



(12) **Offenlegungsschrift**

(21) Aktenzeichen: **10 2019 216 933.3**

(22) Anmeldetag: **04.11.2019**

(43) Offenlegungstag: **06.05.2021**

(51) Int Cl.: **G06F 30/00 (2020.01)**

(71) Anmelder:
Robert Bosch GmbH, 70469 Stuttgart, DE

(72) Erfinder:
**Klinsmann, Markus, 70195 Stuttgart, DE; Spitz,
Jonathan, 71229 Leonberg, DE**

(56) Ermittelter Stand der Technik:
US 2014 / 0 046 469 A1

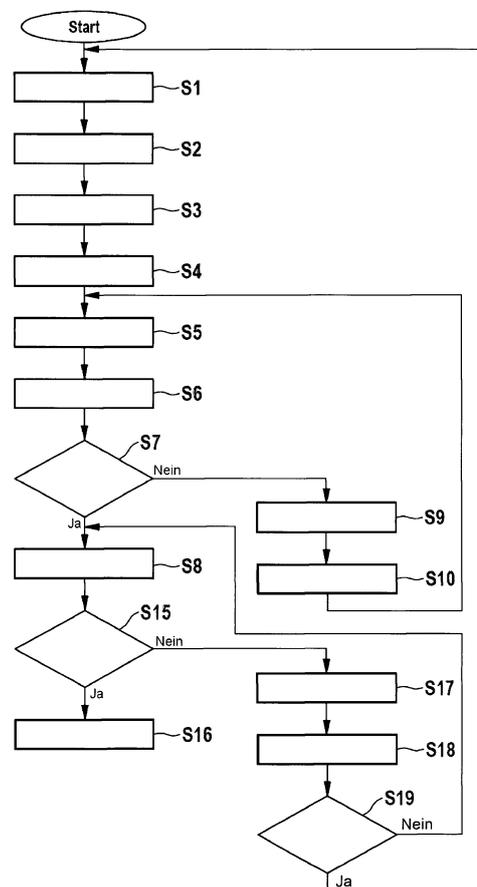
Prüfungsantrag gemäß § 44 PatG ist gestellt.

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen.

(54) Bezeichnung: **Verfahren und System zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung zur Verwendung in einem Pastendruckprozess**

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung bezieht sich auf ein computerimplementiertes Verfahren zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung für eine beabsichtigte Druckanwendung unter Verwendung einer Materialsimulation zum Simulieren von Pasteneigenschaften, wobei die Materialsimulation ein Simulationsmodell verwendet, das durch Simulationsparameter festgelegt ist; das die folgenden Schritte umfasst:

- Wählen (S1) einer Pastenzusammensetzung zum Durchführen einer Drucksimulation,
- Bestimmen (S10) von Simulationsparametern auf der Grundlage einer gewählten Pastenzusammensetzung mittels eines trainierten datenbasierten Simulationsparametermodells und
- Durchführen (S8) einer Drucksimulation unter Verwendung der bestimmten Simulationsparameter, um Pasteneigenschaften für die gewählte Pastenzusammensetzung zu bestimmen.



Beschreibung

Technisches Gebiet

[0001] Die vorliegende Erfindung bezieht sich auf technische Pasten zur Verwendung in einem Pastendruckprozess, insbesondere zum Herstellen verschiedener Produkte wie z. B. Abgassensoren, Zündkerzen, LTCC für Steuereinheiten, PEMFC, SOFC und dergleichen. Darüber hinaus bezieht sich die vorliegende Erfindung auf Verfahren zum Bestimmen einer geeigneten Pastenzusammensetzung auf der Grundlage von Material- und Druckeigenschaften, die für die jeweilige Anwendung erforderlich sind.

Technischer Hintergrund

[0002] Pastendruckvorgänge wie z. B. Schablonenducken, Siebdrucken oder dergleichen bringen eine Paste eines Funktionsmaterials auf eine Schablone oder eine Maske auf. Durch Aufbringen der Paste auf die Schablone oder durch die Maske auf ein Substrat wird ein Druckprozess durchgeführt. Die Qualität der Darstellung des Maskenmusters hängt im Wesentlichen von den Eigenschaften des verwendeten Pastenmaterials ab.

[0003] Bisher ist die Entwicklung von Pasten für Druckvorgänge empirisch und wird unter Verwendung von Expertenwissen in Kombination mit Material- und Prozesssimulationen vorgenommen. Gemäß diesem herkömmlichen Ansatz wird eine Paste entwickelt, gebildet und verarbeitet, wie sie z. B. zum Drucken oder dergleichen verwendet wird. Der Prozess und Charakteristiken/Eigenschaften der verarbeiteten Paste oder des verarbeiteten Produkts werden durch Messungen analysiert, um die Produkteigenschaften zu erhalten, um zu bestimmen, ob die verwendete Pastenzusammensetzung die Anforderungen des Verarbeitens und des verarbeiteten Produkts erfüllt. Ein derartiger Ansatz ist material- und zeitaufwändig.

Zusammenfassung der Erfindung

[0004] Gemäß der Erfindung werden ein Verfahren zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung unter Verwendung einer Materialsimulation zum Simulieren von Pasteneigenschaften nach Anspruch 1 und ein System gemäß dem weiteren unabhängigen Anspruch geschaffen.

[0005] Weitere Entwicklungen sind in den abhängigen Unteransprüchen angegeben.

[0006] Gemäß einem ersten Aspekt wird ein Verfahren zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung unter Verwendung einer Materialsimulation zum Simulieren von Pasteneigenschaften geschaffen, wobei die Materialsimulation ein Simulationsparameter-

modell, das durch Simulationsparameter festgelegt wird, verwendet; das die folgenden Schritte umfasst:

- a) Wählen einer Pastenzusammensetzung zum Durchführen einer Drucksimulation,
- b) Bestimmen von Simulationsparametern auf der Grundlage einer gewählten Pastenzusammensetzung mittels eines vortrainierten Simulationsparametermodells, das trainiert wurde zum;
- c) Durchführen einer Drucksimulation unter Verwendung der bestimmten Simulationsparameter, um Pasteneigenschaften der gewählten Pastenzusammensetzung zu bestimmen.
- d) Bewerten der Ergebnisse der Drucksimulation, um simulierte Pasteneigenschaften, die für die beabsichtigte Druckanwendung geeignet sind, zu bestimmen.

