

Datenbasierte Parameteridentifikation und Modellierung von superelastischen Formgedächtnislegierungen

Okyay Altay, Niklas Lenzen

Lehrstuhl für Baustatik und Baudynamik, RWTH Aachen

Zusammenfassung: Superelastische Formgedächtnislegierungen gewinnen wegen ihrer einzigartigen Eigenschaften zunehmend an Bedeutung. Insbesondere können sie große Dehnungen ohne verbleibende Verformungen realisieren. In diesem Beitrag werden künstliche neuronale Netze eingesetzt, um Materialparameter aus zyklischen Versuchen zu identifizieren. Des Weiteren werden Operatortnetze (DeepONets) verwendet, um die Martensitbildung und Spannungsantwort zu modellieren.

1 Einleitung

Formgedächtnislegierungen (FGL) sind metallische Funktionsmaterialien, die bei Temperaturen oberhalb ihrer materialspezifischen *Austenit-Finish-Temperatur* A_f auf Dehnungen *superelastisch* (auch als *pseudoelastisch* bezeichnet) reagieren. Wie in [11] näher beschrieben, zeigt das Material zunächst ein linear-elastisches Verhalten. Nach Erreichen einer kritischen Spannung beginnt die Kristallgitterstruktur der FGL sich von *Austenit* zu *Martensit* zu ändern. Diese Phasenumwandlung führt zu einem Plateau in der Spannungs-Dehnungskurve. Während des Entlastens nimmt die Spannung zunächst wieder linear ab. Nach Unterschreiten einer weiteren kritischen Spannung beginnt die Rücktransformation von Martensit in Austenit. Nach Abschluss der Phasenumwandlung nimmt die Spannung weiterhin linear ab und das Material kehrt zu seinem ursprünglichen Zustand zurück. Aufgrund dieser einzigartigen Eigenschaften können FGL große Dehnungen ($\geq 13\%$ [13]) ohne bleibende Verformungen realisieren und während zyklischer Beanspruchungen Energie hysteretisch dämpfen.

Diese Eigenschaften, kombiniert mit weiteren Merkmalen wie dem Formgedächtniseffekt sowie Korrosions- und Ermüdungswiderstand, ermöglichen FGL zahlreiche Einsatzgebiete, nicht nur im Bauwesen, sondern auch in der Luft- und Raumfahrttechnik, der Autoindustrie

und der Medizin. Dank des superelastischen Materialverhaltens konnten vielfältige innovative Dämpfungs- und Rückstellsysteme für Bauwerke entwickelt werden [14]. Diese Systeme haben das primäre Ziel, Schwingungen und die daraus resultierenden Effekte zu minimieren. In der Regel kommt die Legierung Nickel-Titan (Nitinol) zum Einsatz, während kupfer- und eisenhaltige Legierungen kostengünstigere Alternativen bieten. Aufgrund thermodynamischer Vorteile werden insbesondere Litzen, Drähte und Stäbe bevorzugt.

Für die Auslegung dieser Systeme eignen sich uniaxiale makroskopische Werkstoffmodelle [1], die vorwiegend auf dem phänomenologischen Ansatz von Tanaka und Nagaki [12] basieren. Das Modell von *Zhu und Zhang* [15] ist ein Beispiel dafür. Diese Modelle beinhalten zahlreiche Parameter, die zuvor identifiziert werden müssen. Dazu sind neben klassischen zyklischen Versuchen auch weitere Experimente erforderlich, wie die dynamische Differenzkalorimetrie, um die thermodynamischen Eigenschaften zu ermitteln. Darüber hinaus können auch modellinterne Parameter existieren, die nicht direkt durch Experimente erfasst werden können und entsprechend der Materialantwort kalibriert werden müssen.

