

Zeiteffiziente und datenfreie Bauteil- und Prozesssimulation mithilfe von Physics-Informed Neural Networks

Tobias Würth, Anabel Prietze, Clemens Zimmerling, Constantin Krauß, Luise Kärger

Institut für Fahrzeugsystemtechnik – Institutsteil Leichtbau,
Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe, Deutschland

Summary:

Steigende Anforderungen bei knappen Ressourcen gepaart mit immer komplexeren Materialeigenschaften und Verarbeitungstechnologien vergrößern zunehmend die Aufwände in der Bauteilauslegung. Diese Zielkonflikte lassen sich nur durch eine gemeinsame Auslegung von Material, Geometrie und Prozess für die individuelle Anwendung lösen. Klassische Trial-Error-Experimente erweisen sich dabei schnell als zu kostspielig und auch mit numerischen Simulationen können Optimierungsrechnungen in der Praxis Tage bis Wochen dauern. Einen möglichen Ausweg bieten Methoden des Maschinellen Lernens (ML), insbesondere sogenannte Physics-Informed Neural Networks (PINNs). PINNs lernen im Training technische Zusammenhänge nicht nur datengetrieben aus Beobachtungen, sondern auch – und teilweise nur – aus physikalischen Gesetzen, etwa Energie- oder Impulsbilanzen. Damit sind sie robuster und aussagekräftiger, insbesondere wenn wenige oder keine Daten verfügbar sind. In dieser Arbeit wird ein PINN-basierter Simulationsansatz vorgestellt, der einen Fertigungsprozess in Abhängigkeit von Material, Bauteilparametern und Prozessführung simulieren kann. Der Ansatz wird demonstriert am Beispiel der Herstellung einer Verbundwerkstoffplatte im Autoklav-Verfahren. Die PINNs ermöglichen es, die physikalischen Eigenschaften des fertigen Bauteils in Abhängigkeit von Material, Geometrie und Prozess in Echtzeit und physikalisch konsistent auszugeben. Dadurch wird eine schnelle und ganzheitliche Auslegung von Material-, Geometrie- und Prozessparametern für verschiedene Auslegungsziele ermöglicht, etwa hinsichtlich mechanischer Anforderungen, Prozesszeit oder Bauteilkosten.

Keywords:

Maschinelles Lernen, Physik-basierte Modellierung, Datenfreie Ersatzmodelle, Verbundwerkstoff-Simulation, Geometrieunabhängige Simulation

1 Einführung

Angesichts stetig voranschreitender Technologien steigt zunehmend die Komplexität von Entwicklungs- und Produktionsprozessen. Kürzere Entwicklungszyklen und die immer schärfere Ressourcenknappheit erschweren die Gestaltung und Herstellung von Bauteilen zusätzlich. Zur Lösung dieses Zielkonflikts ist eine ganzheitliche Betrachtung und gemeinsame Auslegung von Material, Gestalt und Herstellungsprozess in der Entwicklung unabdingbar. Dabei erfordert zunehmend jedes Produkt eine individuelle, auf spezifische Anforderungen und Bedingungen angepasste Lösung, oft zusammengefasst unter dem Begriff „Produktoptimierung“.

Heutzutage ist es gängige Praxis, Fertigungsprozesse anhand von Mitarbeitererfahrung von Vorgängerbauteilen aufzusetzen und anhand von Produktionsversuchen sukzessive zu verfeinern. Fehlt diese Erfahrung jedoch – etwa bei neuen Materialien oder Prozessvarianten – können solche Einrichtungsarbeiten wirtschaftlich und zeitlich sehr ressourcenintensiv werden. Numerische Simulationstechniken, etwa die Finite-Elemente-Methode (FEM), können die Anzahl benötigter Experimente reduzieren und damit die benötigten Versuche auf die meistversprechenden Varianten konzentrieren. Allerdings zeigt die Praxis, dass aussagekräftige Modelle sehr rechenintensiv sind und schnell Tage oder Wochen benötigen – insbesondere in komplexen Optimierungsszenarien [1]. Immer stärker rücken folglich Methoden des maschinellen Lernens in den Vordergrund [2]. Einmal trainiert, ermöglichen sie es, Simulationen in Abhängigkeit von verschiedenen Einflussfaktoren – z.B. Material, Geometrie und Prozess – innerhalb von Sekundenbruchteilen in guter Näherung zu reproduzieren. Für das Training selbst werden jedoch zahlreiche Daten in Form von Experimenten oder Simulationen benötigt und es zeigt sich zudem, dass die Modellzuverlässigkeit in Grenzfällen schnell sinken kann, z.B. wenn Lücken im Datensatz vorliegen.