[0007] Ein Gedanke der vorliegenden Erfindung ist, ein Simulationsparametermodell zum Simulieren von Pasteneigenschaften einer Pastenzusammensetzung, d. h. Materialeigenschaften einer Pastenzusammensetzung und Verarbeitungseigenschaften, die anzeigen, wie gut die bestimmte Pastenzusammensetzung zur beabsichtigten Druckanwendung passt, zu schaffen.

[0008] Darüber hinaus können die Ergebnisse der Drucksimulation ausgewertet werden, um simulierte Pasteneigenschaften zu bestimmen, die für die beabsichtigte Anwendung geeignet sind. Dies ermöglicht einem Experten, eine geeignete Pastenzusammensetzung mit gegebenen Pasteneigenschaften in einem empirischen Prozess zu finden. Ein Verwenden des Simulationsparametermodells ermöglicht, eine gegebene Pastenzusammensetzung in Bezug auf gewünschte Pasteneigenschaften zu bewerten, ohne tatsächlich einen Druckdurchlauf durchzuführen, derart, dass Druckergebnisse mit verschiedenen Pastenzusammensetzungen in einer wirksameren Weise erprobt werden können.

[0009] Insbesondere werden die Schritte a) bis c) iterativ wiederholt, bis die simulierten Pasteneigenschaften, die durch die Drucksimulation erhalten werden, die Anforderungen der beabsichtigten Druckanwendung erfüllen.

[0010] Gemäß einer Ausführungsform kann das Simulationsparametermodell mittels eines Bayes'schen Optimierungsprozesses trainiert werden, der die folgenden Schritte umfasst:

- iteratives Wählen von Pastenzusammensetzungskandidaten;
- Messen von Pasteneigenschaften einer angefertigten Paste, die dem gewählten Zusammensetzungskandidaten entspricht

- Trainieren des Simulationsparametermodells durch Variieren der Simulationsparameter gemäß einer Erfassungsfunktion und eines Qualitätsmaßes, das durch eine Qualitätsfunktion erhalten wird;

wobei die Qualitätsfunktion konfiguriert ist, eine Eigenschaftsfunktion auszuwerten, die eine Abweichung zwischen simulierten und gemessenen Pasteneigenschaften repräsentiert, wobei die simulierten Pasteneigenschaften durch Durchführen der Materialsimulation auf der Grundlage von Simulationsparametern, die durch das Simulationsparametermodell auf der Grundlage des Pastenzusammensetzungskandidaten bestimmt werden, erhalten werden; wobei

die Erfassungsfunktion konfiguriert ist, einen nächsten Simulationsparameterkandidaten zum Trainieren des Simulationsparametermodells abhängig vom Ist-Trainingszustand der Qualitätsfunktion zu wählen.

[0011] Während das Simulationsparametermodell trainiert wird, wird eine gewählte Pastenzusammensetzung z. B. durch Messung ausgewertet, um gemessene Pasteneigenschaften zu erhalten. Darüber hinaus wird eine Simulation, die mittels eines Simulationswerkzeugs ausgeführt wird, unter Verwendung von Simulationsparametern vorgenommen. Die Simulation kann eine numerische, partikelbasierte Simulation der Pasteneigenschaften und das Pastenverhalten während des Druckprozesses beinhalten. Zunächst können die Simulationsparameter zufällig gewählt oder gemäß Expertenwissen bereitgestellt werden. Als das Ergebnis der Simulationsausführung werden simulierte Pasteneigenschaften erhalten.

[0012] Ein Bayes'scher Optimierungsprozess wird mit einigen Wiederholungen des Erhaltens gemessener und simulierter Pasteneigenschaften durchgeführt, derart, dass Simulationsparameter optimiert werden können. Ein Zuordnen geeigneter Simulationsparameter zu einer gewählten Pastenzusammensetzung ermöglicht, simulierte Pasteneigenschaften zu erhalten, die in Nähe der realen Pasteneigenschaften, die mittels Messung erhalten werden, liegen oder ihnen im Wesentlichen entsprechen. Der Bayes'sche Optimierungsprozess kann mit verschiedenen Pastenzusammensetzungen wiederholt werden, um ein Training für verschiedene Pastenzusammensetzungen zu ermöglichen. Das trainierte Simulationsmodell kann dann verwendet werden, um die richtige Pastenzusammensetzung für gegebene Pasteneigenschaften zu wählen.

[0013] Im weiteren Prozess wird zum Bestimmen einer geeigneten Pastenzusammensetzung eine gewählte möglicherweise geeignete Pastenzusammensetzung mittels eines Simulationsdurchlaufs unter Verwendung zugeordneter Simulationsparameter simuliert. Die zugeordneten Simulationsparameter

werden mittels des trainierten Simulationsparametermodells unter Verwendung der gewählten Pastenzusammensetzung erhalten.

[0014] Darüber hinaus wird eine Drucksimulation vorgenommen, die zeigt, ob ein Drucken unter Verwendung der gewählten Pastenzusammensetzung in zufriedenstellenden Druckergebnissen resultiert. Die Paste wird zum tatsächlichen Drucken verwendet, wenn die Drucksimulation Druckergebnisse zeigt, die zufriedenstellend sind; andernfalls wird eine neue Pastenzusammensetzung gewählt und ein neuer Simulationsdurchlauf wird gestartet.

[0015] Es kann vorgesehen sein, dass die Pasteneigenschaften Materialeigenschaften des gehärteten/getrockneten Pastenmaterials in einer Form, in der die Paste im herzustellenden Produkt erscheint, wie z. B. eine oder mehrere von elektrischer Leitfähigkeit, Wärmeleitfähigkeit, Dauerhaftigkeit, Härte und Beständigkeit gegen äußere Belastungen wie z. B. Licht und Umgebung und/oder Materialeigenschaften der nicht gehärteten/nicht getrockneten Paste wie z. B. eine Rheologie und/oder eine Partikelgröße beinhalten und/oder die Pasteneigenschaften Druckeigenschaften beinhalten, die die Eigenschaften, die die Verarbeitbarkeit beeinflussen, entsprechen.

[0016] Gemäß einer Ausführungsform wird die Pastenzusammensetzung durch Bestimmen von Materialien und Anteilen der Materialien gewählt.

[0017] Insbesondere kann das Wählen der Pastenzusammensetzung ein Abfragen insbesondere mittels einer Datenverarbeitungseinheit, um die gewählte Pastenzusammensetzung über eine Eingabevorrichtung einzugeben, und/oder ein automatisches Variieren der Pastenzusammensetzung beinhalten.