In unserer Arbeit [7] entwickelten wir eine Methode, um die thermodynamischen und internen Parameter mithilfe *künstlicher neuronaler Netze* (KNN) aus zyklischen Versuchen zu extrahieren. Die Spannungsantworten von FGL-Drähten konnten wir dann mit dem Modell von *Zhu und Zhang* in Abhängigkeit von Materialdehnungen über die Zeit berechnen. Makroskopische Modelle gestatten die Berechnung dynamischer Lastfälle jedoch nur mit äußerst kleinen Zeitschritten ($\leq 0,001$ s). Bei Übergängen zur Phasenumwandlung liefern sie sonst nicht-eindeutige Resultate. Für die Optimierung der Auslegungsparameter von FGL-basierten Systemen sind jedoch zahlreiche Berechnungen mit komplexen Lastfällen, wie Erdbeben, erforderlich. Um den Berechnungsaufwand zu reduzieren, präsentieren wir in dieser Arbeit eine Modellierungsmethode, die auf die KNN basiert.

Bislang sind die KNN erfolgreich zur Optimierung der Materialzusammensetzung von FGL eingesetzt worden [3] und fanden ebenso Anwendung in der Modellierung von FGL-Sensoren und -Aktuatoren [4]. Das superelastische Materialverhalten wurde von Ozbulut und Hurlerbaus mithilfe von Fuzzy-Logik modelliert. Allerdings war dabei spezifisches Fachwissen erforderlich, insbesondere bei der Erstellung von Zugehörigkeitsfunktionen und Fuzzy-Regeln.

Alternative Ansätze könnten sich aus den neusten physikinformierten KNN-Methoden ergeben. Beispielsweise schlugen Linka und Kuhl kürzlich eine Methode unter Verwendung von Vorwärtsnetzen für die allgemeine Werkstoffmodellierung vor [8]. Wie sie jedoch feststellten, eignen sich Vorwärtsnetze nicht zur Modellierung von geschichtsabhängigem Werkstoffverhalten, wie es bei den FGL der Fall ist. Daher entwickeln wir in dieser Arbeit für die superelastischen FGL eine Modellierungsmethode mit Operatornetzen, auch bekannt als *Deep Operator Neural Networks* oder DeepONets [9].

In Abschnitt 2 erläutern wir die Modellierungsmethode. Als Grundlage dazu werden dabei auch die Parameteridentifikationsmethode sowie das Materialmodell von *Zhu und Zhang* vorgestellt. Abschnitt 3 präsentiert die Anwendung der Methode am Beispiel eines Rahmentragwerks. Abschluss und Zusammenfassung der Arbeit finden sich in Abschnitt 4.

2 Methoden

2.1 Parameteridentifikation und Werkstoffmodell

Das uniaxiale Materialmodell von *Zhu und Zhang* [15], wie es in der makroskopischen Modellierung superelastischer FGL üblich ist, basiert auf den Gesetzen der Thermodynamik und leitet sich von der freien Helmholtz-Energie ab. Hieraus ergebenden sich insbesondere die folgenden Differentialgleichungen:

$$\dot{\sigma} = E(\dot{\varepsilon} - \varepsilon_l \dot{\xi}), \quad (1)$$

$$\dot{T} = \frac{1}{C\rho} (\sigma \varepsilon_l \dot{\xi} + L \dot{\xi} - \gamma(T - T_0)), \quad (2)$$

$$\dot{\xi} = f(T, \sigma) \left(\dot{T} - \frac{\dot{\sigma}}{c} \right). \quad (3)$$

Das simultane Lösen dieser Gleichungen über die Zeit t , beispielsweise mithilfe des Runge-Kutta-Verfahrens, ermöglicht die Berechnung von Änderungen in der Spannung $\dot{\sigma}$, Temperatur \dot{T} und Martensitgehalt $\dot{\xi}$ in Abhängigkeit vom Dehnungsverlauf $(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$. Das Materialverhalten wird dabei durch eine Vielzahl von Parametern bestimmt. Die Parameter der *Spannungsgleichung* Gl. (1) können mithilfe herkömmlicher zyklischer Versuche erfasst werden. Dazu gehören die Elastizitätsmodule der Austenit- und Martensitphasen (E_A, E_M), die wie folgt homogenisiert werden können:

$$E = E_A + \xi(E_M - E_A). \quad (4)$$

Dabei kann ε_l ebenfalls aus den zyklischen Versuchen ermittelt werden und beschreibt die maximale Dehnung nach vollständiger Phasenumwandlung ($\xi = 100\%$).

