

Zusammenfassung der Promotionschrift

Phasenfeld-Modellierung von Brüchen mit isogeometrischer Analyse und maschinellen Lernmethoden

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieurin (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

M.Sc. Somdatta Goswami

Geboren am 26. März 1989 in Burnpur, Indien

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Status der Doktorandin: Intern

Weimar, Mai 2020

Problemstellung und Zielsetzung der Arbeit

1. Hauptziel der Statik ist die ausreichende Stabilität und hohe Zuverlässigkeit von Konstruktionen zu gewährleisten. Risse und Brüche sind sehr häufige Fehlstellungen bei Werkstoffen und Strukturen. Einmal eingeleitet, kann ein Riss oder Bruch zu großen Zonen heranwachsen, was plötzlich und ohne Vorwarnung zu einem katastrophalen Versagen führen kann.
2. In dieser Arbeit werden numerische Modellierungstechniken zur Untersuchung der Bruchentwicklung angewandt. Diese Techniken lassen sich in diskrete und kontinuierliche Ansätze einteilen. Bei den diskreten Ansätze wird eine Diskontinuität in das Verschiebungsfeld implementiert und kontinuierlich verfolgt und aktualisiert. Ein möglicher Nachteil des diskreten Ansatzes, insbesondere bei dreidimensionalen Problemen, besteht darin, dass sie zusätzliche Kriterien erfordern, um die Diskontinuitäten im Verschiebungsfeld verfolgen zu können. Dies erfordert zusätzlichen Aufwand und zusätzliche Methoden zur Lösung von Risskreuzungen und -verzweigungen. In kontinuierlichen Ansätzen werden die Rissverläufe auf der Grundlage der gewählten thermodynamischen Dissipationspotentiale gelöst. Dadurch ist keine Nachverfolgung der Rissentwicklung erforderlich. Für kontinuierliche Ansätze ist die Phasenfeldmethode in der Fachliteratur etabliert.
3. In der Phasenfeldmodellierung wird die scharfe Rissoberflächentopologie in einem Festkörper durch eine diffusive Risszone approximiert. Die Risszone wird durch einen Längenskalenparameter bestimmt (l_0). Der Rissweg kann durch die Minimierung der Energie berechnet werden. Vorannahmen für die Entwicklung der Risse sind nicht erforderlich. Um jedoch ein numerisch stabiles Risswachstum zu gewährleisten, erfordert dieser Ansatz ein sehr feines Gitternetz, was einen sehr hohen rechnerischen Zeitaufwand zur Folge hat.
4. Das primäre Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung einer rechnerisch effizienten und genauen Methode für einen quasi-statischen Bruch mit Hilfe der Phasenfeldmodellierung. Die Arbeit kann entsprechend der Anwendung von zwei numerischen Werkzeugen in zwei Teile untergliedert werden:
 - a. Ziel des ersten Teils dieser Forschungsarbeit ist die Entwicklung von Algorithmen zur Reduzierung des Rechenaufwandes und damit der Rechenzeiten. Die Genauigkeit darf jedoch nicht abnehmen. Dies wird durch die Verwendung von Polynomsplines über hierarchische T-Netze (PHT-Splines) im Rahmen der isogeometrischen Analysis (IGA) gewährleistet.
 - b. Das zweite Ziel dieser Forschungsarbeit ist die Entwicklung eines auf neuronalen Netzen basierenden Ansatzes zur Bruchanalyse. Im Zuge der isogeometrischen Analyse können die Basisfunktionen von höherer Ordnung einfach kalkuliert werden. Allerdings werden die PHT-Splines an den Flächengrenzen zur stetigen C_0 -Funktion, was sie für die Lösung nichtlinearer partieller Differentialgleichungen PDE höherer Ordnung in multiplen Flächengeometrien ungeeignet macht. Mit Hilfe von neuronalen Netzen kann das Problem der Dimensionalität traditioneller numerischer Methoden gelöst werden.