[0018] Insbesondere nachdem festgestellt wurde, dass die Ergebnisse der Drucksimulation für die beabsichtigte Anwendung geeignet sind, kann eine Paste gemäß der gewählten Pastenzusammensetzung angefertigt werden, wobei dann, wenn festgestellt wird, dass die angefertigte Paste nicht für die beabsichtigte Anwendung geeignet ist, die angefertigte Paste als ein Pastenzusammensetzungskandidat für eine weitere Wiederholung des Bayes'schen Optimierungsprozesses verwendet wird.

[0019] Gemäß einem weiteren Aspekt wird eine Vorrichtung zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung für eine beabsichtigte Druckanwendung unter Verwendung einer Materialsimulation zum Simulieren von Pasteneigenschaften geschaffen, wobei die Materialsimulation ein Simulationsmodell verwendet, das durch Simulationsparameter festgelegt wird; wobei die Vorrichtung konfiguriert ist, die folgenden Schritte durchzuführen:

- a) Wählen einer Pastenzusammensetzung zum Durchführen einer Drucksimulation,
- b) Bestimmen von Simulationsparametern auf der Grundlage einer gewählten Pastenzusammensetzung mittels eines trainierten datenbasierten Simulationsparametermodells;
- c) Durchführen einer Drucksimulation unter Verwendung der bestimmten Simulationsparameter, um Pasteneigenschaften für die gewählte Pastenzusammensetzung zu bestimmen.

Figurenliste

[0020] Ausführungsformen der Erfindung werden in Verbindung mit den begleitenden Zeichnungen genauer beschrieben; es zeigen:

Fig. 1 schematisch ein Pastendrucksystem zum Drucken von Strukturen unter Verwendung einer Paste,

Fig. 2a und **Fig. 2b** Beispiele von Prozessschritten für einen Schablonendruckprozess bzw. einen Siebdruckprozess und

Fig. 3 einen Ablaufplan, der ein Verfahren zum Trainieren eines Pastensimulationsmodells darstellt.

Beschreibung der Ausführungsformen

[0021] **Fig. 1** zeigt ein Pastendrucksystem **1** zum Drucken eines pastenartigen Materials wie z. B. eines Lots, einer Druckfarbe oder dergleichen. Das Pastendrucksystem **1** besitzt einen Behälter **2**, der die Paste enthält, die auf ein Produkt **3**, das auf einem Halter **4** angeordnet ist, aufgebracht werden soll. Das Aufbringen der Paste wird durch einen Pastenspender **5** vorgenommen.

[0022] Zum Beispiel kann die Paste durch eine Druckdüse des Pastenspenders oder durch Aufbringen der Paste auf eine Maske, die auf dem Produkt **3** versetzt wird, aufgebracht werden.

[0023] Der Druckprozess kann durch eine Steuereinheit **6** gesteuert werden.

[0024] Zum Beispiel zeigt **Fig. 2a** die Prozessschritte eines Schablonendruckprozesses, der die folgenden Schritte beinhaltet: Bereitstellen einer Schablone **21** auf einem Substrat **22**, auf das gedruckt werden soll, Aufbringen einer Paste **23** auf die Schablone **21** unter Verwendung einer Rakel **24** derart, dass die Paste **23** in Löcher **25** in der Schablone **21** gebracht wird; und nach dem Füllen der Schablonenlöcher **25** wird die Schablone **21** vom Substrat gehoben, so dass das bedruckte Substrat **22** erhalten werden kann.

[0025] In einem weiteren Beispiel für einen Siebdruckprozess wird, wie in **Fig. 2b** gezeigt ist, ein Mas-

kierungssiebgitter **26**, das Löcher **25** besitzt, unter Verwendung einer Rakel **24** mit der Paste **23** gefüllt. Nach dem Füllen des Gitters **26** wird die Rakel **24** verwendet, um das Gitter **26** auf ein Substrat **22**, auf das gedruckt werden soll, zu drücken, derart, dass ein lokaler Kontakt zwischen dem Siebgitter **26** und dem Substrat **22** hergestellt wird. Die Paste **23**, die im Siebgitter **26** „gespeichert“ ist, wird dadurch auf das Substrat **22** aufgebracht.

[0026] Im Allgemeinen werden Pasten für verschiedene Produkte wie z. B. Abgassensoren, Zündkerzen, Mehrschichtsubstrate (LTCC) für Steuereinheiten, Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen (PEMFC), Festoxidbrennstoffzellen (SOFC) und dergleichen verwendet. Während des Herstellungsprozesses werden Pasten auf ein Rohprodukt aufgebracht und durch Abtastdruck- oder Maskendruckprozesse strukturiert.

[0027] Gemäß den gewünschten Eigenschaften des gedruckten Pastenmaterials wie z. B. elektrische Leitfähigkeit oder Wärmeleitfähigkeit, Dauerhaftigkeit, Hitzebeständigkeit und dergleichen kann die Zusammensetzung von Pasten abhängig von der Strukturqualität und der Größe in einem weiten Bereich verwendeter Materialien und Anteile veränderbar gewählt werden. Darüber hinaus erfordert der Druckprozess selbst bestimmte Materialeigenschaften wie z. B. rheologische Eigenschaften wie die Viskosität und dergleichen, die die Paste mit dem verwendeten Druckprozess kompatibel machen.

[0028] Normalerweise werden Pasten aus einem oder mehreren Funktionsmaterialien wie z. B. Zinn, Blei oder dergleichen als Lötpaste, einem Bindemittel zum Bestimmen mechanischer Eigenschaften nach dem Trocknen/Härten der Paste, einem Lösungsmittel, um die Rheologie/Viskosität der Paste im Aufbringzustand zu bestimmen und keinem, einem oder mehreren Zusatzstoffen gebildet. Die Funktionsmaterialien können ferner durch einen Partikeltyp, eine Partikelgröße, eine Partikelgrößenverteilung und eine Partikelform festgelegt werden. Das Bindemittel kann nach Typ und Gehalt festgelegt werden. Allerdings können sich die Wirkungen der gewählten Materialien gegenseitig beeinträchtigen, so dass eine eindeutige Vorhersage der Pasteneigenschaften abhängig von der gewählten Pastenzusammensetzung nicht einfach vorgenommen werden kann. Deshalb wird ein Pastensimulationsmodell benötigt, um Pasteneigenschaften aus den verwendeten Materialien und Anteilen vorherzusagen.