Neben der Materialdichte ρ kommen in der *Wärmegleichung* Gl. (2) die spezifische Wärmekapazität C und der volumetrische Wärmeübergang γ zum Einsatz. Die Identifikation dieser Parameter erfordert zusätzliche thermodynamische Untersuchungen. Zudem stellt die latente Wärme L einen internen Modellparameter dar, der nicht direkt aus den Versuchen gemessen werden kann. Stattdessen muss er gemäß der Spannungs- und Temperaturantwort der zu modellierenden FGL *kalibriert* werden. Die Umgebungstemperatur wird in der Wärmegleichung durch T_0 repräsentiert.

Die *Phasentransformationsgleichung* Gl. (3) beinhaltet eine exponentielle Funktion $f(T, \sigma)$, die die Martensitbildung wiedergeben soll. Dabei steht c für den Clausius-Clapeyron-Koeffizient, welcher die Phasentransformationsbedingungen darstellt und den Zusammenhang zwischen den kritischen Spannungen und Temperaturen beschreibt. Die kritischen Temperaturen können aus den herkömmlichen Spannungsversuchen ermittelt werden, indem zusätzlich nur noch die Materialtemperatur gemessen werden muss. Allerdings muss insbesondere die *Austenit-Start-Temperatur* A_s in diesem Materialmodell speziell für dynamische Szenarien kalibriert werden [7].

Die Modellparameter lassen sich damit in zwei Gruppen einteilen. Die ersten sind die *allgemeinen Parameter* $\{E_A, E_M, \varepsilon_l, \rho, c, T_s, T_f\}$ sowie die zugehörigen kritischen Spannungen. Diese Parameter können direkt aus den Spannungs-Dehnungsversuchen ermittelt werden und

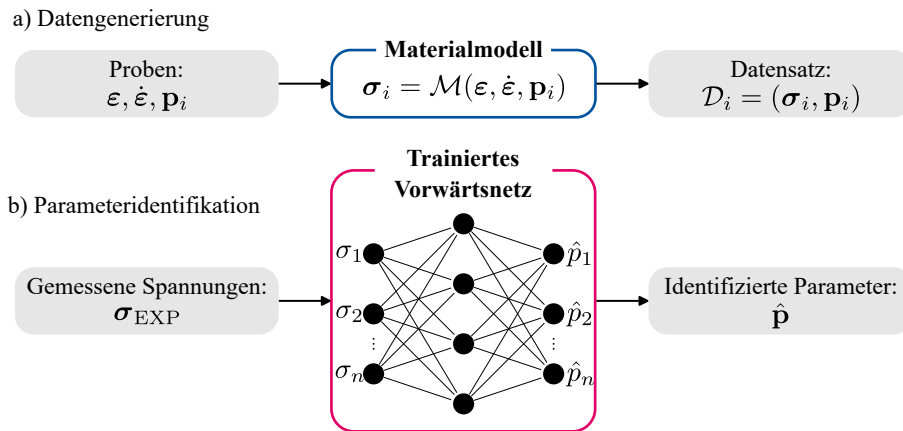


Abbildung 1: Parameteridentifikationsmethode. a) zeigt die Generierung von Daten, die für das Training des Vorwärtsnetzes erforderlich sind. b) stellt das Netz im Einsatz dar. Parameter, die normalerweise zusätzliche Experimente oder Kalibrationsvorgänge benötigen, können direkt aus zyklischen Versuchen ermittelt werden.

werden oft vom Hersteller bereitgestellt. Die zweite Gruppe sind die *thermodynamischen Parameter* $\{C, \gamma\}$ und erfordern zusätzliche Experimente zur Bestimmung. Hierzu zählen auch $\{L, A_s\}$, die entweder gar nicht oder nicht exakt aus Experimenten ermittelt werden können und daher im Materialmodell kalibriert werden müssen.

Für die Identifikation der geeigneten thermodynamischen Parameter werden zunächst im Parameterraum Stichproben \mathbf{p}_i mit dem Latin-Hypercube-Verfahren ausgewählt, Abb. 1a. Dabei ist es wichtig, den Parameterraum realistisch zu begrenzen, um den Berechnungsaufwand zu minimieren. Die Anzahl der ausgewählten Parameter hängt von der Empfindlichkeit der spezifischen FGL ab. In dynamischen Lastfällen treten in der Regel verstärkt thermodynamische Effekte auf, weshalb eine präzisere Identifikation der zugehörigen Parameter, im Vergleich zu statischen Szenarien, erforderlich ist.

