

Hiperelasztikus anyagok modellezése adatalapú módszer és neurális hálózat alkalmazásával Python környezetben

Modelling the deformation of hyperelastic solids based on data-driven approach using Neural Network Models in Python

AGÓCS Norbert, PhD hallgató, Dr. KOSSA Attila, egyetemi docens

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Műszaki Mechanikai Tanszék,
H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3; Tel.: +36-1463-1369; fax: +36-1463-3471
nagocs@mm.bme.hu, kossa@mm.bme.hu

Abstract

Our research aim to develop a data-driven approach to model the force-displacement behavior of a two-dimensional hyperelastic body with an irregular geometry. The geometry consists of a rectangular deformable body with a circular cutout, where one side is fixed, and a displacement constraint is applied to the other side. A feedforward neural network, trained in Python, approximates the nonlinear behavior using virtual datasets from automated finite element simulations in Abaqus. By varying the cutout's position and radius, we analyze the mechanical response. The results confirm that this approach accurately predicts force-displacement characteristics while optimizing computational costs.

Keywords: hyperelastic materials, feedforward neural network, automated finite element simulation, machine learning, data-driven approach

Kivonat

Kutatásunk célja egy adatalapú módszer kidolgozása egy kétdimenziós, nem szabályos geometriájú, hiperelasztikus test erő-elmozdulás viselkedésének modellezésére. A vizsgált téglalap alakú testben egy körkivágás található, egyik oldala rögzített, míg a másik oldalon előírt elmozdulási kényszert alkalmazunk. A nemlinearitást egy feedforward neurális hálózat közelíti, amelyet Python környezetben, Abaqus végelelemes szimulációkkal generált adathalmazokon tanítunk. A körkivágás pozíciójának és sugarának változtatásával elemezzük a mechanikai választ. Az eredmények igazolják, hogy a módszer pontosan előrejelzi az erő-elmozdulás karakterisztikát, miközben optimalizálja a számítási költségeket.

Kulcsszavak: hiperelasztikus anyagok, feedforward neurális hálózat, automatizált végelelemes szimuláció, gépi tanulás, adatvezérelt megközelítés

1. BEVEZETÉS

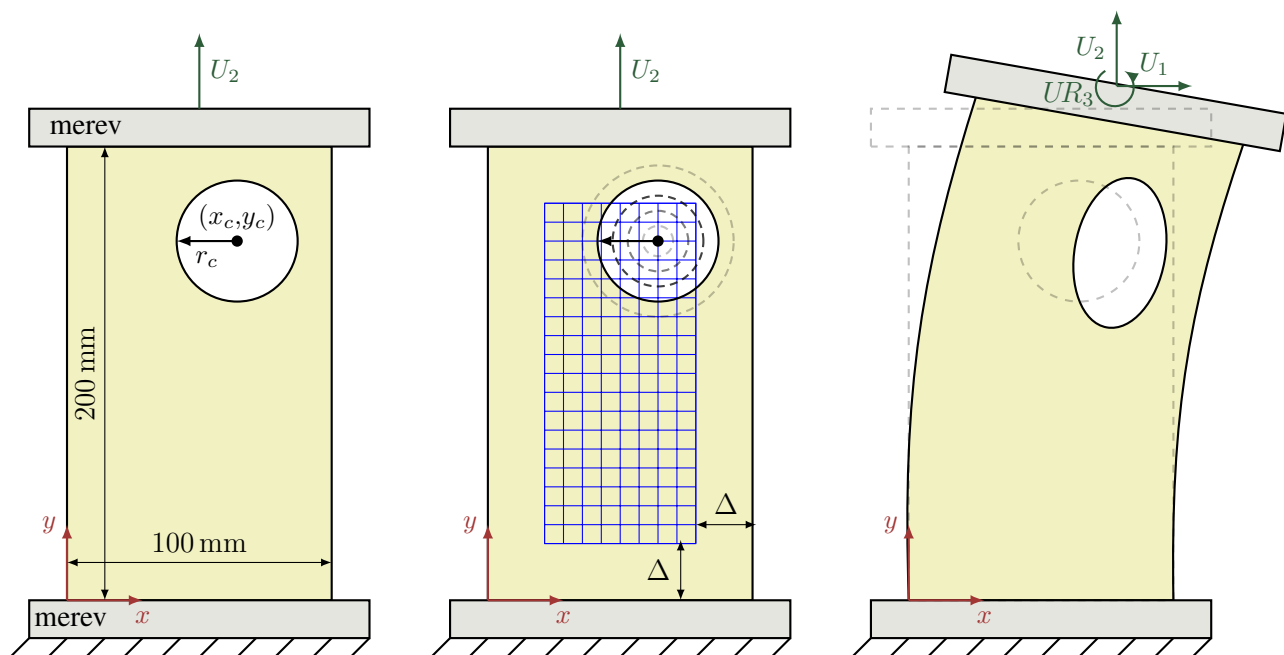
A mérnöki tervezés optimalizálása és a bonyolult rendszerek viselkedésének elemzése napjainkban elképzelhetetlen szimulációs módszerek alkalmazása nélkül. A mérnöki szerkezetek mechanikai szimulációjához elengedhetetlen az anyagok mechanikai viselkedésének pontos figyelembevétele, ezért fontos kutatási terület az anyagi viselkedés modellezése és a konstitutív modellek fejlesztése. A mérnöki alkalmazásokban egyre gyakrabban találkozunk hiperelasztikus anyagokkal, különösen olyan területeken, ahol nagy mértékű rugalmas alakváltozásra van szükség. Ilyen alkalmazási területek például a szilikonból készült orvosi protézisek, a sporteszközök, a hajlékony kijelzők, valamint a különféle gumitermékek tervezése.