[0029] Gemäß der Anwendung und der gewünschten Verwendung der gedruckten Strukturen muss die Paste mit Pasteneigenschaften versehen werden, die Materialeigenschaften wie z. B. elektrische Leitfähigkeit oder Wärmeleitfähigkeit, Dauerhaftigkeit, Härte, Beständigkeit gegen äußere Belastungen wie z. B.

Licht und Umgebung oder dergleichen bezüglich bestimmter Eigenschaften der gehärteten/getrockneten Paste beinhalten. Darüber hinaus beinhalten die Pasteneigenschaften Druckeigenschaften, die sich auf eine Verarbeitbarkeit bezüglich Materialeigenschaften vor dem Härten/Trocknen auswirken, wie z. B. Rheologie/Viskosität, Partikelgröße und dergleichen.

[0030] Um eine optimierte Pastenzusammensetzung für einen gegebenen Patendruckprozess zu bestimmen, wird auf ein Verfahren verwiesen, wie es in Verbindung mit dem Ablaufplan von **Fig. 3** beschrieben wird. Das Verfahren kann mindestens teilweise als ein Software-Algorithmus und/oder ein Hardware-Algorithmus in einer Datenverarbeitungseinheit implementiert werden.

[0031] In Schritt **S1** wird eine Pastenzusammensetzung gewählt, die die verwendeten Materialien und Anteile jedes der Materialien angibt. Die Wahl der Pastenzusammensetzung kann durch einen Experten gemäß gewünschten Pasteneigenschaften vorgenommen werden. Die Pasteneigenschaften beziehen sich auf die Materialeigenschaften des gehärteten/getrockneten Pastenmaterials in einer Form, in der die Paste im herzustellenden Produkt erscheint. Darüber hinaus können die Pasteneigenschaften Eigenschaften des nicht gehärteten/nicht getrockneten Pastenmaterials, d. h. in einer Konsistenz, wie es für den Druckprozess verwendet wird, und eine Eigenschaft, die die Anwendbarkeit im Druckprozess wie oben beschrieben anzeigt, beinhalten.

[0032] In Schritt **S2** wird eine Paste gemäß der gegebenen Pastenzusammensetzung angefertigt.

[0033] In Schritt **S3** wird die angefertigte Paste durch Durchführungen von Messungen, um die Pasteneigenschaften (die gemessenen Pasteneigenschaften) zu analysieren, bewertet. Bevorzugt kann mindestens eine der folgenden Eigenschaften bestimmt werden: rheologische Eigenschaften, eine Viskosität über der Schergeschwindigkeit, ein Verlustfaktor über einer Schwingungsfrequenz oder einer Amplitude, Eigenschaften der Viskosität und dergleichen.

[0034] In Schritt **S4** werden Simulationsparameter zunächst durch ein Simulationsparametermodell abhängig von der gegebenen Pastenzusammensetzung bereitgestellt. Das Simulationsparametermodell liefert Simulationsparameter für eine Materialsimulation abhängig von der gegebenen Pastenzusammensetzung.

[0035] In Schritt **S5** wird ein Simulationsdurchlauf einer Materialsimulation unter Verwendung der bereitgestellten Simulationsparameter gemäß dem Simulationsparametermodell und der gegebenen Pastenzusammensetzung vorgenommen. Als ein Ergebnis

des Simulationsdurchlaufs werden simulierte Pasteneigenschaften erhalten.

[0036] In Schritt **S6** wird eine Differenz zwischen den simulierten und den gemessenen Pasteneigenschaften bewertet. Insbesondere können die gemessenen Pasteneigenschaften und die simulierten Pasteneigenschaften jeweils mit einer gegebenen Eigenschaftsfunktion bewertet werden. Die Eigenschaftsfunktion verwendet quantifizierte Pasteneigenschaften von Interesse und gibt ein Eigenschaftsmaß zurück. Das Eigenschaftsmaß gibt an, wie gut die Paste zu den gegebenen Anforderungen des Endprodukts und/oder den gegebenen Anforderungen eines Patendruckprozesses unter Verwendung der Paste mit der gegebenen Pastenzusammensetzung passt. In einer einfachen Version kann die Eigenschaftsfunktion eine gewichtete Summe der quantifizierten erhaltenen Pasteneigenschaften beinhalten.

[0037] Ferner kann in Schritt **S6** eine Eigenschaftsmaßdifferenz zwischen dem Eigenschaftsmaß der gemessenen Pasteneigenschaften und dem Eigenschaftsmaß der simulierten Pasteneigenschaften berechnet werden. Gemäß einer verschiedenen Ausführungsform werden die Differenzen jeder der Pasteneigenschaften von Interesse berechnet und ein Qualitätsmaß kann auf der Grundlage der gewichteten Pasteneigenschaftsdifferenzen berechnet werden.

[0038] In Schritt **S7** wird bestimmt, ob die Eigenschaftsmaßdifferenz niedriger als ein gegebener Schwellenwert ist, der anzeigt, dass die Simulationsparameter die Simulation ausreichend definieren, um die Pasteneigenschaften auf der Grundlage einer gegebenen Pastenzusammensetzung geeignet vorherzusagen. Wenn festgestellt wird, dass die Simulationsparameter geeignet sind (Alternative: Ja), wird das Verfahren mit Schritt **S8** fortgesetzt. Andernfalls (Alternative: Nein) wird das Verfahren mit Schritt **S9** fortgesetzt.

[0039] In Schritt **S9** wird gemäß einem Bayes'schen Optimierungsprozess eine Qualitätsfunktion unter Verwendung der Eigenschaftsmaßdifferenz von Schritt **S6** als ein Qualitätsmaß, das den Simulationsparametern, die für den Simulationsdurchlauf verwendet werden, zugeordnet ist, trainiert. Die Qualitätsfunktion kann ein datenbasiertes Regressionsmodell wie z. B. ein Gauß'sches Regressionsmodell sein.

[0040] Bayes'sche Optimierungsprozesse beziehen sich auf ein Gauß'sches Modell, das als die Qualitätsfunktion dient, die die Qualität der Simulationsmodellparameter, die optimiert werden sollen, angibt. In der vorliegenden Anwendung gibt die Qualitätsfunktion die Korrektheit der Simulationsmodellparameter mittels des Qualitätsmaßes an. Mit anderen Worten

gibt das Qualitätsmaß an, wie gut die Simulationsmodellparameter erlauben, die Pasteneigenschaften einer Pastenzusammensetzung eines Pastenmaterials vorherzusagen. Das Qualitätsmaß hängt deshalb von der Eigenschaftsmaßdifferenz ab.