	Datengetriebenes ML-Modell	PINN	Numerische Simulation
Physik-Konsistenz	- -	+ +	+ +
Auswertezeit	+ +	+ +	- -
Trainingsaufwand	- -	- / +	+ +
Flexibilität	- -	-	+ +

Abb. 1: Gegenüberstellung von datengetriebenen Machine Learning (ML) Modellen, Physics-Informed Neural Networks und numerischen Simulationsmethoden.

Physics-Informed Neural Networks [3] stellen hierbei eine vielversprechende Alternative dar. Im Gegensatz zu konventionellen, datengetriebenen Methoden des maschinellen Lernens ermöglichen PINNs auch mit wenig Daten [4] – oder sogar ganz ohne Daten [5] – zuverlässige Netze zu generieren. Sie erreichen dies, indem sie die Prozessphysik in Form von physikalischen Gleichungen in das Training eines Neuronalen Netzes integrieren. In vielen Fällen ist die Prozessphysik bekannt und kann durch partielle Differentialgleichungen (pDGL) beschrieben werden, z.B. durch Massen-, Energie- oder Impulserhaltung. Auf diese Weise wird ermöglicht, ein physikalisch-konsistentes Modell zu erhalten. Dadurch entfällt einerseits die aufwendige Datengenerierung und es steigt andererseits die Zuverlässigkeit durch das physikalisch basierte Training und damit auch die Flexibilität des Modells bezüglich der Anwendbarkeit. Darüber hinaus können die betrachteten physikalischen Gleichungen des PINNs jederzeit an neue Problemstellungen angepasst werden, sodass ein bereits trainiertes PINN Modell direkt weiter trainiert werden kann ohne auf neue Trainingsdaten warten zu müssen. Gleichzeitig bleibt die hohe Geschwindigkeit der neuronalen Netze erhalten, wodurch PINNs zu einem idealen Kandidaten für Bauteil- und Prozessauslegungen werden.

2 PINNs als schnelles Ersatzmodell

PINNs unterscheiden sich von klassischen Neuronalen Netzen vor allem im Trainingsprozess. Datengetriebene Neuronale Netze bestimmen den Fehler der Ausgabe des Neuronalen Netzes \underline{u} verglichen mit einer vorgegebenen Referenzlösung \underline{u}_i^* , z.B. mit experimentellen Daten oder Simulationsergebnissen. Im Trainingsprozess werden die Neuronen im Netz so eingestellt, dass sie diese Referenzlösung möglichst gut – also mit minimaler Abweichung \mathcal{L} – reproduzieren:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_i^N |\underline{u}_i - \underline{u}_i^*|^2.$$

PINNs werden ebenfalls trainiert, indem sie eine Abweichung minimieren, allerdings bezieht sich die Abweichung nicht auf einen vorgegebenen Satz Referenzlösungen. Vielmehr wird versucht, die Neuronen so einzustellen, dass sie die Physik des Prozesses möglichst gut wiedergeben, also die zugrunde liegenden pDGL möglichst gut erfüllen. Konkret bedeutet dies, dass die Ausgabe des Neuronalen Netzes \underline{u} in die pDGL $\underline{\mathcal{D}}$, die Anfangsbedingungen $\underline{\mathcal{I}}$ und Randbedingungen $\underline{\mathcal{B}}$ des Problems eingesetzt wird und anschließend der Fehler als gewichtete Summe der Fehler in den einzelnen Gleichungen bestimmt wird:

$$\mathcal{L} = \lambda_{\underline{\mathcal{D}}} \mathcal{L}_{\underline{\mathcal{D}}} + \lambda_{\underline{\mathcal{B}}} \mathcal{L}_{\underline{\mathcal{B}}} + \lambda_{\underline{\mathcal{I}}} \mathcal{L}_{\underline{\mathcal{I}}}.$$

