

On Numerical Multiscale Analysis of Inelastic Composite Materials using Artificial Neural Networks

Numerische Mehrskalenanalyse inelastischer
Kompositwerkstoffe unter Anwendung künstlicher neuronaler Netze

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Technischen Universität Dresden
eingereichte

Dissertation

von
Dipl.-Ing. Julien Philipp Stöcker
geboren am 04. August 1997 in Zwenkau

Gutachter:
Prof. Dr.-Ing. habil. Michael Kaliske
Technische Universität Dresden

Prof. Dr.-Ing. habil. Fadi Aldakheel
Leibniz Universität Hannover

Prof. Dr.-Ing. Stefan Löhner
Technische Universität Dresden

Tag der Einreichung: 28.01.2025

Tag der Verteidigung: 04.02.2026

Summary

Composite materials are applied for numerous engineering tasks due to their distinguished properties, obtained from combining different constituent materials. By this combination, it is possible to achieve constitutive characteristics optimized for a given task. To improve the load-bearing capacity of composite materials, it is necessary to understand and leverage the characteristics of the mesoscopic interactions of the constituents, which produce the favorable composite behavior. This knowledge can then be utilized to optimize macroscopic structures when applying the composite material.

The thesis at hand contributes to the field of numerical multi-scale analysis of composite materials with history-dependent constitutive behavior utilizing machine learning methods. It presents computational approaches to efficiently represent the mechanical response, including general inelastic processes, of materials with heterogeneous mesostructures in macroscopic investigations.

The presented multi-scale modeling approach is based on artificial neural networks (ANNs) processing sequences of mechanical data. Such mechanical data can be obtained from physical or numerical experiments and must contain information on the current load state and the material state, i.e., information on previously encountered loads and the corresponding constitutive behavior. An ANN constitutive description, representing the effective macroscopic constitutive behavior, can be optimized on the experimental data. With a sequential input that considers the previous material states, it is possible to obtain a representation for different inelastic phenomena.

This setup, requiring previously predicted constitutive responses for the computation of the current mechanical behavior, necessitates an adaption of the optimization framework due to the inevitable presence of errors in the predicted responses. By introducing a sequential optimization approach, the influence of these errors on the computation, and the errors themselves, can be reduced. To achieve this, the relevant information in the data base for optimization is iteratively adapted to represent the neural network's current prediction error. The efficacy of this training scheme is demonstrated for heterogeneous mesostructures with elasto-plastic as well as a strain-softening constitutive descriptions. The thereby obtained ANNs are successfully applied in numerical macro-scale investigations, demonstrating their potential as an alternative to numerical multi-scale analysis for modeling inelastic composite materials.

The foundation of this analysis is however contingent upon the assumption that a composite material can be characterized with sufficient accuracy by a single representative mesoscopic unit volume. The constraints introduced by this assumption can be partially remedied by requiring only statistical representativeness over a set of mesoscopic volumes. In order to achieve computational efficiency, the approach of employing sequences of mechanical data as a computational basis for ANNs to model history-dependent constitutive behavior is extended to consider such sets of mesoscopic volumes. The potential of this development is demonstrated by a numerical example.

Zusammenfassung

Verbundwerkstoffe werden aufgrund ihrer besonderen Eigenschaften, die sich aus der Kombination verschiedener Ausgangsmaterialien ergeben, für zahlreiche Ingenieursaufgaben eingesetzt. Die Kombination der verschiedenen Ausgangsstoffe ermöglicht eine Optimierung der konstitutiven Eigenschaften für eine spezifische Anwendung. Um die Tragfähigkeit von Verbundwerkstoffen zu verbessern, ist es erforderlich, die Eigenschaften der Wechselwirkungen der einzelnen Materialien, welche das günstige Verbundverhalten bewirken, zu verstehen und zu nutzen. Dieses Wissen kann anschließend verwendet werden, um das Design makroskopischer Strukturen bei der Anwendung des Verbundwerkstoffs zu optimieren.

Die vorliegende Arbeit leistet einen Beitrag zur numerischen Mehrskalenanalyse von Verbundwerkstoffen mit geschichtsabhängigem Konstitutivverhalten unter Verwendung von Methoden des maschinellen Lernens. Im Rahmen dessen werden Berechnungskonzepte präsentiert, welche die effiziente Darstellung der mechanischen, einschließlich beliebiger inelastischer Prozesse, von Materialien mit heterogenen Mesostrukturen in makroskopischen Untersuchungen ermöglichen.

Der hier vorgestellte Mehrskalen-Modellierungsansatz basiert auf künstlichen neuronalen Netzen (ANN), die Sequenzen mechanischer Daten verarbeiten. Solche mechanischen Daten können aus physikalischen oder numerischen Experimenten gewonnen werden. Sie müssen dabei Informationen über den aktuellen Belastungszustand sowie den Materialzustand enthalten, d.h. quantitative Informationen über zuvor aufgetretene Belastungen und das resultierende konstitutive Verhalten. Unter Berücksichtigung der vorherigen Materialzustände durch die sequenzielle Eingabe ist es möglich, verschiedene inelastische Phänomene zu modellieren.

Dieser Aufbau, bei dem für die Berechnung des aktuellen mechanischen Verhaltens zuvor vorhergesagte konstitutive Antworten benötigt werden, erfordert eine Anpassung des Optimierungsprozesses. Dies ist auf das unvermeidliche Vorhandensein von Fehlern in der vorhergesagten Materialantwort zurückzuführen. Durch die Implementierung eines sequenziellen Optimierungsansatzes kann sowohl der Einfluss dieser Fehler auf die Berechnung als auch die Größe der Fehler selbst reduziert werden. Um dies zu erreichen, werden die für die Optimierung relevanten Informationen im Datensatz iterativ angepasst, um den aktuellen Vorhersagefehler des ANN darzustellen. Die Effektivität des vorgestellten Trainingsschemas wird anhand heterogener Mesostrukturen mit elasto-plastischer sowie eines Konstitutivmodells mit Dehnungsverweichung demonstriert. Die auf diese Weise trainierten ANNs werden anschließend erfolgreich in numerischen Makroskalenuntersuchungen eingesetzt und zeigen ihr Potenzial als Alternative zur numerischen Mehrskalenanalyse für die Modellierung inelastischer Komposite.

Die Grundlage dieser Analyse basiert auf der Prämisse, dass ein Verbundwerkstoff durch ein einziges repräsentatives mesoskopisches Einheitsvolumen hinreichend genau charakterisiert werden kann. Die sich aus dieser Annahme ergebenden Einschränkungen können jedoch teilweise dadurch behoben werden, dass lediglich eine statistische Repräsentativität über eine Reihe mesoskopischer Volumina gefordert wird. Der Ansatz, Sequenzen mechanischer Daten als Berechnungsgrundlage für ANNs zu verwenden, um das geschichtsabhängige Konstitutivverhalten zu modellieren, wird erweitert, um zusätzlich solche Mengen mesoskopischer Volumina zu berücksichtigen. Dadurch kann die Effizienz der für die Mehrskalenbetrachtung notwendigen Berechnungen gesteigert werden. Das Potenzial dieser Entwicklung wird anhand eines numerischen Beispiels demonstriert.