

神經網路預測微尺度複雜裂縫行為

林孟鈞* 關百宸**1

*國立臺灣海洋大學 系統工程暨造船學系

**國立臺灣海洋大學 延平水下科技中心

關鍵詞: 生成對抗網路、複雜微裂縫、代表體積單元

摘要

當結構承受循環加載過程中，材料會因為在微觀尺度下逐漸形成裂縫並累積，而隨著微裂縫的路徑及數量成長，最後雖然會形成集中方向的破壞，但過程中應力應變關係會產生非等向性與非線性行為，進一步導致疲勞破壞的不確定性。而在一般的多尺度分析(Multi-scale analysis)中，大多都有著微觀尺度計算成本過高，或是過度簡化的難題。隨著近年可提高數值方法的計算效率或精確度人工智慧的發展迅速，本研究提出將生成對抗網路(Generative adversarial networks)應用於預測二維微尺度代表體積單元中，複雜裂縫擴展行為之架構。藉由圖像轉換的概念將代表體積單元的裂縫位置作為輸入圖像，並由神經網路運算生成對應的應力場，以完成物理場的快速計算。為了降低神經網路資料庫的複雜程度，本研究使用延伸有限元素法計算帶有不同單位裂縫的代表體積單元在單位應變加載下的應力場，此處單位裂縫參考原裂縫尺寸並使其大小約為原裂縫一單元的長度，與以往裂縫資料庫不同，為了實現複雜裂縫的預測，本研究將目標裂縫由單位裂縫連接組成，並將單位裂縫視為整體多尺度架構中的微尺度的微觀尺度，在求解上各種裂縫都由單位裂縫組成，因此不必針對一般或是特殊裂縫建立對應的資料庫。最後透過神經網路運算快速的特性，可以取代傳統數值方法並有效降低微觀尺度模型所需要計算時間。最後本文利用神經網路與延伸有限元素法進行相同的測試問題，模擬裂縫的擴展並計算等效應力值，以比較及確保神經網路的預測結果的準確性。

前言

結構在長期承受循環荷載後所引發的破壞行為，其主要成因在於微尺度下的微小材料缺陷在外力作用時，由晶格錯位慢慢匯集成微小裂縫，而微小裂縫會接續隨著外力加載，相互連接並快速擴展，使得局部材料由彈性進入塑性狀態，且隨著裂紋擴展，在材料局部呈現出非線性非等向性行為，進而影響到大尺度的結構狀態。

面對裂縫等結構不連續問題時，通常需透過特殊處理才得以進行計算，如1999年Moës等人[1]將傳統有限元素法，在分析裂縫時的非連續單元網格內使用強化方程(enrichment functions)，來加強非連續的物理場，使得結果能夠更加準確地描述材料交界面和破壞力學等不連續問題，此法又稱為延伸有限元素法(extended finite element method XFEM)，Gorashi等人[2]於2012年更將二種方法結合並提出了擴展等參幾何法，用以模擬二維裂縫傳遞問題。然而若要在單一尺度上模擬微裂縫對整體結構的影響，進行計算時會需要使用密度極高的網格及點數，耗費大量的計算成本，而當前面對此類問題最有效的解決做法為使用多尺度分析架構。

多尺度分析(multiscale analysis)藉由聯結不同尺度之間的物理行為，其中階層式分析(hierarchical method)中，資訊將從微觀尺度傳遞到大尺度，並在過程中利用均質化(homogenization)傳遞資訊，通常會假定一個宏觀尺度的材料模型，並透過對微觀結構的分析來計算模型的行為。

目前已經有許多研究將階層式多尺度分析方法應用於材料科學與工程材料等領域，如Liu等人[3]利用階層式分析法模擬週期性複合材料的機械行為然而在Fish等人[4]的文章中提到多尺度分析目前所面臨的主要挑戰，有鑑於多尺度分析中同時存在多個尺度的時間與空間，因此導致其計算成本仍然高昂，所以尚難以被應用於工程領域中。