Diese Fehlerdefinition ermöglicht es, Neuronale Netze ganz ohne Referenzlösung zu trainieren, was eine aufwendige Datengenerierung erspart [6]. Neben dem Ort und der Zeit können Parameter $\underline{\xi}$ – z.B. Material-, Prozess- oder Geometrieparameter – als Eingangsgrößen des PINN $\underline{u}(x, t, \underline{\xi})$ ergänzt werden. So kann das PINN die Lösung der Differentialgleichungen in Abhängigkeit dieser Parameter lernen [4]–[6].

3 Autoklav-Prozess: Simulation und Auslegung mithilfe von PINNs

3.1 Prozessbeschreibung

Im Folgenden wird die thermochemische Aushärtung einer Platte aus kohlenstofffaserverstärktem Kunststoff (CFK) in einem Autoklav sowie deren Biegeverhalten untersucht. Es werden verschiedene Plattendicken D im Bereich von 1-10 mm betrachtet, wobei die Breite B und Tiefe T auf 250 mm bzw. 800 mm festgelegt sind. Der Prozess wird 2-dimensional betrachtet in der z-Ebene unter Annahme einer konstanten Temperatur in Richtung der unidirektionalen Fasern (z-Richtung). Das Materialverhalten wird als homogen und transversalisotrop in Faserrichtung angenommen und ein konstanter Prozessdruck modelliert.

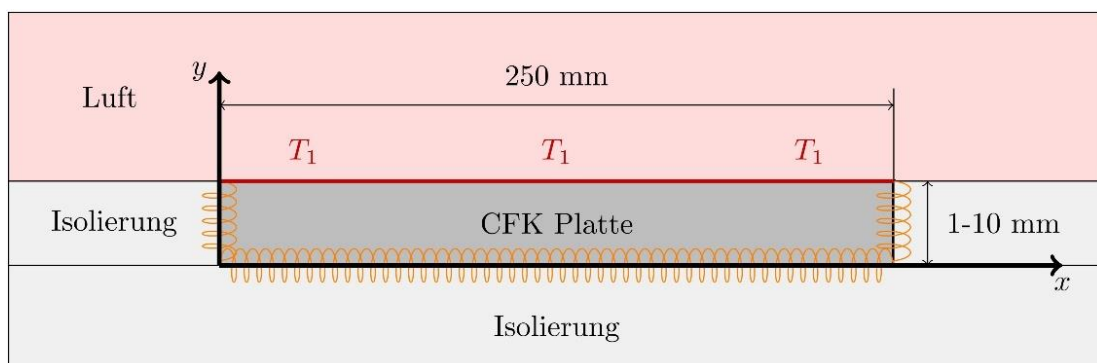


Abb. 2: Schematische Darstellung des betrachteten Aushärtungsprozesses einer CFK-Platte in einem Autoklav, angelehnt an das Prozessbeispiel in [6].

Das Temperaturverhalten des Faserverbundwerkstoffs im Prozess kann unter den zuvor beschriebenen Annahmen durch folgende Wärmeleitungsgleichung beschrieben werden [7]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c c_{p,c} T) = k_c \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + (1 - \Phi_f) \rho_m \Delta h_m \dot{\alpha}.$$