Az anyagok mechanikai viselkedése általában rendkívül összetett és erősen nemlineáris karakterisztikát mutat a vizsgálati tartományban. Ez megnehezíti a modellalkotás tisztán analitikus megközelítését, így elengedhetlenné teszi a numerikus módszerek alkalmazását a nemlineáris egyenletek megoldására, például a végelelemes módszer használatát. A numerikus módszerek alkalmazása azonban jelentős számítási kapacitást igényel, ami a modellezési folyamatot jelentősen lelassíthatja. Kutatásunk célja olyan adatalapú megközelítések kidolgozása, amelyek megoldást nyújthatnak az anyagmodellezés említett kihívásaira, különös tekintettel a hiperelasztikus anyagmodellek területén. Az adatalapú megközelítés lehetővé teszi, hogy megfelelő mennyiségű és változatos adathalmaz alapján kellően pontos modellt hozzunk létre az anyagi viselkedés leírására. [2][3]

A jelen tanulmány egy olyan adatalapú módszert mutat be, amely képes egy kétdimenziós, nem szabályos geometriával rendelkező deformálható test erő-elmozdulás viselkedésének predikciójára hiperelasztikus anyagmodell alkalmazásával. [4] A vizsgálat során a geometriai nemlinearitásra helyezzük a hangsúlyt. Célunk egy egyszerű feedforward neurális hálózat fejlesztése Python környezetben [5], amely a véges elemes szimulációkból származó virtuális adathalmazok alapján tanulja meg a deformálható test erő-elmozdulás karakterisztikáját, és képes annak megfelelően pontos előrejelzésére ismeretlen geometriák esetén is.

2. MECHANIKAI MODELL

A vizsgált kétdimenziós, nem szabályos geometria egy téglalap alakú, hiperelasztikus anyagból készült deformálható test. A test szélessége 100 mm, magassága pedig 200 mm. A téglalap alakú testben egy kör alakú kivágás található, amelyet az (x_c, y_c) középpont és r_c sugár jellemez. A körkivágás pozíciója és sugara a vizsgálat során változó paraméterként szerepel. A deformálható test egyik oldala mereven rögzített, míg a szemközti oldalon y irányú elmozdulási kényszert írunk elő $U_2 = 100$ mm értékkel. A vizsgált mechanikai modellt az 1. ábra szemlélteti.