機器學習(machine learning)屬於人工智慧領域中的一個分支，而神經網路(neural networks)則為用以實現機器學習的一種模型。隨著電腦運算能力提升，神經網路漸漸不受限制因此有了不少突破性發展與應用。與傳統數值方法相比，神經網路的優勢在於其是透過資料驅動(data driven)處理與學習資料數據間的關係，而不仰賴人工的物理假設及數學推導，避免理想假設或是數值方法本身可能擁有的誤差。此外，與大多數方法相比，神經網路擁有更高的計算效率。上述原因引起了學者嘗試將計算力學與機器學習結合，主要是為了提升現有計算方法的準確度，或是減少計算時間。例如在材料與結構工程領域中，Xiao等人[5]首先在微尺度模型中進行分子動力學模擬，生成資料，然後利用資料訓練材料失效模型和應力迴歸模型。最後，將訓練模型應用於連續體模型，以研究材料在宏觀尺度上的機械行為。Jiang等人[6]於利用條件生成對抗網路(conditional generative adversarial nets, cGAN)進行應力預測，並發現生成對抗網路具有更高的準確度以及泛化性。目前也有研究將神經網路與多尺度分析結合。張[7]提出結合人工智慧演算法的多尺度分析方法，首先使用等參幾何法在大尺度模型中

¹關百宸 (Paichen@ntou.edu.tw)

立船板結構，接著透過近場動力學(peridynamics, PD)在微尺度模型建立代表體積單元資料庫，資料庫中包含代表體積單元在不同裂縫角度以及不同受力狀況下的應力應變關係，最後藉由神經網路連結兩種尺度模型之間的力學關係。

為了解決多尺度分析計算成本過高的問題，本研究利用機器學習方法取代傳統數值方法進行微尺度計算，透過生成對抗網路預測代表體積單元在微裂縫及不同受力情況影響下的應力分布。且為了模擬裂縫的擴展行為，本文採用斷裂力學(fracture mechanics)的最大環向應力準則(maximum hoop stress criteria)[8]，以裂縫前端的主軸應力來判斷裂縫是否向前擴展以及擴展方向。在資料庫的建立上，本文使用商用軟體Abaqus中的延伸有限元素法先計算代表體積單元在不同裂縫影響下的應力場，並對其結果進行資料處理後做為資料庫，用以訓練生成對抗網路，本研究的工作流程圖如圖1所示。本文首先介紹代表體積單元的基本性質，並說明如何決定單元的尺寸大小、初始裂縫長度，以及資料庫建立的方式。第2節將介紹神經網路與生成對抗網路的基本架構與理論，第3節說明本文如何運用生成對抗網路來預測應力，應介紹神經網路模型的參數與資料處理方式，最後分別使用本文提出的方法與延伸有限元素法進行測試，並比較二者的結果來確認本文方法的準確性。

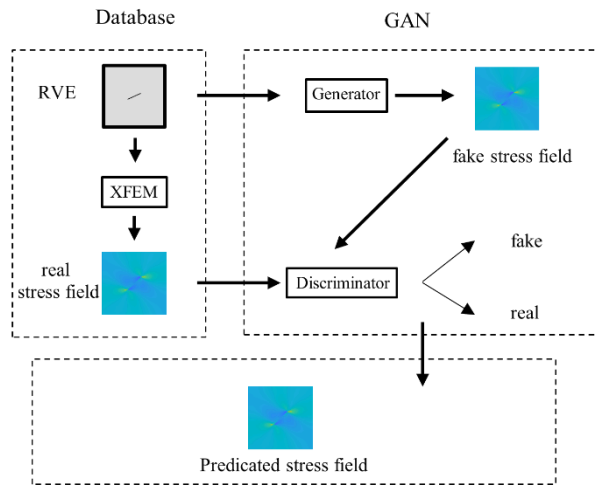


圖1 本研究的工作流程圖

1. 代表體積單元

代表體積單元是透過微尺度單元的建構，將宏觀模型中積分點的應變量做為邊界條件，施加在代表體積單元上並求解對應的應力場，其大小必須表現出材料在微觀尺度下，因為裂縫或是複合材料的內部顆粒所產生的行為。接著計算等效應力值後帶回宏觀尺度模型。本節將先說明如何利用均質化方法來計算代表體積單元的等效物理量，接著說明本研究如何選擇代表體積單元的尺寸以及如何建立資料庫。

