Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Mechanik
Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Betsch
Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Seelig

Konsistente Zeitdiskretisierung von thermoelastischen Materialmodellen basierend auf Physik-augmentierten neuronalen Netzen

Luis Hartmann | Masterarbeit (2025)

Motivation

Während Materialmodellen auf Basis von Machine-Learning-Methoden häufig der physikalische Hintergrund fehlt, mangelt es konventionellen Materialmodellen oftmals an Flexibilität, um komplexes Materialverhalten adäquat abzubilden. Materialmodelle, die durch das Training von Physik-augmentierten neuronalen Netzen entstehen, kombinieren die Flexibilität von Machine-Learning-Methoden mit dem physikalischen Fundament konventioneller Modelle.

Beim Einsatz dieser Modelle in FE-Simulationen führen herkömmliche Integrationsverfahren wie bspw. die Mittelpunktsregel wegen des nichtlinearen Materialverhaltens jedoch zu numerischen Instabilitäten. Daher wird ein strukturerhaltendes Integrationsverfahren auf Basis partitionierter diskreter Gradienten eingesetzt, das sowohl die Erhaltung des Drehimpulses als auch der Gesamtenergie sicherstellt. [1]

Grundlagen

Durch eine Legendre-Transformation wird die innere Energie $\mathcal{U}$ in die temperaturabhängige freie Energie Ψ umgeformt

$$\Psi(\mathbf{F},\theta) = \mathcal{U}(\mathbf{F},\eta) - \theta\eta.$$

Thermomechanische Anforderungen werden durch eine invariantenbasierte Formulierung der freien Energie, sowie durch Wachstums- und Normalisierungsbedingungen berücksichtigt. [3]

- Invariantenbasierte Formulierung der freien Energie

$$\Psi = \Psi(\boldsymbol{\mathcal{I}}_0, \theta) \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mathcal{I}}_0 = (I_\mathbf{C}, II_\mathbf{C}, J)$$

- 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor

$$\mathbf{S} = 2\frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{C}} = 2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial I_\mathbf{C}}\mathbf{I} + \frac{\partial\Psi}{\partial II_\mathbf{C}}\mathbf{I}\mathbin{\times\!\!\!\!\times}\mathbf{C} + \frac{1}{2}\frac{\partial\Psi}{\partial J}J^{-1}\mathbf{G}\right)$$

Physik-augmentiertes neuronales Netz (PANN)

- Wachstumsbedingung

$$\Psi^{\text{growth}}(J) := \left(J + \frac{1}{J} - 2\right)^2$$

- Energienormalisierung

$$\Psi^{\text{energy}} := -\Psi^{\text{NN}}(\boldsymbol{\mathcal{I}},\theta)\Big|_{\mathbf{C}=\mathbf{I},\ \theta=\theta_0}$$