Stand der Wissenschaft

5. Lokale und automatische Verfeinerungsschemata sind notwendig, um die praktische Anwendbarkeit des Phasenfeldansatzes zu verbessern. Die Fachliteratur beschäftigt sich hauptsächlich mit manuellen Verfeinerungsschemata oder „nicht-uniformen rationalen B-Splines“ (NURBS), welche auf globalen Verfeinerungstechniken

basieren, jedoch ungeeignet sind für die Erfassung der lokalen Veränderungen der Materialeigenschaften.

6. Verfeinerungsstrategien, die in der Literatur für die Modellierung von Brüchen genutzt wurden, verwenden hauptsächlich das Phasenfeldmodell zweiter Ordnung. Dieses erfordert ein sehr feines Gitternetz ($h \approx 0.25 l_0$) für eine exakte numerische Approximation und hat somit einen höheren Rechenaufwand zur Folge. Hier ist h die Elementgröße des am meisten verfeinerten Elements in dem simulierten Netz.
7. Multiple Netze wurden bisher für Phasenfeldsimulationen anderer physikalischer Phänomene verwendet, wie z.B. gekoppelte Cahn-Hilliard- und Navier-Stokes-Gleichungen. Dieser Ansatz wurde jedoch nie für die Analyse von Brüchen verwendet.
8. Die jüngste Entwicklung des PINN-Ansatzes (Physics Informed Neural Network) ermöglicht es neuronalen Netzwerken auf der Grundlage der bestimmenden PDEs trainiert zu werden. Die Technik des maschinellen Lernens mit Hilfe des PINN-Ansatzes befindet sich jedoch noch in einem sehr frühen Stadium und wurde noch nicht für die Lösung gekoppelter Probleme, wie die quasi-statische Bruchanalyse verwendet.

Eingesetzte Methoden

9. Im Rahmen der IGA wird die Lokalität und Adaptivität von PHT-Splines genutzt, um die Verfeinerung bei Singularitäten und hohen Gradienten lokal zu begrenzen. Das hier gewählte „Re-Meshing-Verfahren“ basiert auf einem adaptiven h -Verfeinerungsschema. Die Basisfunktionen und die Ableitungen werden vorberechnet und in einer Quaternärbaum-Struktur gespeichert, wodurch eine Neuberechnung für jeden Verschiebungsschritt vermieden und folglich eine signifikante Einsparung der Rechenzeit erreicht wird.
10. Für das Phasenfeldmodell vierter Ordnung müssen die Ableitungen zweiter Ordnung des Phasenfeldes berechnet werden. Dies setzt eine glatte kontinuierliche C^1 -Diskretisierung im gesamten Raum voraus. Durch Nutzung der IGA für die Berechnung von kontinuierlichen C^1 -Basisfunktionen kann die Rechenzeit minimiert werden.
11. Es wird ein auf zwei Netzen basierendes adaptives h -Verfeinerungsschema entwickelt, bei dem ein gröberes Netz für das lineare System der Elastizitätsgleichung genutzt wird und ein feineres Phasenfeldnetz das numerisch stabile Risswachstum gewährleistet. Eine Fehlerabschätzung wird genutzt, um die Größe des Netzes für Elastizitätsgleichung zu verfeinern und anzupassen, während ein kritischer Schwellenwert des Phasenfeldes in der adaptiven Verfeinerung für das Netz des Phasenfeldes genutzt wird. Für den Datenaustausch zwischen den beiden Netzen wird ein strukturierter Algorithmus entwickelt, der eine ausreichende Genauigkeit gewährleistet. Der Algorithmus minimiert außerdem die Rechenzeit, die für die Rechenschritte bei der Datenübertragung notwendig sind.
12. In dem entwickelten PINN-Ansatz werden die Parameter des neuronalen Netzes (Gewichte und Verzerrungen) berechnet, indem die variierte Energie des von den PDEs definierten Systems minimiert wird. Außerdem berücksichtigt der PINN-Ansatz das Konzept des sogenannten „Transfer-Lernens“, wodurch für jeden Verschiebungsschritt lediglich ein minimales Umlernen erforderlich ist.
13. Für die Berechnung mit dem PINN-Ansatz wird die Geometrie mit NURBS modelliert. Ein Python-basierter Algorithmus auf der Grundlage der Bèzier-Zerlegung wird entwickelt, um die Bernsteinpolynom-Basisfunktionen zu ermitteln.