Im nächsten Schritt werden mithilfe des Materialmodells für jede ausgewählte Parameterkombination die entsprechenden Spannungsantworten σ_i berechnet. Dabei werden harmonische Zeitverläufe der Dehnungen ε und Dehnungsraten $\dot{\varepsilon}$ als Eingangsgrößen verwendet, die repräsentativ für den vorgesehenen Anwendungsbereich der FGL sind. Insbesondere bei dynamischen Szenarien können Dehnungsamplituden [5] und -raten [6] das Materialverhalten erheblich beeinflussen und müssen daher in den Zeitverläufen angemessen berücksichtigt werden. Die Auswahl des maßgebenden Lastfalls kann mit Hilfe adaptiver Stichprobenverfahren automatisiert erfolgen, wie in [10] für die dynamische Modellierung von nichtlinearen Systemen näher beschrieben ist. Alternativ können auch mehrere Lastfälle separat betrachtet werden. Die generierten Datensätze \mathcal{D} aus dem Materialmodell beinhalten Spannungsvektoren σ_i zusammen mit den entsprechenden Parameterkombinationen \mathbf{p}_i .

Mit den generierten Daten wird ein Vorwärtsnetz trainiert. Dieses Netz verwendet die Spannungsvektoren als Eingang und die Parameterkombinationen als Ausgang. Die Hyperparameter des Netzes, wie die Anzahl der Schichten und Neuronen, die Lernrate, die Aktivierungs-

funktionen sowie weitere Einstellungen, können basierend auf Erfahrungswerten optimiert werden. Hierfür können auch Methoden, wie die *Rastersuche* oder *randomisierte Algorithmen*, verwendet werden [2]. Das trainierte Netz ist dann in der Lage, wie in Abb. 1b dargestellt, die thermodynamischen Parameter des Materialmodells direkt aus den Spannungs-Dehnungsdaten der zyklischen Versuche zu ermitteln, ohne dass zusätzliche thermodynamische Experimente durchgeführt werden müssen. Darüber hinaus erfolgt die Kalibrierung der Parameter automatisch am Materialmodell, wodurch keine weiteren Anpassungen erforderlich sind.

2.2 Modellierung mit DeepONet

Das primäre Ziel besteht darin, mithilfe eines KNNs aus den Dehnungszeitverläufen die zugehörigen Spannungsverläufe zu bestimmen. Dabei können auch interne Prozesse von Interesse sein. Ein Beispiel hierfür ist die Phasenumwandlung, die eine zentrale Rolle bei der Optimierung von Dämpfungssystemen spielt. Hierdurch lässt sich evaluieren, in welchem Ausmaß die FGL aktiviert und dementsprechend Energie abgebaut wurde. Daher wird in diesem Beitrag zusätzlich zur Spannung auch der Martensitgehalt erfasst.

Wie bereits in Abschnitt 1 beschrieben, wird ein *DeepONet* [9] verwendet, um das geschichtsabhängige Werkstoffverhalten modellieren zu können. Bei dieser Architektur (Abb. 2) kommen gleichzeitig zwei Vorwärtsnetze zum Einsatz. Das *Branch-Netz* nutzt die Werte der Dehnungsfunktion $\varepsilon = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]$ als Eingang, während der Eingang des *Trunk-Netzes* den Zeitpunkt $t = \{0, \dots, t_{\text{end}}\}$ angibt, zu dem der Martensitgehalt und die Spannungsantwort der FGL ermittelt werden sollen. Die Hyperparameter der beiden Netze können, wie bei der Parameteridentifikation, mit den gängigen Methoden optimiert werden [2]. Durch ein Skalarprodukt und die Aktivierungsfunktion *ReLU* (Rectified Linear Unit) werden die Ausgaben der beiden Netze, b_k und c_k , kombiniert und ergeben den Martensitgehalt $\hat{\xi} = \{0, \dots, 1\}$ gemäß der Formel

$$\hat{\xi}(\varepsilon)(t) = \text{ReLU} \left(\sum_{k=1}^p b_k c_k + b_0 \right). \quad (5)$$