- Spannungsnormalisierung

$$\mathbf{S}^{\text{stress}} = -\mathfrak{o}J^{-1}\mathbf{G} \quad \text{mit}$$

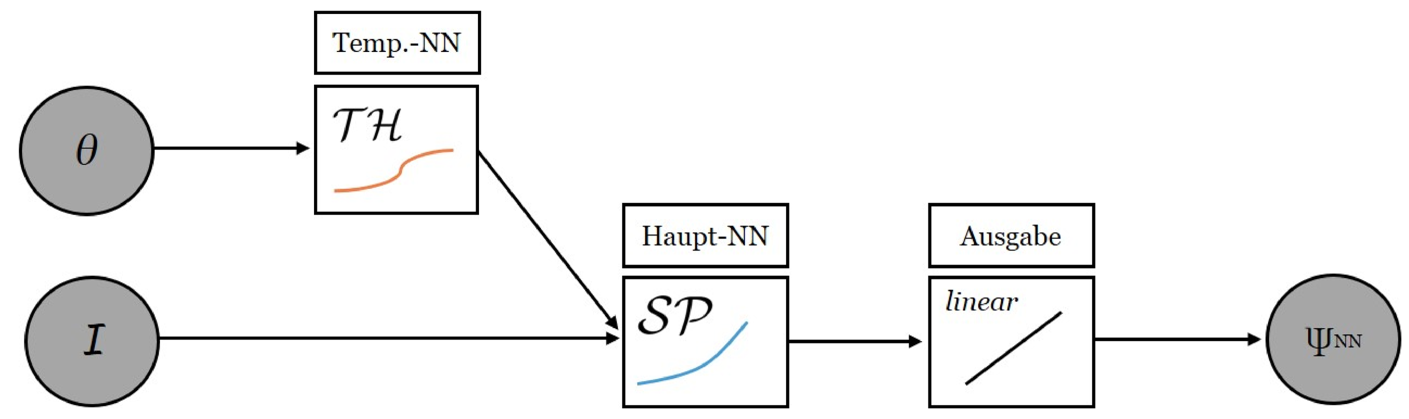
$$\mathfrak{o} := 2\left(\frac{\partial\Psi^{\text{NN}}}{\partial I_\mathbf{C}} + 2\frac{\partial\Psi^{\text{NN}}}{\partial II_\mathbf{C}} + \frac{1}{2}\frac{\partial\Psi^{\text{NN}}}{\partial J} - \frac{1}{2}\frac{\partial\Psi^{\text{NN}}}{\partial J^*}\right)\Bigg|_{\mathbf{C}=\mathbf{I},\ \theta=\theta_0}$$

- Entropienormalisierung

$$\eta^{\text{entropy}} = \eta_0 \quad \text{mit} \quad \eta_0 = -\frac{\partial\Psi^{\text{NN}}}{\partial\theta}\Big|_{\mathbf{C}=\mathbf{I},\ \theta=\theta_0}$$

Parametrisiertes input-konvexes NN (ICNN)

Polykonvexität durch nichtnegative Gewichte $\mathbf{w}$ und die konvexe, monoton wachsende Softplus-Aktivierungsfunktion $\mathcal{SP}$.



$$\Psi^{\text{NN}}(\boldsymbol{\mathcal{I}},\theta) = \mathbf{w}^2 \cdot \mathcal{SP}\left(\mathbf{w}^1 \cdot \mathbf{x}(\boldsymbol{\mathcal{I}},\theta) + \mathbf{b}^1\right) + \mathrm{b}^2$$