Dabei bezeichnet ρ_c die Dichte, $c_{p,c}$ die Wärmekapazität bei konstantem Druck und k_c die Wärmeleitfähigkeit des Verbundwerkstoffs CFK, ρ_m die Dichte und Δh_m die spezifische Totalenthalpie der Reaktion des Duromers. Der Faservolumengehalt Φ_f wird im Bereich 25 % bis 75 % betrachtet. Zur Beschreibung der Aushärtungskinetik des Harzes wird das Kamal-Malkin Modell verwendet [8]:

$$\frac{d\alpha}{dt} = (K_1 + K_2 \alpha^m)(1 - \alpha)^n.$$

Die enthaltenen Größen K_i können mit der Arrhenius Gleichung $K_i = A_i \exp(-E_i/(RT))$ spezifiziert werden, unter Zunahme der universellen Gaskonstante R , einer materialspezifischen Reaktionsgeschwindigkeitskonstante A_i und der Aktivierungsenergie E_i [8], [9]. Zum Prozessbeginn hat die Platte die Raumtemperatur $T_0 = 20$ °C und der Aushärtegrad beträgt $\alpha = 0$ %. Die Aufheizung des oberen Plattenrandes durch die heiße Luft im Autoklav mit der Temperatur T_1 wird beschrieben durch

$$T(x, y = D, t, \underline{\xi}) = (T_1 - T_0) \tanh(t/\tau_0) + T_0.$$

Der Zeitfaktor τ_0 beeinflusst die Aufheizdauer der Platte und beträgt $\tau_0 = 20/\operatorname{atanh}(0.99)$ s. Die die Aufheiztemperatur T_1 kann im Autoklav im Bereich 60 °C und 180 °C variiert werden. Der linke, rechte und untere Rand der Platte ist adiabat, sodass

$$\left. \frac{\partial T(x, y, t, \underline{\xi})}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial T(x, y, t, \underline{\xi})}{\partial x} \right|_{x=B} = \left. \frac{\partial T(x, y, t, \underline{\xi})}{\partial y} \right|_{y=0} = 0$$

gilt. Die Biegesteifigkeit der Platte lässt sich mit

$$S_b = E_c B D^3 / 12 \quad (1)$$

[10] abschätzen, mit dem Elastizitätsmodul E_c des Verbundwerkstoffs. Für den Elastizitätsmodul des Verbundwerkstoffs E_c quer zur Faserrichtung gilt [11]:

$$\frac{1}{E_c} = \frac{\Phi_f}{E_f} + \frac{1 - \Phi_f}{E_m}. \quad (2)$$

3.2 Prozesssimulation mit PINNs

Ein PINN wird nachfolgend trainiert mit den zuvor beschriebenen Prozessgleichungen, sodass das trainierte Neuronale Netz die Temperatur und die Aushärtung während des Prozesses ausgeben kann. Zusätzlich wird die Plattendicke D , der Faservolumengehalt Φ_f und die Temperatur T_1 der aufgeheizten Luft im Autoklav variiert und dem PINN neben dem Ort x und y und der Zeit t als zusätzliche trainierbare Eingangsgröße $\underline{\xi} = (D, \Phi_f, T_1)$ hinzugefügt. Dadurch lernt das PINN die Prozesssimulation für verschiedene Geometrie-, Material- und Prozessgrößen.

Die ausgegebene Temperatur- und Aushärtegradverteilung des trainierten PINNs sind in Abb. 3 oben respektive unten für eine Prozesszeit von $t = 50$ s im Autoklav dargestellt. Dabei basiert die Lösung in Abb. 3 a), b) und c) auf jeweils einer nach dem Training zufällig ausgewählten Kombination von Plattendicke D , Faservolumengehalt Φ_f und Prozesstemperatur T_1 (vgl. Tabelle oben in Abb. 3).