In dieser Gleichung steht p für die Anzahl der Neuronen in der Ausgangsbesicht der beiden Netze, und $b_0 \in \mathbb{R}$ repräsentiert die Verzerrung. Die Spannungsantwort wird dann gemäß der thermodynamischen Gesetze und des Materialmodells von *Zhu und Zhang* [15] (vgl. mit Gl. (1)) berechnet:

$$\hat{\sigma} = E(\varepsilon - \varepsilon_l \hat{\xi}). \quad (6)$$

Dabei wird E gemäß Gl. (4) homogenisiert, und ε_l ist, wie bereits in Abschnitt 2.1 erläutert, die maximale Dehnung bei $\xi = 100\%$. Die für das Training des DeepONets notwendigen Daten können aus Experimenten gewonnen werden. Dank der entwickelten Architektur genügen hierfür die Spannungs- und Dehnungsdaten. Eine Messung des Martensitgehalts ist nicht nötig. Das Netz wird allein durch Minimierung der Abweichung zwischen den berechneten Werten $\hat{\sigma}$ und den tatsächlichen Spannungen σ trainiert.

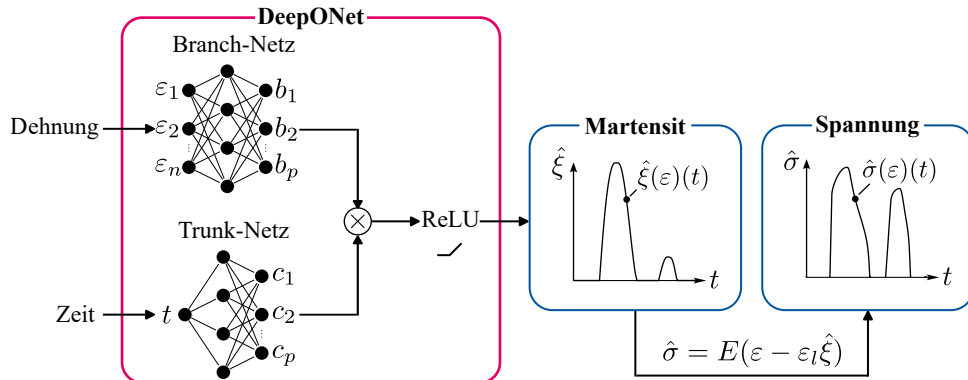


Abbildung 2: Modellierung des Martensitgehalts und der Spannung über die Zeit mit einem DeepONet bestehend aus zwei Vorwärtsnetzen.

Um die erforderlichen Trainingsdaten zu generieren, werden, ähnlich wie bei der Parameteridentifikation, repräsentative Dehnungsfunktionen benötigt. DeepONets haben die Fähigkeit, nicht nur aus harmonischen Funktionen, sondern auch aus komplexeren Zeitreihen (z.B. Fourier-Reihen) zu lernen, was zu besseren Generalisierungseigenschaften führen kann. Komplexe Dehnungsverläufe erfordern jedoch spezielle Versuchsaufbauten. In solchen Fällen bieten sich alternativ harmonische Funktionen an, die in Kombination mit adaptiven Stichprobenverfahren, wie im vorherigen Abschnitt erwähnt, den experimentellen Aufwand reduzieren können [10]. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, Daten *synthetisch* mithilfe eines vorhandenen Materialmodells zu generieren. Hierfür müssen jedoch die Parameter des Materialmodells zuvor identifiziert werden, wie im nächsten Abschnitt anhand eines Beispiels gezeigt wird.

3 Anwendungsbeispiel

Wir demonstrieren die Effektivität unserer Identifikations- und Modellierungsmethode am Beispiel eines dreistöckigen Rahmentragwerks, das mit FGL-Dämpfern nachgerüstet wurde. Die Massen und Steifigkeiten der Stockwerke betragen jeweils 1000 t und $1,75 \cdot 10^2$ MN/m. Als Dämpfung nutzen wir Rayleigh-Dämpfung mit $T_i = \{1,07; 0,38\}$ s und $D_i = \{1; 2\}$ %. Die Dämpfer setzen sich aus Drahtbündeln zusammen, die auf Zug belastet sind und aus Nickel-Titan-Litzen (Ni-55,9%-Ti-43,95%) mit einem Durchmesser von 0,2 mm bestehen. Die allgemeinen FGL-Parameter wurden vom Hersteller bereitgestellt. Die thermodynamischen Parameter $\{C, \gamma, L, A_s\}$ wurden entsprechend Abschnitt 2.1 und [7] mittels eines Vorwärtsnetzes ermittelt.

