDX) algorithm in order to learn composition-property relationships between the inputs and outputs of the system. Likewise, the influence of the operating parameters (contact pressure (p) and sliding speed (v)) was also examined. The incorporation of short carbon fibers and sub-micro TiO<sub>2</sub> particles resulted in both a lower friction and a great improvement in the wear resistance of the PPS composites within the low and medium pv-range. The mechanical characterization and surface analysis after wear testing revealed that this beneficial tribological performance could be explained by the following phenomena: (i) enhanced mechanical properties through the inclusion of short carbon fibers, (ii) favorable protection of the short carbon fibers by the sub-micro particles diminishing fiber breakage and removal, (iii) self-repairing effects with the sub-micro particles, (iv) formation of quasi-spherical transfer particles free to roll at the tribological contact. Still, in the high pv-range stick-slip sliding motion was observed with these hybrid materials. The adverse stick-slip behavior could be effectively eliminated through the additional inclusion of solid lubricant reservoirs (Gr and PTFE), analogous to the lubricants used in real ball bearings. Likewise, solid lubricants improved the wear resistance of the multiphase system PPS/SCF/TiO<sub>2</sub> in the high pv-range ( $\geq 9$  MPa·m/s). Yet, their positive effect, especially that of graphite, was limited up to certain volume fraction and loading conditions. The optimum results were obtained by blending comparatively low amounts of Gr and PTFE ( $\approx 5$  vol.% from each additive). An introduction of softer sub-micro particles did not bring the desired ball bearing effect and fiber protection. The ANN prediction profiles for PPS tribo-compounds exhibited very good or even perfect agreement with the measured results demonstrating that the target of achieving a well trained network was reached. The results of employing a validation test dataset indicated that the trained neural network acquired enough generalization capability to extend what it has learned about the training patterns to data that it has not seen before from the same knowledge domain.

Optimal brain surgeon (OBS) algorithm was employed to perform pruning of the network topology by eliminating non-useful weights and bias in order to determine if the performance of the pruned network was better than the fully-connected network. Pruning resulted in accuracy gains over the fully-connected network, but induced higher computational cost in coding the data in the required format. Within an importance analysis, the sensitivity of the network response variable (frictional coefficient or specific wear rate) to characteristic mechanical and thermo-mechanical input variables was examined. The goal was to study the relationships between the diverse input variables and the characteristic tribological parameters for a better understanding of the sliding wear process with these materials. Finally, it was demonstrated that the well-trained networks might be applied for visualization what will happen if a certain filler is introduced into a composite, or what the impacts of the testing conditions on the frictional coefficient and specific wear rate are. In this way, they might be a helpful tool for design engineers and materials experts to explore materials and to make reasoned selection and substitution decisions early in the design phase, when they incur least cost.

## Kurzfassung

In den letzten Jahren haben sich die Einsatzgebiete für Polymer-Verbundwerkstoffe in vielen technischen Bereichen, in denen Reibung und Verschleiß kritische Faktoren sind, erheblich ausgeweitet. Um dem wachsenden Industribedarf nachzukommen, sollte der teure, arbeitsintensive und zeitaufwendige Zyklus der Herstellung, gefolgt von Prüfung und einer weiteren Trial-and-Error Compoundierung verringert oder sogar komplett vermieden werden. Die Zielsetzung ist es daher ein grundlegendes Verständnis der Wechselwirkung sowohl zwischen den einzelnen Verbundkomponenten als auch zwischen dem Verbund und dem Gegenkörper zu erhalten. Gleitverschleiß bei Polymeren und Verbundwerkstoffen weist hochkomplexe und nichtlineare Vorgänge auf. Somit ist die Entwicklung analytischer Modelle für deren Simulation äußerst schwierig oder nahezu unmöglich. Sie erfordert die Vereinfachung von Hypothesen, wodurch die Genauigkeit deutlich vernachlässigt wird. Eine andere Alternative, welche in der vorliegenden Arbeit vorgestellt ist, bietet die künstliche neuronale Netzwerksmodellierung. Der größte Vorteil der künstlichen neuronalen Netze ist ihre Fähigkeit durch die wiederholte Eingabe von Trainingsmustern selbständig zu lernen.

Zunächst wurde das Potential des Ansatzes für die künstlichen neuronalen Netzwerke zur Vorhersage des Verschleißverhaltens von Polymeren und Verbundwerkstoffen unter Verwendung existierender, experimenteller Daten aus 101 unabhängigen Schwingverschleißuntersuchungen an Polyamid 46 (PA 46) analysiert. Zum Vergleich wurden künstliche neuronale Netzwerke eingesetzt, um die mechanischen Eigenschaften von Polymer-Verbundwerkstoffen unter Verwendung einer kommerziellen Datenbank (93 Paare von einzelnen Izod-Schlag, Zug- und Biege- Versuchen an Polyamid 66 (PA 66) Verbundwerkstoffen) zu modellieren. Unterschiedliche Phasen zur Entwicklung eines neuronalen Netzwerks sowie die Auswahl der optimalen Netzwerkskonfiguration, multidimensionale Modellierung, Netzwerk-Training und -Test wurden ausführlich erforscht. Die Ergebnisse der Vorhersage des neuronalen Netzes erschienen erfolgversprechend für deren Anwendung im Bereich der Tribologie.