[0041] Im Bayes'schen Optimierungsprozess wird die Qualitätsfunktion kontinuierlich verbessert, bis ein Konvergenzkriterium erfüllt ist. Die resultierenden Simulationsmodellparameter können dann verwendet werden, um die Pasteneigenschaften auf der Grundlage einer Angabe einer Pastenzusammensetzung mit einer erforderlichen Genauigkeit geeignet zu simulieren.

[0042] Die trainierte Qualitätsfunktion wird dann in Schritt **S10** verwendet, um eine Erfassungsfunktion zu formulieren, die ermöglicht, die Simulationsparameter, die für einen nächsten Simulationsdurchlauf verwendet werden, zu variieren. Dadurch werden variierte Simulationsparameter für die nächste Wiederholung bereitgestellt.

[0043] Die Qualitätsfunktion kann als betriebsbereit trainiert betrachtet werden, wenn das Optimum der Qualitätsfunktion, d. h. das Minimum oder das Maximum, die angepassten Simulationsmodellparameter reflektieren kann. Das Training der Qualitätsfunktion zielt ferner darauf ab, mit einer geringen Anzahl von Simulationen mit den Simulationsmodellparameterkandidaten durchgeführt zu werden. Folglich werden die Simulationsmodellparameterkandidaten bevorzugt, die niedrige (oder hohe) Qualitätsfunktionswerte auf der Grundlage des Gauß'schen Prozesses versprechen.

[0044] Diese gegensätzlichen Kriterien des Minimierens von Simulationsdurchläufen und des Bereitstellens einer guten Anpassung der Qualitätsfunktion werden mittels der Erfassungsfunktion berücksichtigt, die die Simulationsmodellparameterkandidaten derart wählt, dass die Qualitätsfunktion kontinuierlich aktualisiert werden kann, um das Optimum der Qualitätsfunktion bestimmen zu können, d. h. die Simulationsmodellparameter zu erhalten, bei denen die bestmögliche Qualität erzielt werden kann.

[0045] Die Erfassungsfunktion kann Parameter der Qualitätsfunktion, die mittels eines Gauß'schen Prozessmodells, d. h. dem Gauß'schen Mittelwert $\mu(x)$ und der Standardabweichung $\sigma(x)$ des Gauß'schen Prozesses, beschrieben wird, verwenden. Ein Beispiel ist die sogenannte untere Konfidenzgrenze (LCB) oder die oberen Konfidenzgrenze (UCB), die wie folgt beschrieben werden:

$$LCB(x) = \mu(x) - k\sigma(x) \text{ bzw. } UCB(x) = \mu(x) + k\sigma(x).$$

[0046] Der Faktor k wird üblicherweise konstant eingestellt, z. B. $k = 2$. Dieses neue Kriterium kann mit normalen gradientenbasierten Verfahren wirksam minimiert bzw. maximiert werden und das Minimum von $LCB(x)$ oder das Maximum von $UCB(x)$ gibt den neuen Simulationsmodellparameterkandidaten für die Qualitätsfunktion an. Für die Optimierung der Erfassungsfunktion kann es nützlich sein, eine Optimierungsdomäne zu definieren, aus der die nächsten Kandidaten der Simulationsmodellparameter gewählt werden. Weitere Erfassungsfunktionen wie z. B. Verfahren einer erwarteten Verbesserung (EI-Verfahren), Verfahren einer Wahrscheinlichkeit einer Verbesserung (PI-Verfahren) oder Entropiesuchverfahren sind ebenfalls bekannt.

[0047] Durch die Optimierung der Erfassungsfunktion wird der nächste Simulationsmodellparameterkandidat bestimmt und die neue Bewertung unter Verwendung des Simulationsmodellparameterkandidaten wird vorgenommen.

[0048] Der Prozess wird dann zu Schritt **S5** für den nächsten Simulationsdurchlauf zurückgegeben.

[0049] Wenn in Schritt **S7** entschieden wird, dass die Simulationsparameter geeignet sind, die Pastenzusammensetzung in Schritt **S8** zu simulieren, wird die Pastenzusammensetzung für eine Drucksimulation unter Verwendung der Simulationsparameter, die durch das trainierte Simulationsparametermodell erhalten wurden, verwendet.

[0050] In einem folgenden Schritt **S15** wird bewertet, ob das Ergebnis der Drucksimulation die Anforderung des Pastendruckprozesses erfüllt. Falls die Anforderungen des Pastendruckprozesses erfüllt werden (Alternative: Ja), wird die Pastenzusammensetzung für den Pastendruckprozess in Schritt **S16** verwendet. Wenn sich in Schritt **S15** herausstellt, dass die Anforderungen für den Pastendruckprozess nicht erfüllt sind (Alternative: Nein), wird in Schritt **S17** eine neue Pastenzusammensetzung gewählt.

[0051] Die Wahl der neuen Pastenzusammensetzung kann manuell durch einen Experten oder automatisch auf der Grundlage der Ergebnisse einer neuen Drucksimulation in Schritt **S18** vorgenommen werden. Die Simulationsparameter werden auf der Grundlage der neu gewählten Pastenzusammensetzung bestimmt.

[0052] In Schritt **S19** wird geprüft, ob die neu gewählte Pastenzusammensetzung in einer Unsicherheit der Qualitätsfunktion (einer Varianz des Qualitätsmaßes) resultiert, die höher als ein gegebener Unsicherheitsschwellenwert ist. Wenn die Unsicherheit über dem gegebenen Schwellenwert liegt (Alternative: Ja), wird eine neue Wiederholung des Bayes'schen Optimierungsprozesses gestartet und das Verfahren wird

mit Schritt **S1** fortgesetzt. Andernfalls (Alternative: Nein) kann den Simulationsparametern vertraut werden und eine Simulation kann angesichts der resultierenden Simulationsparameter vorgenommen werden.

[0053] Dann wird der Prozess mit der Drucksimulation in Schritt **S8** fortgesetzt, wobei die Drucksimulation auf der Grundlage der Simulationsparameter durchgeführt wird.