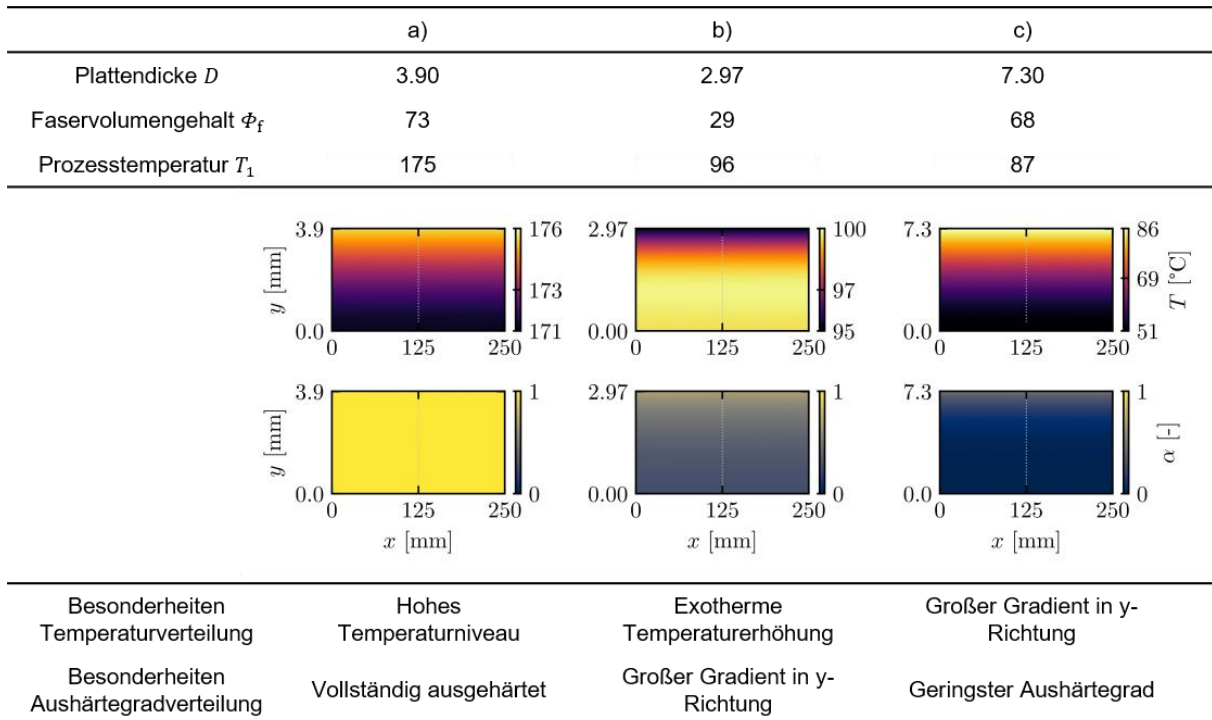


Abb. 3: Die Abbildungen a), b) und c) zeigen jeweils die vom PINN ausgegebene Temperaturverteilung (oben) und die dazugehörige Aushärtegradverteilung (unten) in der CFK-Platte im Autoklav nach $t = 50$ s Prozesszeit für eine zufällig gewählte Plattendicke D , Faservolumengehalt ϕ_f und Prozesstemperatur T_1 . Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind die Darstellungen nicht maßstabsgetreu.

Trotz gleichem Prozesszeitpunkt weisen die Lösungen deutliche Unterschiede auf. In Abb. 3 a) ist das Temperaturniveau mit 176°C deutlich größer als in den beiden anderen Prozessen und die CFK-Platte ist bereits vollständig ausgehärtet. Dagegen ist die Temperaturverteilung in Abb. 3 b) umgedreht in Dickenrichtung aufgrund der durch die Aushärungsreaktion exotherm freiwerdenden Wärme. Die Aushärtegradverteilung zeigt nach 50 s aber noch einen umgekehrten Gradienten in Dickenrichtung. Der Aushärtegrad in Abb. 3 c) ist im Großteil der Platte nahe 0 % und die Temperaturverteilung weist einen großen Gradienten in Dickenrichtung auf. Die mittlere relative Abweichung des PINN zu Referenz-FEM-Simulationen liegt trotz der großen Lösungsunterschiede zwischen den einzelnen Prozessen nur in der Größenordnung von 0,1 % (vgl. [6]). Die zufälligen Auswertungen in Abb. 3 sind zudem nur möglich, da das trainierte PINN die Simulation gitterfrei durchführt und dies innerhalb von Sekundenbruchteilen (Intel i5 9500@ 3.00 GHz). Im Gegensatz dazu ist bei der FEM für jede Geometrie-, Material- und Prozessanpassung eine neue Modellerstellung und eine neue Simulation nötig, welche auf der gleichen CPU mehrere Stunden benötigt (vgl. [6]).