1.1 均質化

為了簡化異質性材料產生的非均勻應力及應變場，利用應變能等效原理[9]和高斯定理，可計算出平均化的應力、應變量，並求得楊氏模量做為宏觀模型的材料模型，其式如下：

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij}(x, y, z) dV$$

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}(x, y, z) dV$$

$$\bar{E}_1 = \frac{\bar{\sigma}_{11}}{\bar{\varepsilon}_{11}}, \quad \bar{E}_2 = \frac{\bar{\sigma}_{22}}{\bar{\varepsilon}_{22}}$$

1.2 資料庫

為了呈現代表體積單元中微裂縫造成的非線性非等向性影響，本研究利用商用軟體Abaqus中的延伸有限元素法來求解帶有不同裂縫的微尺度單元，而在建立代表體積單元資料庫前，首先需定義代表體積單元的大小，其尺寸需要與欲模擬的材料特徵有關[10]。在本研究中，代表體積單元的尺寸則考量材料即將發生局部破壞時的裂縫大小。根據Suh等人[11]進行金屬材料疲勞試驗的結果表明，微裂縫形成的平均長度介於0.2 mm到0.3 mm之間，且不超過0.5 mm，而Luo等人的研究[12]中則依據微裂縫的尺寸大小，建議將代表體積單元設定為長寬皆為1 mm的方形板。本研究結合上述文獻成果及需求，生成兩種帶有不同微裂縫的二維代表體積單元，分別為長寬皆為0.5 mm及1 mm的單元，後續文章會分別以單位裂縫以及長裂縫進行描述，裂縫長度則分別介於0.01 mm到0.05 mm及介於0.2 mm到0.5 mm，裂縫位置在單元上隨機分布，如圖3所示，材料參數如楊氏模量為72 GPa、柏松比為0.25以及最大主軸應力為270 MPa，並透過延伸有限元素法求解單元在單軸拉伸下的應力場，如圖2所示，其網格數量皆為255×255，最後輸出節點的應力值做為應力資料，並利用這些資料建立用於神經網路訓練的資料庫。本研究共利用商用軟體Abaqus生成了1400筆數據，1400筆資料中1300筆用於訓練神經網路，1300筆資料中單位裂縫900筆、長裂縫400筆，其餘100筆中單位裂縫80筆、長裂縫20筆用於測試神經網路的準確度。

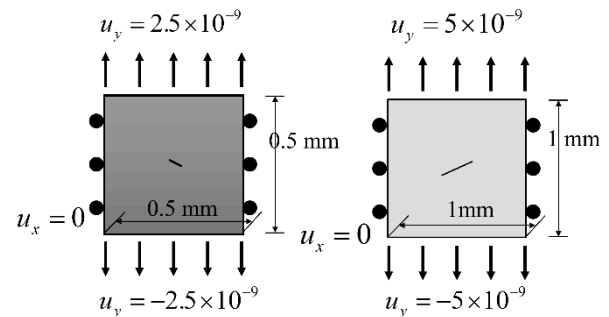


圖2 代表體積單元尺寸與邊界條件
單位裂縫(左)、長裂縫(右)

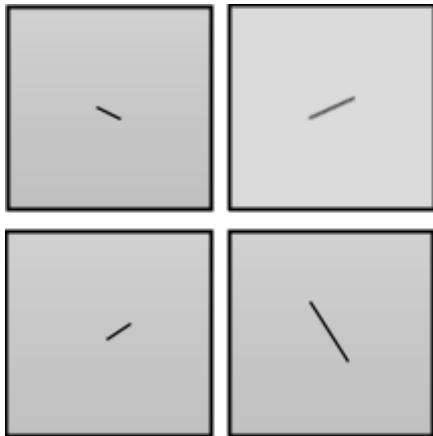


圖3 代表體積單元資料庫示意圖
單位裂縫(左)、長裂縫(右)

2. 神經網路基本理論

神經網路是機器學習中發展最為成熟且應用廣泛的一種方法，常被使用於迴歸(regression)、分類(classification)等問題，而其本質都是透過神經網路建構映射函數(mapping function)，用以將輸入轉換為輸出。