1. ábra. A kétdimenziós, téglalap alakú, nem szabályos geometria mechanikai modellje (bal) és a körkivágás paramétereinek változtatásával előállított további változatok szemléltetése (közép) és a deformált alak (jobb).

A geometria modellezése során kétféle nemlinearitás jelenik meg: anyagi és geometriai nemlinearitás. Az anyagi nemlinearitást a hiperelasztikus anyagmodell alkalmazása eredményezi, míg a geometriai nemlinearitás a előírt, nagymértékű elmozdulásból adódik. A tanulmány célja elsődlegesen a geometriai nemlinearitás vizsgálata, így a lehető legegyszerűbb hiperelasztikus anyagmodellt, a neo-Hooke-féle modellt alkalmazzuk. A neo-Hooke-féle hiperelasztikus anyagmodell a W alakváltozási energiasűrűség skálár függvényével írható le:

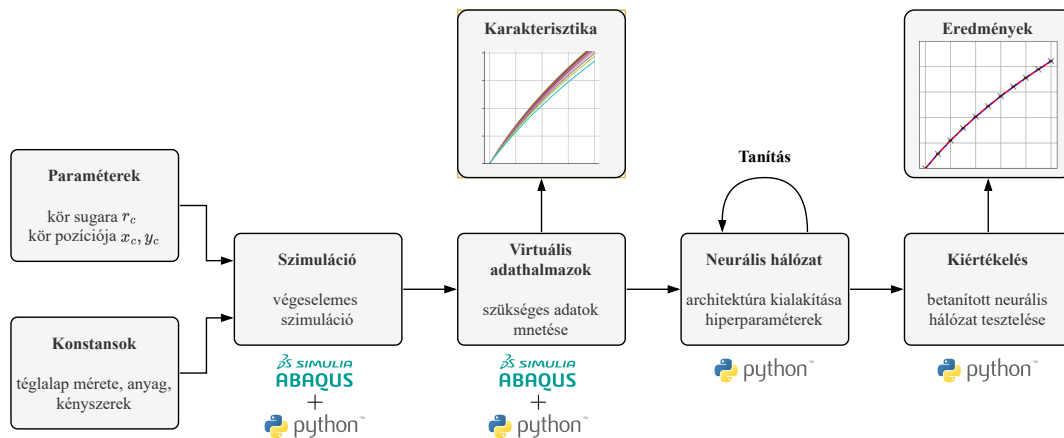
$$W = C_{10}(I_1 J^{-\frac{2}{3}} - 3) + \frac{1}{D_1}(J - 1)^2, \quad (1)$$

ahol C_{10} és D_1 a hiperelasztikus anyagmodell paraméterei, I_1 a baloldali Cauchy–Green-féle deformációs tenzor első skalárinvariánsa, míg J a térfogatváltozási hányados. A geometriai nemlinearitás kiemelése érdekében a virtuális adathalmazok előállítása során az anyagmodell paramétereit a következő értékekre állítjuk be: $C_{10} = 1$ és $D_1 = 0$, így az anyagi nemlinearitás hatása minimalizálható. A $D_1 = 0$ anyagparaméter választása azt eredményezi, hogy az anyagot térfogatilag összenyomhatatlannak tekintjük.

A deformálható test a bemutatott geometriával és peremfeltételekkel az előírt elmozdulási kényszer hatására deformálódik. A kialakuló reakcióerőt RF_2 jelöli, míg az elmozdulási jellemzők közé tartozik a felső merev lap U_1 vízszintes elmozdulása és UR_3 szögelfordulása. A jelölések az Abaqus szimulációs szoftver nomenklatúráját követik. A tanulmány célja egy olyan predikciós modell létrehozása, amely feedforward neurális hálózat segítségével képes előre jelezni az erő-elmozdulás karakterisztikát.