Im nächsten Schritt wird gezeigt, wie das PINN zur Unterstützung einer ganzheitlichen Geometrie-, Material- und Prozessauslegung herangezogen werden kann. Für die Anwendung soll die CFK-Platte eine Mindestbiegesteifigkeit $S_{b,\min}$ in Dickenrichtung y einhalten. Mit den Gleichungen (1) und (2) lässt sich damit eine Mindestplattendicke

$$D_{\min} = \left(\frac{12 S_{b,\min}}{E_c(\phi_f) B} \right)^{1/3} \quad (3)$$

In Abhängigkeit vom Faservolumengehalt ϕ_f herleiten. Eine zweite Bedingung ist, dass die Platte mindestens $\alpha_{\min} = 99$ % ausgehärtet sein muss, um den Prozess im Autoklav als abgeschlossen annehmen zu können.

In Abb. 4 ist der Aushärtegrad über der Prozesszeit t für verschiedene Plattendicken D dargestellt. Zusätzlich ist der Aushärtegrad für neun verschiedene Kombinationen (Abb. 4 a) bis i)) von Faservolumengehalt ϕ_f und Prozesstemperatur T_1 visualisiert. Die Mindestplattendicke D_{\min} und der Mindestaushärtegrad α_{\min} sind jeweils als rote bzw. weiße Linie dargestellt.