Patentansprüche

1. Computerimplementiertes Verfahren zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung für eine beabsichtigte Druckanwendung unter Verwendung einer Materialsimulation zum Simulieren von Pasteneigenschaften, wobei die Materialsimulation ein Simulationsmodell verwendet, das durch Simulationsparameter festgelegt ist; das die folgenden Schritte umfasst:

- a) Wählen (S1) einer Pastenzusammensetzung zum Durchführen einer Drucksimulation,
- b) Bestimmen (S10) von Simulationsparametern auf der Grundlage einer gewählten Pastenzusammensetzung mittels eines trainierten datenbasierten Simulationsparametermodells;
- c) Durchführen (S8) einer Drucksimulation unter Verwendung der bestimmten Simulationsparameter, um Pasteneigenschaften für die gewählte Pastenzusammensetzung zu bestimmen.

2. Verfahren nach Anspruch 1, wobei die Schritte a) bis c) iterativ wiederholt werden, bis die simulierten Pasteneigenschaften, die nach der Drucksimulation bestimmt werden, die Anforderungen der beabsichtigten Anwendung erfüllen.

3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, wobei die Pasteneigenschaften Materialeigenschaften des gehärteten/getrockneten Pastenmaterials in einer Form, in der die Paste im herzustellenden Produkt erscheint, wie z. B. eines oder mehrere von elektrischer Leitfähigkeit, Wärmeleitfähigkeit, Dauerhaftigkeit, Härte und Beständigkeit gegen äußere Belastungen wie z. B. Licht und Umgebung und/oder Materialeigenschaften der nicht gehärteten/nicht getrockneten Paste wie z. B. eine Rheologie und/oder eine Partikelgröße beinhalten und/oder wobei die Pasteneigenschaften Druckeigenschaften beinhalten, die Eigenschaften, die die Verarbeitbarkeit beeinflussen, entsprechen.

4. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 3, wobei die Pastenzusammensetzung durch Bestimmen von Materialien und Anteilen der Materialien gewählt (S1) wird.

5. Verfahren nach Anspruch 4, wobei das Wählen der Pastenzusammensetzung ein Abfragen ins-

besondere mittels einer Datenverarbeitungseinheit, um die gewählte Pastenzusammensetzung über eine Eingabevorrichtung einzugeben, und/oder ein automatisches Variieren der Pastenzusammensetzung beinhaltet.

6. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, wobei das Simulationsparametermodell mittels eines Bayes'schen Optimierungsprozesses trainiert wird, der die folgenden Schritte umfasst:

- iteratives Wählen von Pastenzusammensetzungskandidaten;
- Messen von Pasteneigenschaften einer angefertigten Paste, die dem gewählten Zusammensetzungskandidaten entspricht;
- Trainieren oder Aktualisieren (S5-S10) des Simulationsparametermodells, das für die Materialsimulation verwendet werden soll, durch Variieren der Simulationsparameter gemäß einer Erfassungsfunktion und eines Qualitätsmaßes, das durch eine Qualitätsfunktion erhalten wird.

7. Verfahren nach Anspruch 6, wobei die Qualitätsfunktion trainiert ist, eine Eigenschaftsfunktion auszuwerten, die eine Abweichung oder eine Differenz zwischen simulierten und gemessenen Pasteneigenschaften repräsentiert, wobei die simulierten Pasteneigenschaften durch Durchführen der Materialsimulation auf der Grundlage von Simulationsparametern, die durch das Simulationsparametermodell auf der Grundlage des Pastenzusammensetzungskandidaten bestimmt werden, erhalten werden.

8. Verfahren nach einem der Ansprüche 6 bis 7, wobei die Erfassungsfunktion konfiguriert ist, einen nächsten Simulationsparameterkandidaten zum Trainieren des Simulationsparametermodells abhängig vom Ist-Trainingszustand der Qualitätsfunktion zu wählen.

9. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 8, wobei nachdem festgestellt wurde, dass die Ergebnisse der Drucksimulation für die beabsichtigte Anwendung geeignet sind, eine Paste gemäß der gewählten Pastenzusammensetzung angefertigt wird, wobei dann, wenn festgestellt wird, dass die angefertigte Paste nicht für die beabsichtigte Anwendung geeignet ist, die angefertigte Paste als ein Pastenzusammensetzungskandidat für eine weitere Wiederholung des Bayes'schen Optimierungsprozesses verwendet wird.

10. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 9, wobei das Simulationsparametermodell ein datengetriebenes Modell, insbesondere ein Gauß'sches Regressionsmodell, enthält.

11. Vorrichtung zum Bestimmen einer Pastenzusammensetzung für eine beabsichtigte Druckanwendung unter Verwendung einer Materialsimulati-

on zum Simulieren von Pasteneigenschaften, wobei die Materialsimulation ein Simulationsmodell verwendet, das durch Simulationsparameter festgelegt wird; wobei die Vorrichtung konfiguriert ist, die folgenden Schritte durchzuführen:

- a) Wählen einer Pastenzusammensetzung zum Durchführen einer Drucksimulation,
- b) Bestimmen von Simulationsparametern auf der Grundlage einer gewählten Pastenzusammensetzung mittels eines trainierten datenbasierten Simulationsparametermodells;
- c) Durchführen einer Drucksimulation unter Verwendung der bestimmten Simulationsparameter, um Pasteneigenschaften für die gewählte Pastenzusammensetzung zu bestimmen.
- d) Computerprogrammprodukt, das ein computerlesbares Medium enthält, in dem Folgendes gespeichert ist: Computerprogrammcodemittel, die, wenn das Programm geladen ist, den Computer veranlassen, eine Prozedur auszuführen, um alle Schritte des Verfahrens nach einem der Ansprüche 1 bis 10 durchzuführen.
- e) Maschinenlesbares Medium, in dem ein Programm aufgezeichnet ist, wobei das Programm konfiguriert ist, den Computer zu veranlassen, ein Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 10 auszuführen.