Strukturerhaltende zeitliche Diskretisierung

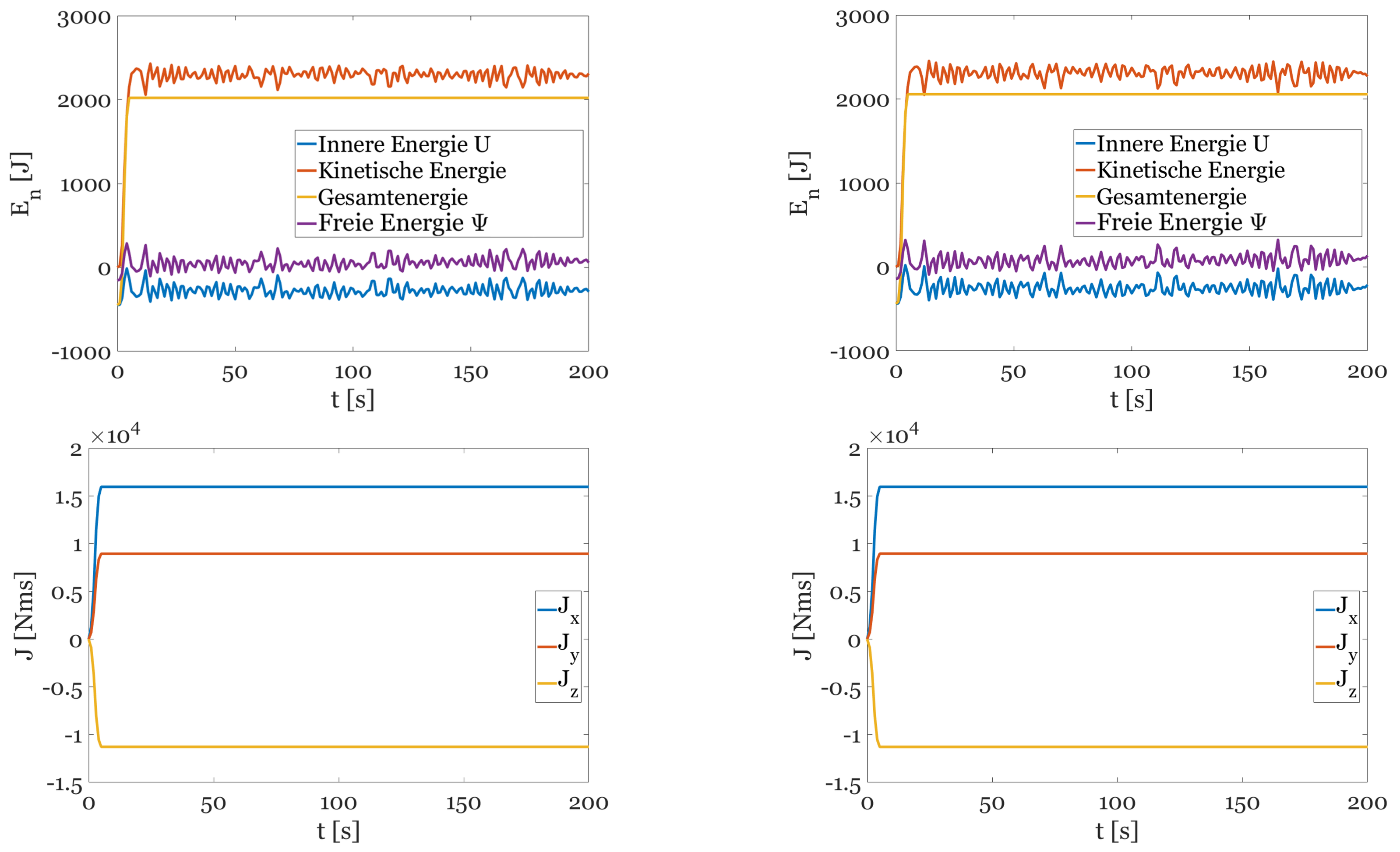
Zur Sicherstellung von Energie- und Impulserhaltung werden partionierte diskrete Gradienten eingesetzt. Dabei ersetzen die diskreten Gradienten $\mathrm{D}_{I_\mathbf{C}}\Psi$, $\mathrm{D}_{II_\mathbf{C}}\Psi$, $\mathrm{D}_J\Psi$ und $\mathrm{D}_\theta\Psi$ die partiellen Ableitungen der freien Energie Ψ im Integrationsverfahren [2].

$$\mathbf{S}_{\text{algo}} = 2\left(\mathrm{D}_{I_C}\Psi\,\mathbf{I} + \mathrm{D}_{II_C}\Psi\,(\mathbf{I}\mathbin{\times\!\!\!\!\times}\mathbf{C}_{\text{algo}}) + \tfrac{1}{2}\mathrm{D}_J\Psi\,J_{\text{algo}}^{-1}\mathbf{G}_{\text{algo}}\right)$$

$$\eta_{\text{algo}} = -\mathrm{D}_\theta\Psi$$

Numerische Untersuchungen

- Erlernen des thermomechanischen Materialverhaltens
- Nachweis der Erhaltung von Energie und Drehimpuls



Literatur

[1] Franke, M., Klein, D. K., Weeger, O. und Betsch, P. Advanced discretization techniques for hyperelastic physics-augmented neural networks. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 416: 116333, 2023.

[2] Gonzalez, O. Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems. In: *Journal of Nonlinear Science*, 6: 449–467, 1996.

[3] Linden, L., Klein, D. K., Kalina, K. A., Brummund, J., Weeger, O. und Kästner, M. Neural networks meet hyperelasticity: A guide to enforcing physics. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 179: 105363, 2023.