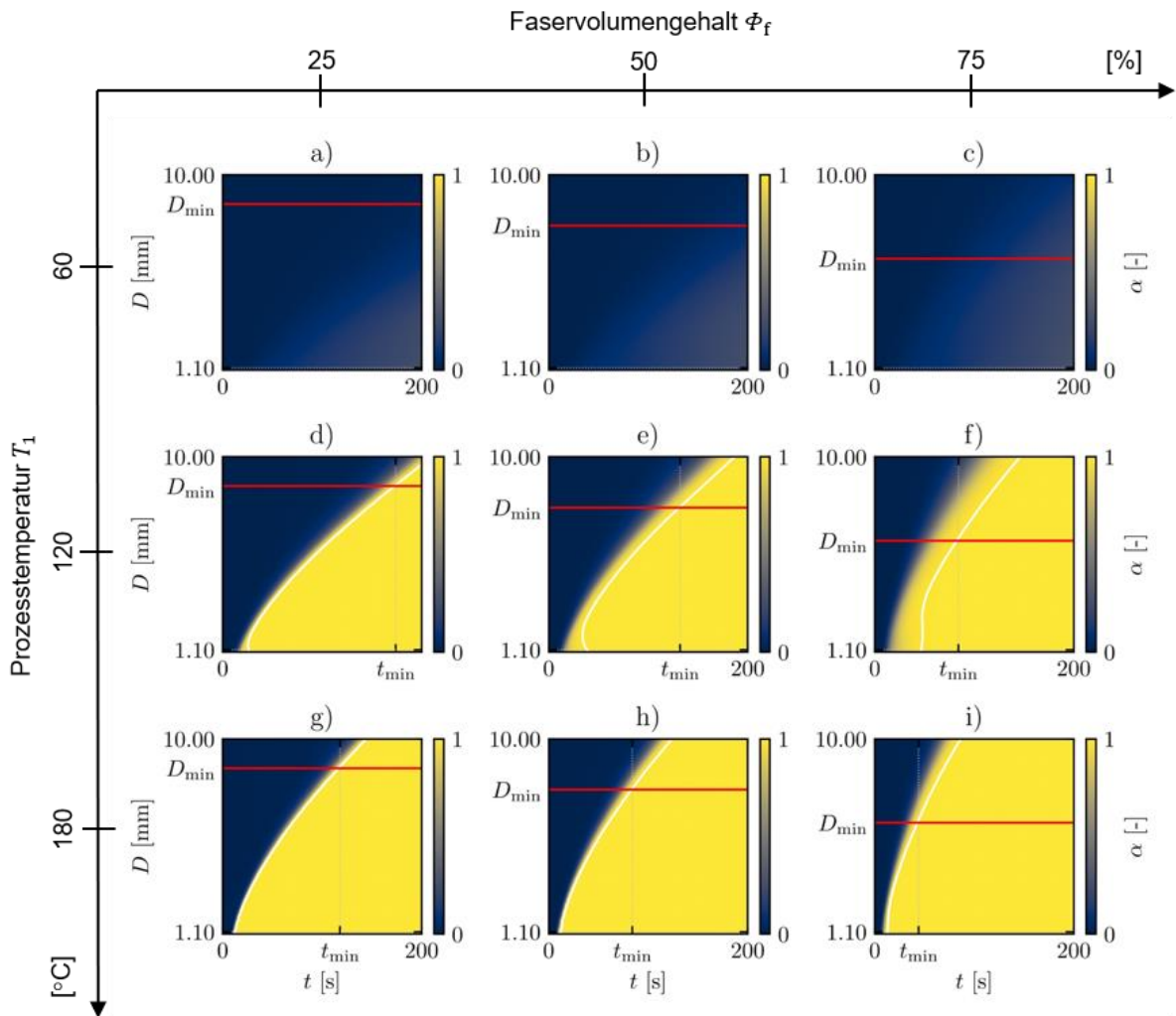


Abb. 4: a) bis i) stellen den Aushärtegrad an der Plattenmitte unten ($x = B/2, y = 0$) über der Prozesszeit t und für verschiedene Plattendicken D für unterschiedliche Kombinationen aus Faservolumengehalt ϕ_f und Prozesstemperatur T_1 dar. Die rote Linie markiert die Mindestplattendicke D_{\min} und die weiße Linie den Mindestaushärtegrad α_{\min} .

Der Aushärtegrad ist stark abhängig von der Prozesstemperatur T_1 . Für niedrige Temperaturen härtet die Platte nicht vollständig innerhalb der betrachteten 200 s Prozesszeit aus. Für hohe Temperaturen und dünne Platten (Abb. 4 unten) erfolgt die Aushärtung schlagartig innerhalb von wenigen Sekunden, wohingegen für mittlere Temperaturen und dickere Platten der Übergang mehr Zeit benötigt. Für dünne Platten ist der Aushärtegrad nur gering abhängig vom Faservolumengehalt ϕ_f , wohingegen bei großen Plattendicken der Faservolumengehalt aufgrund der Wärmeleitung einen signifikanten Einfluss auf die Aushärtezeit aufweist. Die Mindestplattendicke D_{\min} ändert sich entsprechend Formel (3) nur in Abhängigkeit vom Faservolumengehalt ϕ_f .

Anhand der Visualisierung in Abb. 4 lässt sich eine Mindestprozesszeit t_{\min} ableiten, als Schnittpunkt der Mindestplattendicke D_{\min} (rote Linie) und dem Mindestaushärtegrad α_{\min} (weiße Linie), welche jeweils auf der x -Achse der Abbildung jeweils eingetragen ist. Die Mindestprozesszeit t_{\min} kann anschließend zur Bauteil- und Prozessauslegung herangezogen werden, da sie den möglichen Maschinendurchsatz begrenzt und damit neben anderen Einflussgrößen, wie Material- (ϕ_f, D) und Energieverbrauch (T_1), entscheidend die Bauteilkosten beeinflusst. Dieses Beispiel demonstriert, dass PINNs es ermöglichen, den Einfluss wichtiger Geometrie-, Material- und Prozessgrößen (z.B. D, ϕ_f und T_1) auf die Bauteil- und Prozesseigenschaften (z.B. $S_{b,\min}$ und t_{\min}) schnell und anschaulich zu visualisieren. Somit können sie das Verständnis im Auslegungprozess entscheidend verbessern und Designentscheidungen sowohl quantitativ als auch qualitativ unterstützen.

4 Schlussfolgerungen

Diese Arbeit präsentiert einen integrierten Simulationsansatz von Material, Geometrie und Prozessführung mithilfe von Physics-Informed Neural Networks (PINNs). Demonstriert wird dieser Ansatz am Beispiel eines Aushärtungsprozesses einer CFK-Platte in einem Autoklav.