Anschließend wurde anhand einer Fallstudie eine Analyse der Effizienz des Ansatzes zur Modellierung der Gleitreibung und des Verschleißverhaltens von Polymer-Verbundwerkstoffen durch die Verwendung von neu gemessenen Datensätzen an

Verbundwerkstoffen auf Polyphenylensulfidbasis (PPS) durchgeführt. Die Werkstoffe wurden mittels Doppelschneckenextrusionsverfahren hergestellt und durch Spritzgießverfahren weiterverarbeitet. Der experimentelle Datensatz wurde aus Stift-Scheibe Versuchen unter Trockenlaufbedingungen bei Anwendung unterschiedlicher Belastungskollektive generiert. Zu Beginn wurden die synergetischen Effekte zwischen konventionelle Verstärkung und Partikelfüllstoffen analysiert, wobei die einzelnen Schwerpunkte auf Titandioxid ( $\text{TiO}_2$ ) Submikropartikeln (300 nm Durchschnittsdurchmesser) und kurzen Kohlenstofffasern lagen. Danach wurde die Mitwirkung von den Schmierstoffen Graphit und Polytetrafluorethylen (PTFE) bei diesen mehrphasigen Werkstoffen untersucht. Als Lernregel diente der konjugierten Gradientenabstieg (CGB) Algorithmus sowie das GDX Trainingsverfahren. Auch der Einfluss der Versuchsparameter (Flächenpressung ( $p$ ) und Gleitgeschwindigkeit ( $v$ )) wurde betrachtet. Werkstofflich ergab die Einarbeitung kurzer Kohlenstofffasern und Titandioxid Submikropartikeln eine signifikante Verbesserung in der Verschleißfestigkeit der PPS-Tribowerkstoffe im unteren bis mittleren  $p$ - $v$ -Bereich. Die mechanischen Eigenschaften und Oberflächencharakterisierung nach dem Verschleißtest ließen erkennen, dass diese positive Wirkung auf die tribologischen Eigenschaften mit den folgenden Phänomenen erklärt werden konnte: (i) verbesserte mechanische Eigenschaften mit den Kohlenstofffasern, (ii) erfolgreicher Schutz der Kohlenstofffasern durch die Titandioxid-Submikropartikel mit einer Verminderung des Faserbruches und der Faserherauslösung, (iii) selbstreparierende Effekte mit den Submikropartikeln, (iv) Entstehung quasi-sphärischer Verschleißpartikel, die zum Teil frei in der Kontaktoberfläche (Grenzschicht) abrollen können. Dennoch wiesen diese hybriden Werkstoffsysteme ein Stick-Slip-Verhalten im höheren  $p$ - $v$ -Bereich auf. Das gefürchtete Stick-Slip-Verhalten konnte wirksam beseitigt werden durch zusätzliche Einarbeitung von Festschmierstoffen (Graphit und PTFE), welche als Reservoir dienen, analog zu den Schmierstoffen in realen Kugellagern. Ebenso haben die Festschmierstoffe die Verschleißfestigkeit des mehrphasigen Systems PPS/SCF/ $\text{TiO}_2$  im höheren  $p$ - $v$ -Bereich ( $\geq 9 \text{ MPa}\cdot\text{m/s}$ ) verbessert. Allerdings war ihre positive Wirkung, insbesondere die von Graphit, beschränkt auf bestimmte Volumenanteile und Lastbedingungen. Die bestmöglichen Ergebnisse wurden durch die Kombination von relativ geringen Mengen an Graphit und PTFE ( $\approx 5 \text{ vol.}\%$  von jedem Zusatzstoff) erzielt. Die Einführung von weicheren Submikropartikeln brachte nicht den gewünschten Kugellager-

Effekt und den Faserschutz. Die vorhergesagten Eigenschaftsprofile durch das neuronale Netzwerk zeigten eine sehr gute beziehungsweise perfekte Übereinstimmung mit den experimentell gemessenen Ergebnissen und bewiesen, dass die Zielsetzung, ein gut trainiertes Netzwerk zu generieren, gelungen ist. Die Ergebnisse mit dem Validierungsdatensatz wiesen darauf hin, dass das trainierte neuronale Netzwerk eine ausreichende Generalisierungsfähigkeit erworben hatte und in der Lage ist, die richtigen Ausgabewerte für die nicht im Trainingssatz enthaltenen Eingabedaten zu liefern. Ein Optimal Brain Surgeon (OBS) Verfahren wurde eingesetzt, um unnötige Verbindungsgewichte und Schwellenwert, die keine Relevanz auf das Ergebnis haben, zu eliminieren. Nachher wurde überprüft, ob der Pruning Algorithmus OBS für die untersuchte Aufgabenstellung bessere Ergebnisse bezüglich Generalisierung als das ebenfalls untersuchte, voll vernetzte neuronale Netzwerk aufwies. Trotz Zugewinn an Genauigkeit mit der signifikant reduzierten Netzwerkstopologie war dieses Verfahren äußerst rechenintensiv, da eine Datenkodierung im obligatorischen Format erforderlich war. Innerhalb einer Wichtigkeitsanalyse wurde die Abhängigkeit der Netzwerk-Ausgangsgröße (Reibungskoeffizient oder spezifische Verschleißrate) von charakteristischen, mechanischen und thermomechanischen Eingangsgrößen untersucht. Zielsetzung war es die Ableitung möglicher Schlüsse aus dem ANN-Ansatz, die zum Verständnis der Mechanismen des Verschleißvorganges bei diesen Werkstoffen beitragen können, zu ermitteln. Schließlich wurde gezeigt, dass erfolgreich trainierte neuronale Netzwerke für eine Visualisierung des Einflusses gewisser Füllstoffe oder Prüfbedingungen auf die Verschleißigenschaften angesetzt werden könnten. Dadurch könnten solche Netzwerke ein hilfreiches und nützliches Instrument für die Entwicklungsingenieure und Werkstoff-Experten sein, um neue Materialien zu erforschen und begründete Entscheidungen zur Auswahl und Umtausch von Werkstoffen schon in einer sehr frühen Entwicklungsphase zu treffen, um dadurch die Kosten so gering wie möglich zu halten.