3. AZ ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

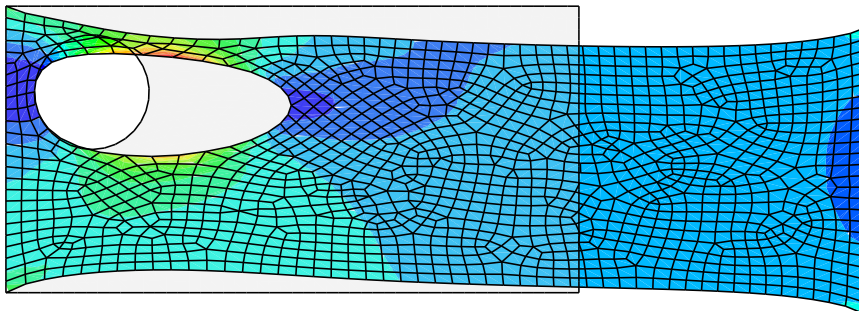
Az ismertetett kétdimenziós deformálható test erő-elmozdulás karakterisztikájának előrejelzésére szolgáló modell létrehozása három fő lépésből áll: a virtuális adathalmazok előállításából, a neurális hálózat modelljének felépítéséből és tanításából, valamint a modell validációjából. A folyamat lépéseit és az alkalmazott módszertan vázlatát a 2. ábra szemlélteti.



2. ábra. Az ismertetett kétdimenziós deformálható test erő-elmozdulás karakterisztikájának előrejelzésére szolgáló modell létrehozásának folyamata és az alkalmazott módszertan.

3.1. Végeselemes modell

Az adathalmazok előállítása a neurális hálózat tanításához végeselemes szimulációk segítségével történt. A végeselemes modellek felépítését az ABAQUS szoftverben végeztük, amelyet Python szkriptek alkalmazásával automatizáltunk. Az elkészített programcsomag lehetővé tette több száz szimulációs modell automatikus generálását, futtatását és kiértékelését. Illusztráció véget a 3. ábrán közöljük egy tetszőleges geometria esetén a kezdeti és deformált konfigurációk összehasonlítását annak érdekében, hogy a jelen lévő deformáció mértéke érzékeltethető legyen. A geometria elforgatott állapotban látható a jobb helykihasználás végett.



3. ábra. Egy kiválasztott geometria esetén a kezdeti és deformált konfigurációk összehasonlítása. A színskála a HMH-féle egyenértékű feszültség eloszlását jelöli annak érdekében, hogy a jelenlévő nemhomogén feszültségi állapot szemléltethető legyen.

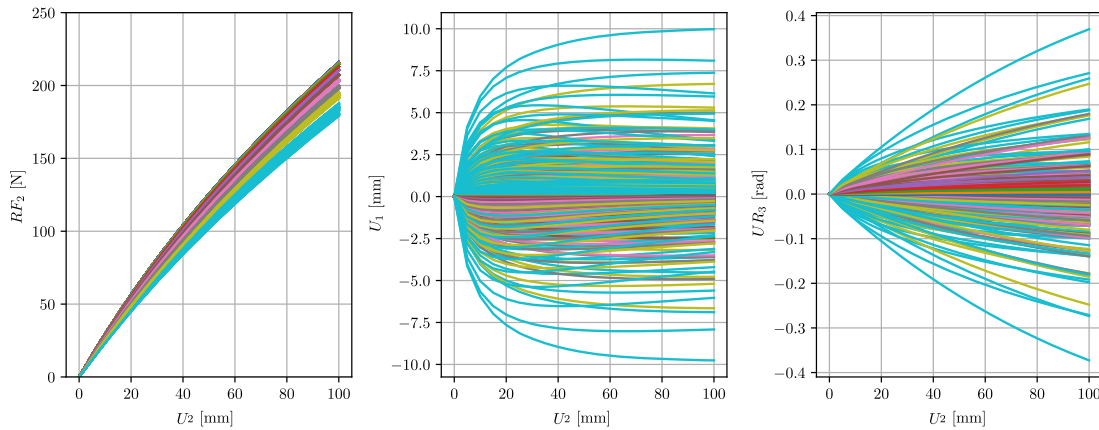
A numerikus szimuláció során kétdimenziós, síkbeli modellt alkalmazunk, amely síkbeli feszültségi állapotban van. A deformálható test anyagi viselkedését a leírtaknak megfelelően a neo-Hooke-féle hiperelasztikus anyagmodellel írjuk le. Az anyagmodell paramétereit a korábban leírtaknak megfelelően állítjuk be. A vizsgált anyagot homogénként kezeltük. A szimuláció egyetlen időlépésből áll, amelynek során a deformálható testet az előírt U_2 elmozdulási kényszerrel terheljük. A hálózás során arra törekedtünk, hogy az elemszámot a lehető legalacsonyabban tartsuk, mivel tanulmányunk elsődleges célja a neurális hálózat teljesítményének vizsgálata, nem pedig a valós mechanikai viselkedés minél pontosabb numerikus reprodukálása. Ennek megfelelően a végeselemes modell körülbelül 1000 elemet tartalmaz, ami a hálófüggetlenségi vizsgálat alapján nagyjából 1%-os hibát eredményez. A nemlineáris egyenletek megoldásához a *Static, General* módszert alkalmaztuk. Mivel vizsgáljuk a geometriai nemlinearitások hatását, az *NLGEOM* paraméter aktiválása elengedhetetlen annak érdekében, hogy a szoftver is megfelelően figyelembe vegye ezeket.