Es folgen 4 Seiten Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

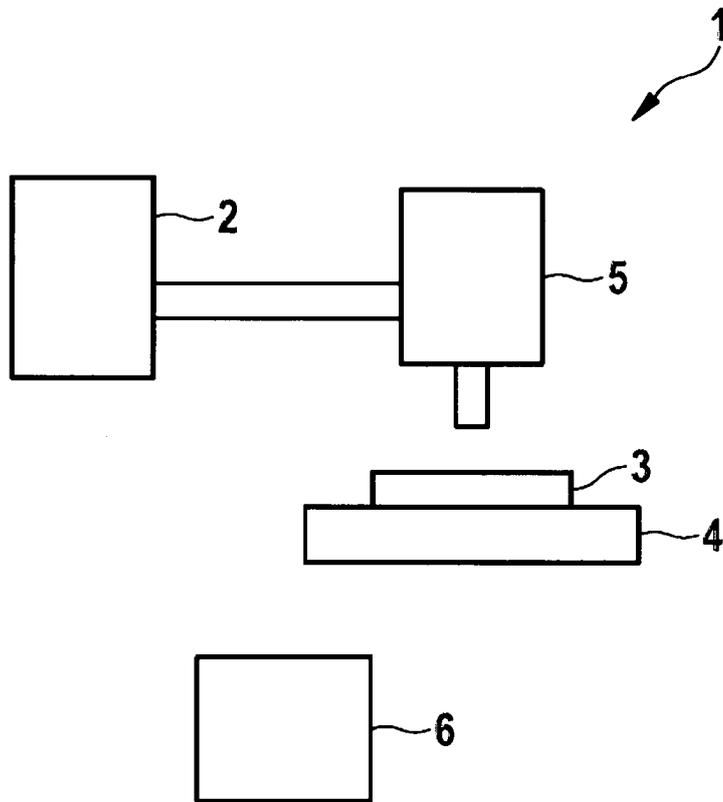


Fig. 1