Abb. 3 zeigt das Bauwerk und dessen Schwingungsantwort auf ein Erdbeben. Die Abmessungen des FGL-Bündels, mit einer Länge von $l = 78$ cm und einem Durchmesser von $D = 30$ mm, wurden nach Simulationen mit unserer Modellierungsmethode optimiert. Bei einer *Rastersuche* wurden für das Branch-Netz 100-Neuronen als Eingang festgelegt. Sowohl für das Branch- als auch das Trunk-Netz wurden 7-Schichten definiert, jede mit 100-

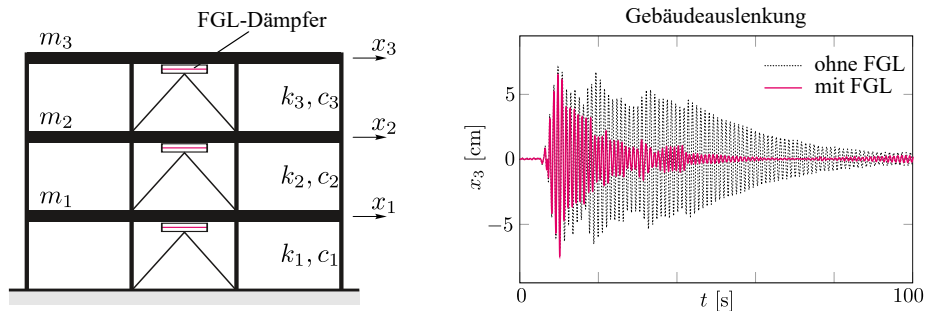


Abbildung 3: Das untersuchte Rahmentragwerk mit Dämpfern aus FGL-Bündeln. Durch die Optimierung der Bündelgeometrie konnte die Gebäudeauslenkung stark reduziert werden.

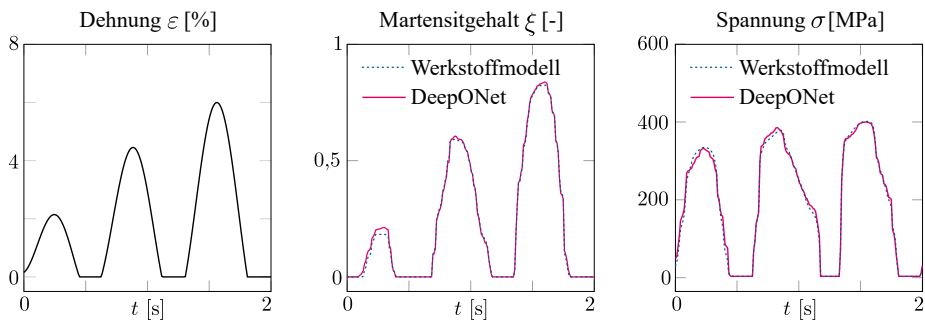


Abbildung 4: Beispiel für die Validierungsstudien. Sowohl das DeepONet als auch das Werkstoffmodell zeigten vergleichbare Genauigkeit.

Neuronen, und abschließend 100-Neuronen als Ausgang. Als Aktivierungsfunktion kam die *ReLU* zum Einsatz. Die Initialisierung der Netze erfolgte mit dem *He-Initializer*, und die Optimierung mit *Adam* [2]. Die Lernrate lag bei $\eta = 0,1 \cdot 10^{-3}$. Für die Generierung der Trainingsdaten kam das Materialmodell von *Zhu und Zhang* unter Verwendung der identifizierten Parameter zum Einsatz. Hierbei wurden die Dehnungsverläufe mittels *Fourier-Reihen* generiert, die den Frequenz- und Amplitudenbereich des Bauwerks widerspiegeln. Zur Validierung wurden die *DeepONet*-Ergebnisse mit den Modellergebnissen verglichen, Abb. 4.