3.2. Adathalmazok előállítása

A neurális hálózat hatékony tanításához megfelelő mennyiségű és kellően változatos adathalmaz előállítása szükséges. Az adatok sokféleségét az adathalmazok generálása során a körkivágás pozíciójának és sugarának változtatásával biztosítottuk. Különös figyelmet fordítottunk arra, hogy a körkivágás pozícióját úgy határozzuk meg, hogy az ne lépje túl a deformálható test határait. Ennek érdekében egy minimális Δ távolságot kellett fenntartani a test peremétől, ahogy az 1. ábrán is látszik. A körkivágás pozícióját és sugarát a (2) diszkrét értékek szerint változtattuk a szimulációk során és így $10 \cdot 10 \cdot 10 = 1000$ különböző geometriát vizsgáltunk a következő értékek kombinációjával:

$$\begin{aligned} x_c &\in \{25, 30, 36, 41, 47, 52, 58, 63, 69, 75\} \text{ mm}, \\ y_c &\in \{25, 41, 58, 75, 91, 108, 125, 141, 158, 175\} \text{ mm}, \\ r_c &\in \{1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 20\} \text{ mm}. \end{aligned} \quad (2)$$

A végeelemes szimulációkat Python szkriptek segítségével automatizáltan hajtottuk végre. A szimuláció során az előírt U_2 elmozdulás függvényében kinyertük az ébredő reakcióerőt (RF_2), a felső merev lap U_1 vízszintes elmozdulását, valamint az UR_3 szögelfordulását. Az adatokat a *History Output* beállítás alkalmazásával rögzítettük, majd egyenként különálló szövegalapú riportfájlokba mentettük. Az előállított virtuális adathalmazok kvalitatív szemléltetését a 4. ábra mutatja be.

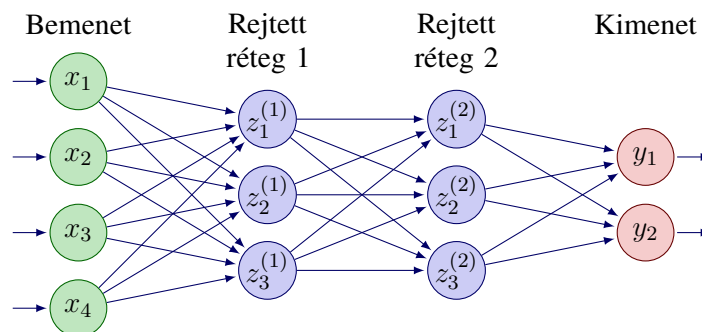


4. ábra. A vizsgált test mechanikai válasza a körkivágás pozíciójának és sugarának változtatása mellett, az U_2 elmozdulás függvényében: RF_2 reakcióerő (bal), U_1 elmozdulás (közép) és UR_3 elfordulás (jobb).