2.1 神經網路

在神經網路中，最基本的組成單元為神經元(neuron)。每個神經元都帶有一組特定的權重(weight)、偏置值(bias)及啟動函數(activation function)，其數學表達式與示意圖分別如下：

$$y = \varphi(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$$

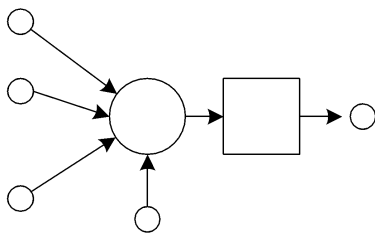


圖4 神經元架構示意圖

其中 \mathbf{x} 為輸入向量， \mathbf{w} 為權重向量， b 為偏置值， φ 為啟動函數， y 為輸出值。神經網路藉由將多個神經元層層堆疊所組成，其架構可被分為輸入層(input layer)、隱藏層(hidden layer)與輸出層(output layer)，層與層之間透過權重矩陣、偏置向量以及啟動函數連接，形成複雜的數學模型，其數學表達式與示意圖分別如下：

$$\mathbf{y}^M = \varphi^M \left(\mathbf{W}^M \varphi^{M-1} \left(\mathbf{W}^{M-1} \dots \left(\varphi^1 \left(\mathbf{W}^1 \mathbf{x} + \mathbf{b}^1 \right) \right) \dots + \mathbf{b}^{M-1} \right) + \mathbf{b}^M \right)$$

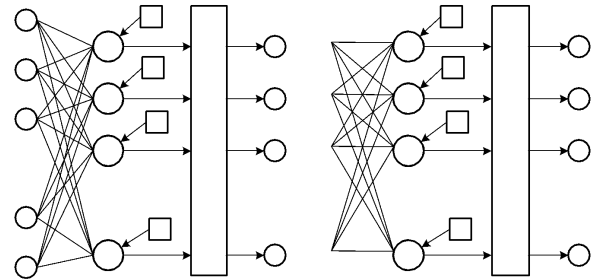


圖5 神經網路架構示意圖

其中 \mathbf{x} 為輸入向量， \mathbf{W} 為權重矩陣， \mathbf{b} 為偏置向量， φ 為啟動函數， \mathbf{y} 為輸出向量， M 代表總層數。層與層之間的前向傳遞(forward propagation)可由式改寫並表示如下：

$$v_j = \sum_{i=1}^r w_{ij} y_i + b_j$$

$$y_j = \varphi_j(v_j)$$

其中 i 代表第 $m-1$ 層的第 i 神經元， r 代表第 $m-1$ 層中的神經元數量， j 則代表第 m 層的第 j 神經元。神經網路的任務在於透過不同的權重、偏置以及啟動函數組合來近似輸入向量與輸出向量之間的映射函數，其中啟動函數的功用在於引入非線性，使得神經網路可以處理感知器(perceptron)所無法處理的非線性問題，常見如sigmoid函數、ReLU函數等。而所謂的深度神經網路(deep neural networks, DNN)便是指具有多層隱藏層的神經網路，且根據通用近似定理(universal approximation theorem)[13][14]可以證明只要具備足夠的神經元數量，理論上神經網路能夠逼近任意函數。

Rumelhart等人[15]於1986年提出了反向傳播法(backpropagation)，讓梯度下降法(gradient decent method)得以使用在多層神經網路。反向傳播法的概念在於將輸出層的誤差反向傳遞至隱藏層中，並以此做為權重與偏置的更新依據，其數學式如下：

$$w_{ij}(n+1) = w_{ij}(n) + \Delta w_{ij}(n)$$

$$b_j(n+1) = b_j(n) + \Delta b_j(n)$$

$$\Delta w_{ij}(n) = -\eta \cdot \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)}, \quad \Delta b_j(n) = -\eta \frac{\partial E(n)}{\partial b_j(n)}$$