4 Fazit

In diesem Beitrag präsentierten wir eine auf DeepONet-basierende Methode zur Bestimmung der Spannungsantworten von superelastischen FGL. Die gewählte Netzarchitektur ermöglicht die Modellierung von geschichtsabhängigem Werkstoffverhalten und erfasst interne Prozesse, wie die Martensitbildung. Weiterhin wurde die Methode mit einer Parameteridentifikationsmethode verbunden, um Trainingsdaten für das DeepONet mithilfe konventioneller Materialmodelle zu generieren. Als Anwendungsbeispiel diente ein Rahmentragwerk, bei dem das Design der FGL-Dämpfer mithilfe der Modellierungsmethode optimiert wurde.

Literatur

- [1] CISSE, C. ; ZAKI, W. ; BEN ZINEB, T. : A review of constitutive models and modeling techniques for shape memory alloys. In: *Int. J. Plast.* 76 (2016), S. 244–84
- [2] GOODFELLOW, I. ; BENGIO, Y. ; COURVILLE, A. : *Deep Learning*. MIT Press, 2016
- [3] HART, G. L. W. ; MUELLER, T. ; TOHER, C. ; CURTAROLO, S. : Machine learning for alloys. In: *Nat. Rev. Mater.* 6 (2021), Nr. 8, S. 730–55
- [4] HMEDE, R. ; CHAPELLE, F. ; LAPUSTA, Y. : Review of neural network modeling of shape memory alloys. In: *Sensors* 22 (2022), Nr. 15, S. 5610
- [5] KAUP, A. ; ALTAY, O. ; KLINKEL, S. : Strain amplitude effects on the seismic performance of dampers utilizing shape memory alloy wires. In: *Eng. Struct.* 244 (2021), S. 112708
- [6] KAUP, A. ; DING, H. ; WANG, J.-T. ; ALTAY, O. : Strain rate dependent formulation of the latent heat evolution of superelastic shape memory alloy wires incorporated in multistory frame structures. In: *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* 32 (2021), Nr. 11, S. 1198–214
- [7] LENZEN, N. ; ALTAY, O. : Machine learning enhanced dynamic response modelling of superelastic shape memory alloy wires. In: *Materials* 15 (2022), Nr. 1, S. 304
- [8] LINKA, K. ; KUHL, E. : A new family of constitutive artificial neural networks towards automated model discovery. In: *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 403 (2023), S. 115731
- [9] LU, L. ; JIN, P. ; PANG, G. ; ZHANG, Z. ; KARNIADAKIS, G. E.: Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. In: *Nat. Mach. Intell.* 3 (2021), Nr. 3, S. 218–29
- [10] MILICEVIC, P. ; ALTAY, O. : Data generation framework for inverse modeling of nonlinear systems in structural dynamics applications. In: *Acta Mech.* (2023). – doi:10.1007/s00707-023-03532-3
- [11] OTSUKA, K. (Hrsg.) ; WAYMAN, C. M. (Hrsg.): *Shape Memory Materials*. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 1998
- [12] TANAKA, K. ; NAGAKI, S. : A thermomechanical description of materials with internal variables in the process of phase transitions. In: *Ingenieur-Archiv* 51 (1982), Nr. 5, S. 287–99
- [13] TANAKA, Y. ; HIMURO, Y. ; KAINUMA, R. ; SUTOU, Y. ; OMORI, T. ; ISHIDA, K. : Ferrous polycrystalline shape-memory alloy showing huge superelasticity. In: *Science* 327 (2010), Nr. 5972, S. 1488–90
- [14] ZAREIE, S. ; ISSA, A. S. ; SEETHALER, R. J. ; ZABIHOLLAH, A. : Recent advances in the applications of shape memory alloys in civil infrastructures: A review. In: *Structures* 27 (2020), S. 1535–50
- [15] ZHU, S. ; ZHANG, Y. : A thermomechanical constitutive model for superelastic SMA wire with strain-rate dependence. In: *Smart Mater. Struct.* 16 (2007), Nr. 5, S. 1696–707