A neurális hálózat hatékony tanításához az adathalmazokat előzetesen fel kell dolgozni. Ennek megfelelően az adatokat normalizáltuk, majd tanító- és validációs halmazokra osztottuk. Az adathalmaz 80%-át a neurális hálózat tanítására (*training set*), míg a fennmaradó 20%-át a hálózat validációjára (*validation set*) használtuk fel.

3.3. Neurális hálózat modell

A deformálható test erő-elmozdulás karakterisztikájának előrejelzésére feedforward neurális hálózatot alkalmazunk, mivel még az egyszerűbb hálózati architektúrák is képesek a nemlineáris összefüggések viszonylag gyors és pontos megtanulására. Bár a predikciós modell kialakítására többféle neurális hálózat is használható, tanulmányunkban a legelterjedtebb és legegyszerűbb hálózattípust, a *multi-layer perceptron* (MLP) hálózatot választottuk [1]. Egy MLP neurális hálózat általános felépítését mutatja be az 5. ábra.



5. ábra. Példa egy MLP neurális hálózat architektúrájára.

A multi-layer perceptron (MLP) neurális hálózat legalább három teljesen összekapcsolt neuronréteget tartalmaz, amelyek között nincs visszacsatolás, kizárólag előreccsatolás (*feedforward*) történik. Az első réteg mindig a bemeneti réteg, amelyet a bemeneti $\mathbf{x}$ jelöl, az utolsó réteg pedig a kimeneti réteg, amelyet a kimeneti $\mathbf{y}$ szimbolizál, míg a kettő között helyezkednek el a rejtett rétegek. Az MLP hálózat működése során az $i + 1$ -edik réteg neuronjainak kimenetét az előző, i -edik réteg neuronjainak kimenete alapján számítjuk:

$$\mathbf{z}^{(i+1)} = \sigma \left(\mathbf{W}^{(i)} \mathbf{z}^{(i)} + \mathbf{b}^{(i)} \right), \quad (3)$$

ahol $\mathbf{z}^{(i)}$ az i -edik réteg neuronjainak kimeneti vektora, $\mathbf{W}^{(i)}$ a réteghez tartozó súlymátrix, $\mathbf{b}^{(i)}$ a réteghez tartozó bias vektor, míg σ az aktivációs függvény. A neurális hálózat tanítása során a súlymátrixok és a bias vektorok értékeit a *backpropagation* algoritmus segítségével optimalizáljuk, hogy a hálózat kimenete a lehető legjobban illeszkedjen az általunk meghatározott adathalmazra.

Az MLP neurális hálózat modelljének megalkotásához megfelelően kell megválasztani az ún. hiperparaméterek értékeit. A legfontosabb hiperparaméterek közé tartozik a rejtett rétegek száma, a rejtett rétegek neuronjainak száma, az aktivációs függvény típusa, a tanulási ráta (*learning rate*), valamint a tanítási ciklusok száma (*epochs*). A hiperparaméterek optimális értékeinek meghatározására nincs általánosan alkalmazható módszer; azok empirikus úton határozhatók meg. A hiperparaméterek kiválasztását rácskeresés (*grid search*) algoritmussal végeztük. Ennek során különböző hiperparaméter-konfigurációk mellett tanítottuk a hálózatot, majd a validációs adathalmazon számított Mean Squared Error (MSE) hibafüggvény (*loss function*) alapján választottuk ki az optimális hiperparamétereket:

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (4)$$

ahol n a kimeneti réteg neuronjainak száma, y_i a valós kimenet, $\hat{y}_i$ pedig a prediktált kimeneti érték. A vizsgálat során összesen 192 különböző modellt elemeztünk eltérő hiperparaméter-konfigurációkkal, majd ezek közül kiválasztottuk az optimális modellt, amelyet az erő-elmozdulás karakterisztika előrejelzésére használunk.