14. Für den PINN-Ansatz wird ein adaptiver h-Verfeinerungsalgorithmus zur lokalen Verfeinerung des Integrationsnetzes entlang der Rissbahn entwickelt. Das Schema generiert automatisch mehr Gauß-Quadraturpunkte in dem Schädigungsbereich und führt damit zu einer genaueren Näherung für die Bruchenergie. Um ein numerisch stabiles Risswachstum auch bei größeren Verschiebungsschritten zu gewährleisten, werden sowohl das Phasenfeld als auch der residuen-basierte a-Posteriori-Fehlerabschätzer in den PINN-Ansatz integriert.

Ergebnisse

15. Die Ergebnisse des auf PHT-Splines basierenden adaptiven h-Verfeinerungsschema zeigen die Effizienz und Genauigkeit der Methode. So konnte für ein zweidimensionales Problem gezeigt werden, dass das Phasenfeldmodell vierter Ordnung ($h \approx 0,5l_0$) bei einem gröberen Netz einen Fehler von 0,09% aufweist, während das Modell zweiter Ordnung ($h \approx 0,25l_0$) einen Fehler von 2,56% in einem feineren Netz aufweist. Die Genauigkeit der Modelle wird durch das Vergleichen der kritischen Bruchkraft mit den verfügbaren analytischen Lösungen bestimmt.
16. Vergleicht man den relativen L_2 -Fehler für das Verschiebungsfeld eines eindimensionalen Problems, so konvergiert das Modell vierter Ordnung mit einem Fehler von 0,5%, während das zweite Ordnung bei gleichem Freiheitsgrad mit einem Fehler von 2,59% konvergiert. Folglich ist das Phasenmodell vierter Ordnung mit größerem Netz genauer und konvergiert schneller als das Modell zweiter Ordnung, wodurch Rechenzeit eingespart werden kann.
17. Die Ergebnisse des Verschiebungsfeldes, die durch den entwickelten dualen-Netzansatz für das eindimensionale Problem in gröberen elastischen Netzen ($h \approx 0,5l_0$) sowie feineren Phasenfeldnetzen ($h \approx 0,25l_0$) erhalten wurden, zeigen einen relativen L_2 -Fehler von 3,5%. Andererseits wird durch die Verwendung eines einzigen Netzes ($h \approx 0,25l_0$) ein relativer Fehler von 3,4% erzielt. Beide Simulationen verwenden das Phasenfeldmodell zweiter Ordnung. Die Ergebnisse zeigen, dass mithilfe eines dualen-Netzansatzes eine bessere Balance zwischen Recheneffizienz und Genauigkeit im Vergleich zu Standard-Einfachnetzen erreicht werden kann.
18. Der Hauptvorteil des dualen-Netzansatzes liegt in der Fähigkeit die kritische Belastung für die unterschiedlichen Netzgrößen der beiden Feldberechnungen genau vorherzusagen, was zu einer erheblichen Reduzierung der Rechenzeit führt.
19. Die Ableitungen, die in den Funktionen der Variationsenergie vorkommen, sind von geringerer Ordnung als die in den residuen-basierten PINN-Ansätzen. Daher ist die Verlustfunktion des entwickelten PINN-Ansatzes leichter zu minimieren und das Netz lernt schneller. Bei einem zweidimensionalen Problem wird durch eine Integration des „Transfer-Lernens“ in den PINN-Ansatz die Rechenzeit pro Iteration halbiert.
20. Für ein dreidimensionales Problem aus der Literatur benötigt IGA 1.341.567 Elemente mit einem Verschiebungssinkrement von 5×10^{-5} mm. Der entwickelte PINN-Ansatz hingegen benötigt lediglich 512 Elemente mit einem Verschiebungssinkrement von 1×10^{-3} mm. Die Simulation wurde mit einem Phasenfeldmodell vierter Ordnung durchgeführt. Daher kann der entwickelte PINN-Ansatz effizient mit hochdimensionalen Problemen umgehen und aufgrund der größeren Verschiebungsschritte mit weniger Elementen den Rissweg bestimmen.