其中 n 表示神經網路訓練的迭代次數, Δw 與 Δb 分別代表權重與偏置的修正量, η 為學習率(learning rate), 用來控制參數更新的幅度大小, E 為損失函數(loss function)或稱為代價函數(cost function), 用於計算神經網路輸出值的誤差, 常見的損失函數如平均絕對誤差(mean absolute error, MAE)與均方誤差(mean square error, MSE)等。本節以MSE來接續說明反向傳播法的流程, 其式如下:

$$E(n) = \sum_{j=1}^r \frac{1}{2} e_j^2(n), \quad e_j(n) = d_j(n) - y_j(n)$$

其中 d 為已知的正確值, 接著即可透過連鎖律(chain rule)求得損失函數對各神經元的權重與偏置的梯度, 其式如下:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)} &= \frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ij}(n)} \\ &= -\delta_j(n) y_i(n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(n)}{\partial b_j(n)} &= \frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial b_j(n)} \\ &= -\delta_j(n) \end{aligned}$$

其中 δ 為局部梯度項(local gradient), 對於輸出層的神經元其定義如下:

$$\delta_j(n) = e_j(n) \phi_j'(v_j(n))$$

對於隱藏層中的神經元, 則局部梯度項定義如下:

$$\delta_j(n) = \phi_j'(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{jk}(n)$$

其中 k 代表輸出層中的第 k 個神經元。

2.2 生成對抗網路

生成對抗網路由二個子神經網路所構成, 分別為生成器(generator)與鑑別器(discriminator), 二個神經網路透過相互競爭的方式進行學習。生成對抗網路常被應用於圖像生成、轉換等任務, 其假設數據或圖像的樣本是某一空間分布中的一點, 生成器的功能為將隨機噪聲 z 轉換為假樣本 x , 其目標是盡可能使假樣本的空間分布與真實樣本相似。鑑別器則嘗試辨別出假樣本的空間分布, 與真實樣本的分布之間的差異。以圖6為例, 黑點線表示真實樣本的分布, 綠實線為生成器所生成之假樣本的分布, 藍虛線表示鑑別器判別某一分布區間為真實樣本的可能性。隨著訓練過程演進, 生成器所生成之假樣本空間會逐漸與真實樣本重疊

, 直到完全重合時, 藍虛線變為水平線表示鑑別器無法再辨別樣本真偽。

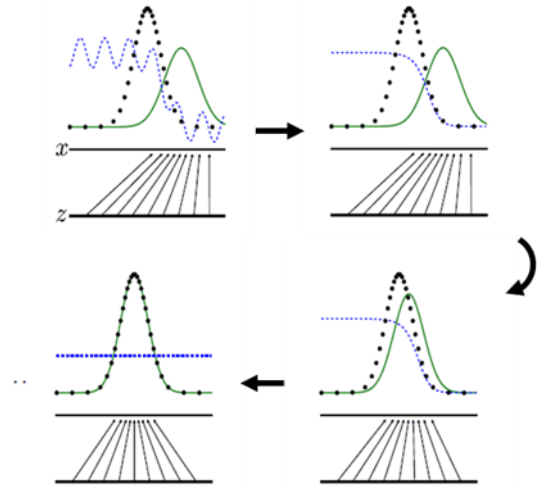


圖6 生成器與真實樣本之空間分布示意圖[16]

在Goodfellow等人[16]的文章中, 定義了生成對抗網路的目標函數, 其功能與損失函數相同, 皆用於提供神經網路更新參數所需的資訊, 目標函數定義如下:

$$V(G, D) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left[\log D(x^{(i)}) + \log(1 - D(G(z^{(i)}))) \right]$$

其中 z 為隨機噪聲, x 為真實樣本, m 為資料總數, $G(\cdot)$ 代表生成器的輸出, 即假樣本, $D(\cdot)$ 表示鑑別器的輸出, 輸出值越接近1代表鑑別器判定當前輸入的樣本為真實。生成對抗網路的訓練過程必須輪流對生成器與鑑別器進行參數調整, 例如當訓練鑑別器時, 生成器的參數應保持不變。與一般神經網路不同, 鑑別器訓練時的目標是將目標函數最大化而非最小化, 且由式(3)可知, 當鑑別器接收到真實樣本時輸出為1, 反之則輸出為0時, 能夠將該函數最大化。而對於生成器而言, 當生成器所生成的假樣本傳遞給鑑別器後, 使鑑別器輸出為1時會使該函數達到最小值, 因此生成器訓練的目標是將目標函數最小化。