4. EREDMÉNYEK

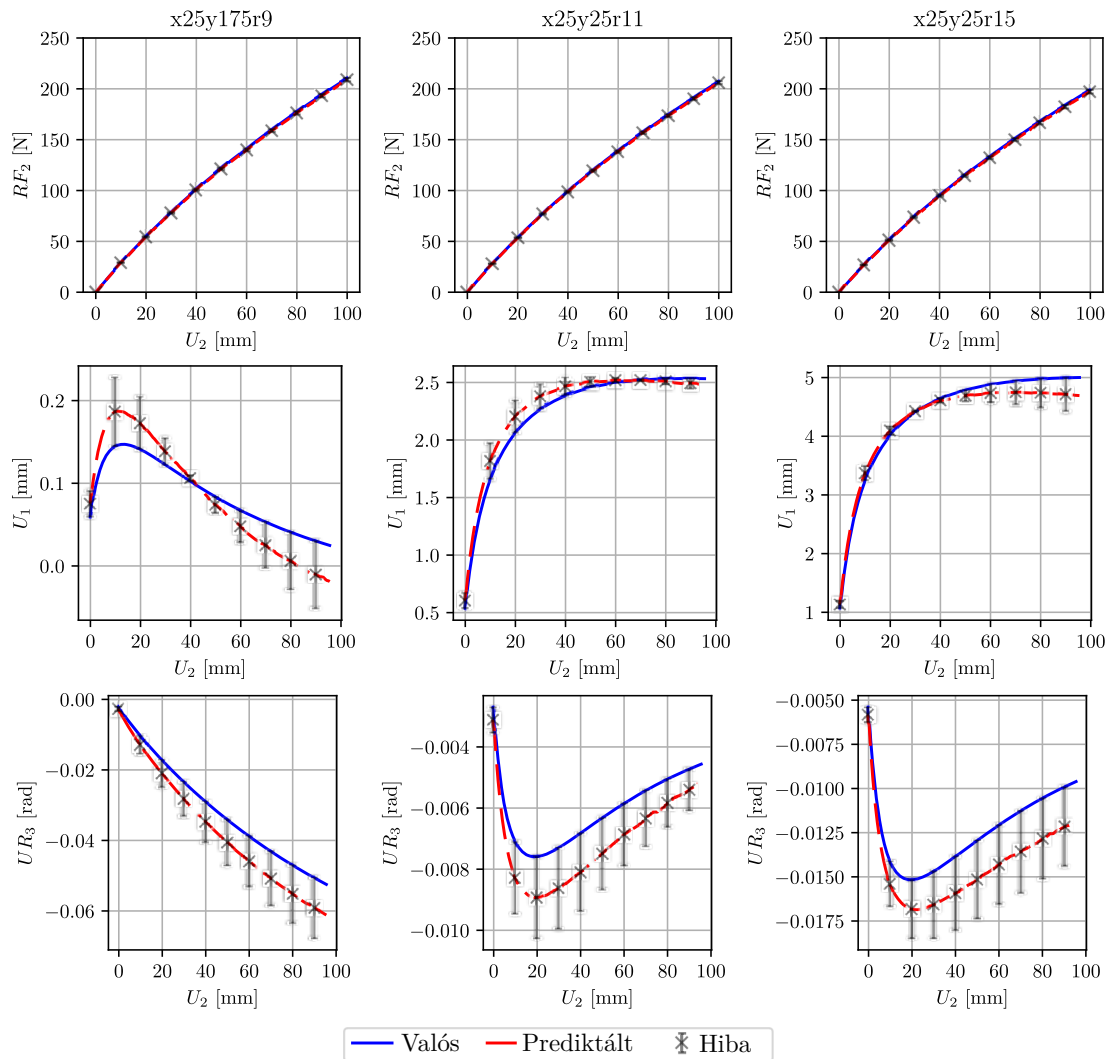
A betanított neurális hálózat előrejelzési teljesítményét a tesztadathalmazon értékeljük, vagyis olyan adathalmazon, amelyet a modell a tanítás során nem látott. A kiértékelés során a neurális hálózat által prediktált karakterisztikákat vetjük össze a végeselemes szimulációval előállított karakterisztikákkal, így vizsgálva a modell pontosságát és általánosító képességét. Az egyes teszt adatokon kapott eredményeket a 6. ábra szemlélteti.