Die trainierten PINN-Modelle ermöglichen eine schnelle quantitative Auswertung des thermochemischen Verhaltens in der CFK-Platte während der gesamten Prozessdauer. Insbesondere ist eine Simulation für variierende Faservolumenanteile, Plattendicken und Prozesstemperaturen in Sekundenbruchteilen darstellbar, auch bei komplexen Abhängigkeiten der Lösung von diesen Parametern.

Zudem wird illustriert, dass der Einfluss von Geometrie-, Bauteil- und Prozessgrößen auf wichtige Bauteil- und Prozesseigenschaften mithilfe von PINNs schnell dargestellt werden kann, was zur qualitativen Unterstützung von Designentscheidungen sowie zur Stärkung des Prozessverständnisses beiträgt.

Insgesamt zeigt diese Arbeit, dass PINNs eine vielversprechende Möglichkeit darstellen, Bauteil- und Prozessentwicklungen effizient und datenfrei sowohl quantitativ als auch qualitativ zu unterstützen. Nichtsdestotrotz sind zukünftig weitere Entwicklungsschritte nötig, um die Methode für komplexere Bauteile und Prozesse anwendbar zu machen.

5 Danksagung

Diese Arbeit ist Teil der DFG KI-FOR 5339, gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) – 459291153. Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung.

6 Literatur

- [1] C. Zimmerling, C. Poppe, O. Stein, and L. Kärger: "Optimisation of manufacturing process parameters for variable component geometries using reinforcement learning," *Mater. Des.*, vol. 214, Feb. 2022, p. 110423, doi: 10.1016/j.matdes.2022.110423.
- [2] J. Pfrommer, C. Zimmerling, J. Liu, L. Kärger, F. Henning, and J. Beyerer: "Optimisation of manufacturing process parameters using deep neural networks as surrogate models," *Procedia CIRP*, vol. 72, Jan. 2018, pp. 426–431, doi: 10.1016/j.procir.2018.03.046.
- [3] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis: "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," *J. Comput. Phys.*, vol. 378, Feb. 2019, pp. 686–707, doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- [4] E. Haghighat, M. Raissi, A. Moure, H. Gomez, and R. Juanes: "A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 379, Jun. 2021, p. 113741, doi: 10.1016/j.cma.2021.113741.
- [5] L. Sun, H. Gao, S. Pan, and J.-X. Wang: "Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 361, Apr. 2020, p. 112732, doi: 10.1016/j.cma.2019.112732.
- [6] T. Würth, C. Krauß, C. Zimmerling, and L. Kärger: "Physics-informed neural networks for data-free surrogate modelling and engineering optimization – An example from composite manufacturing," *Mater. Des.*, vol. 231, Jul. 2023, p. 112034, doi: 10.1016/j.matdes.2023.112034.
- [7] A. Johnston, P. Hubert, G. Fernlund, R. Vaziri, and A. Poursartip: "Process Modeling of Composite Structures Employing a Virtual Autoclave Concept," *Sci. Eng. Compos. Mater.*, vol. 5, no. 3–4, Dec. 1996, pp. 235–252, doi: 10.1515/SECM.1996.5.3-4.235.
- [8] Kamal M. R.: "Integrated thermorheological analysis of the cure of thermosets," *SPE Tech Pap*, vol. 19, 1973, pp. 187–191.
- [9] A. Bernath, L. Kärger, and F. Henning: "Accurate Cure Modeling for Isothermal Processing of Fast Curing Epoxy Resins," *Polymers*, vol. 8, no. 11, Art. no. 11, Nov. 2016, doi: 10.3390/polym8110390.
- [10] C. Mittelstedt: "Structural Mechanics in Lightweight Engineering", Cham: Springer International Publishing, 2021. doi: 10.1007/978-3-030-75193-7.
- [11] H. Altenbach, J. Altenbach, and W. Kissing: "Mechanics of Composite Structural Elements". Singapore: Springer, 2018. doi: 10.1007/978-981-10-8935-0.