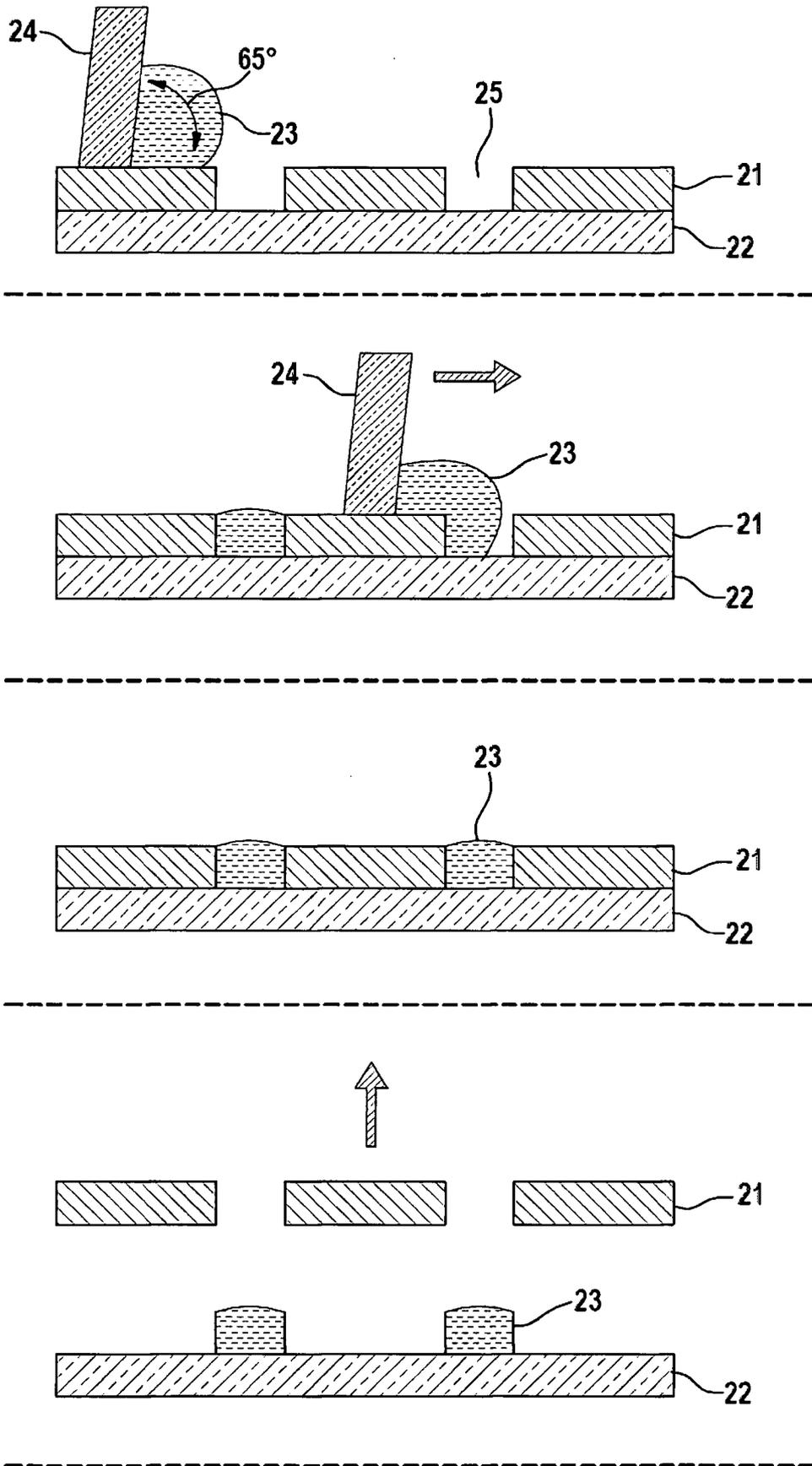


Fig. 2a

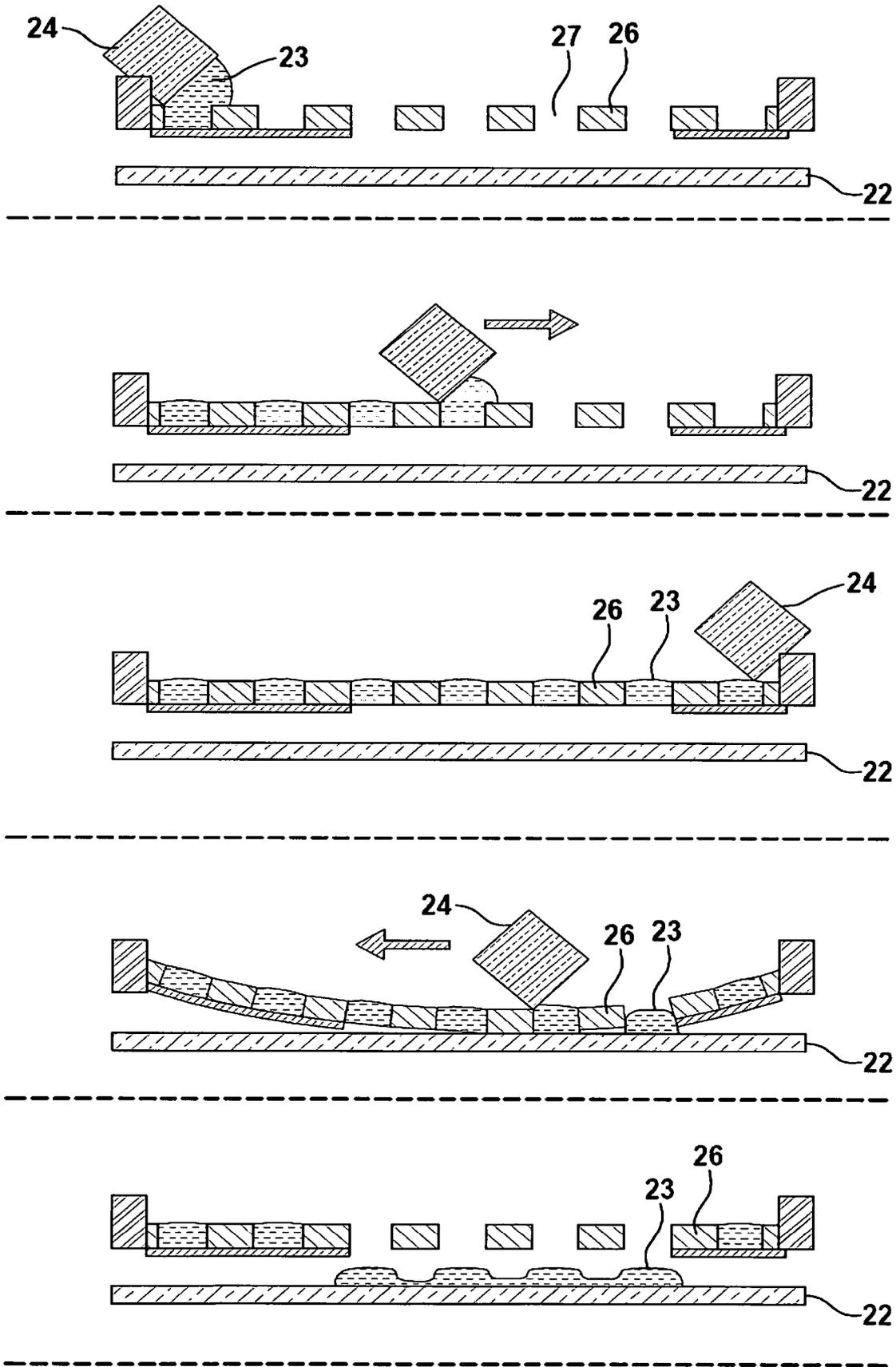


Fig. 2b

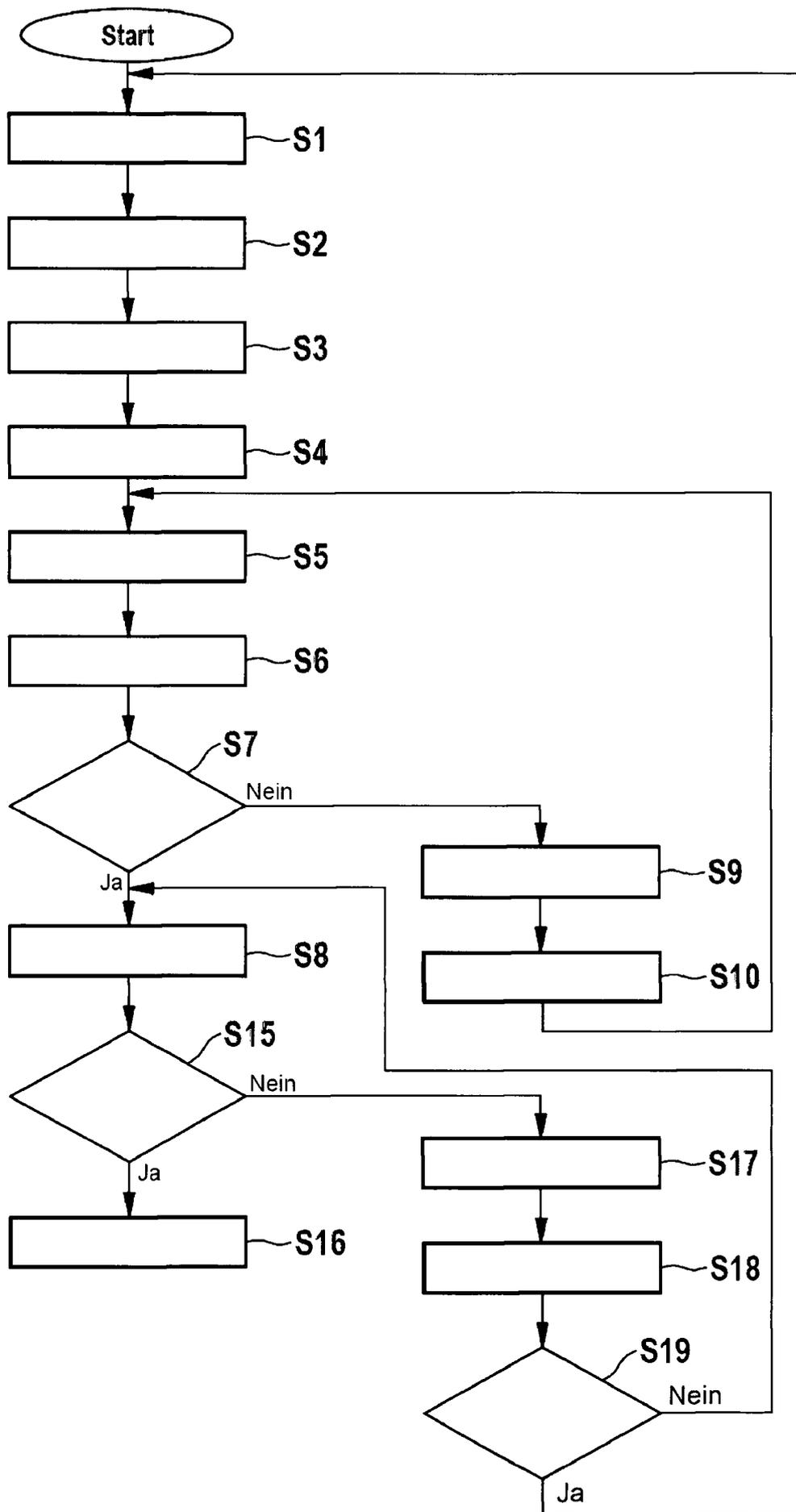


Fig. 3