A vizuális kiértékelés alapján megállapítható, hogy a neurális hálózat által prediktált erő-elmozdulás karakterisztika nagy pontossággal követi a végeselemes szimulációs eredményeket. Ezzel szemben az elmozdulás-elmozdulás és elfordulás-elmozdulás karakterisztikák esetében, bár a neurális hálózat jól követi a karakterisztika görbéjének általános jellegét, az előrejelzett értékekben nagyobb eltérés figyelhető meg. Fontos azonban megjegyezni, hogy ez utóbbi két karakterisztika esetében az abszolút értékek jóval alacsonyabbak a reakcióerő értékeihez képest, így a tapasztalható eltérések abszolút hibája viszonylag kicsinek tekinthető. A teljes tesztadathalmazon számított Mean Relative Error (MRE) értékek a következők:

$$\begin{aligned} \text{MRE}_{RF_2} &= 0.4264 \%, \\ \text{MRE}_{U_1} &= 21.04 \%, \\ \text{MRE}_{UR_3} &= 29.75 \%. \end{aligned} \quad (5)$$

5. KONKLÚZIÓ

A jelen tanulmány célja egy egyszerű adatalapú megközelítés kidolgozása volt, amely képes egy kétdimenziós, nem szabályos geometriájú deformálható test erő-elmozdulás karakterisztikájának előrejelzésére geometriai nemlinearitás figyelembevételével. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a fejlesztett MLP neurális hálózat az erő-elmozdulás karakterisztikát nagy pontossággal reprodukálja. Ezzel szemben a felső merev lap horizontális elmozdulását és szögelfordulását, bár jellegüket tekintve helyesen követi, nagyobb pontatlansággal prediktálja. A pontatlanságok több tényezőre vezethetők vissza, többek között: az elmozdulási értékek alacsony nagyságrendjére, az adathalmazok nem megfelelő változatosságára vagy elégtelen mennyiségére, valamint a neurális hálózat architektúrájának korlátaira. A további kutatások során érdemes lehet alternatív hálózati architektúrákat is megvizsgálni, például konvolúciós neurális hálózatokat (CNN), amelyek hatékonyabban képesek modellezni a térbeli összefüggéseket, különösen a jelen problémában releváns körkivágás pozíciója és sugara által befolyásolt hatásokat.



6. ábra. A neurális hálózat által prediktált karakterisztikák (piros), a szimulált karakterisztika (kék) és a kettő közötti eltérés a modell számára ismeretlen adathalmazokon: $x_c = 25, y_c = 175, r_c = 9$ (1. oszlop), $x_c = 25, y_c = 25, r_c = 11$ (2. oszlop), $x_c = 25, y_c = 25, r_c = 15$ (3. oszlop).

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Jelen kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával valósult meg. Pályázati azonosító: FK 142457. A jelen tanulmányban bemutatott tudományos eredmények az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készültek.

A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíj Program (DKÖP) által támogatott projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem támogatása alapján valósult meg.

IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Steven L Brunton and J Nathan Kutz. *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems, and control.*, Cambridge University Press, 2022.
- [2] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. *Data-driven computational mechanics.*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 304:81–101, 2016.
- [3] Johannes Dornheim, Lukas Morand, Hemanth Janarthanam Nallani, and Dirk Helm. *Neural networks for constitutive modeling: From universal function approximators to advanced models and the integration of physics.* Archives of Computational Methods in Engineering, 31(2):1097–1127, 2024
- [4] Jamshid Ghaboussi, JH Garrett Jr, and Xiping Wu. *Knowledge-based modeling of material behavior with neural networks.*, Journal of engineering mechanics, 117(1):132–153, 1991.
- [5] F Pedregosa, G Varoquaux, A Gramfort, V Michel, B Thirion, O Grisel, M Blondel, P Prettenhofer, R Weiss, V Dubourg, et al. *Machine learning in python.*, Journal of machine learning research, 12 (Oct):2825–2830, 2011.