3. 神經網路用於微裂縫預測

2017年Isola等人[17]提出了Pix2Pix模型, 將生成對抗網路用於圖像轉換, 其主要運用了神經網路本身的映射能力, 神經網路透過學習輸入圖像與輸出圖像之間的關係並進行轉換, 而圖像是一種矩陣形式的數據資料, 因此神經網路實際上是針對矩陣的轉換。本研究利用生成對抗網路來預測代表體積單元在受單位力單軸拉伸下的應力場, 藉由圖像轉換的概念將裂縫位置轉換為應力場, 其資料格式皆為矩陣, 並且藉由

線性疊加的方式，來組合成不同雙軸拉伸荷載下的應力場。但神經網路預測裂縫往往受制於其行為過度複雜，如果想提升精度則需構建龐大的資料庫，將耗費大量時間，因此本研究提出一種新的建立資料庫方式，生成微裂縫時改以長度為一單位的隨機裂縫，預測時使用資料庫內隨機裂縫組成輸入裂縫，因此可針對不同初始裂縫的形狀進行模擬，而為了模擬裂縫擴展，本研究採用了斷裂力學中常用的最大環向應力準則(maximum hoop stress criteria)與神經網路結合進行分析。在外力加載時，會先由神經網路預測出其對應的應力場，接著判斷裂縫尖端前方主軸應力是否大於降伏值，由裂縫擴展準則決定裂縫是否向前成長，更新裂縫位置後再交由神經網路預測新的應力場，迭代至裂縫尖端前方主軸應力小於降伏值為止，計算流程如圖7所示。本節將先說明生成對抗網路的模型架構與參數，接著說明資料處理方式，最後則是說明裂縫擴展準則。

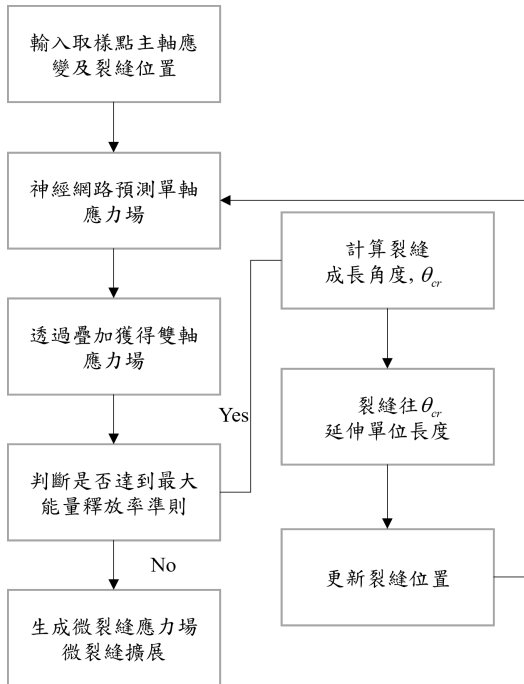


圖7 本研究方法流程圖

3.1 神經網路模型

本研究共建立3組生成對抗網路，分別用於預測代表體積單元在受單位力的單軸拉伸下x方向與y方向的應力場以及剪應力場，3組網路皆採用相同的超參數，其架構如表1與表2所示。除了生成器的輸出層使用線性函數做為啟動函數以外，其餘層皆使用ReLU函數，優化器使用Adam[18]，神經網路的建置是使用Python 3.7與TensorFlow 2.5，硬體配置為Intel(R) Core(TM) i7-12700處理器、32GB記憶體以及NVIDIA GeForce RTX 3060 Ti顯示卡。

表1 生成器網路架構

#	Layer type	Output shape
1	Input layer	(256, 256, 1)
2	Conv2D	(128, 128, 128)
3	Conv2D	(64, 64, 256)
4	Conv2D	(32, 32, 256)
5	Conv2D	(16, 16, 512)
6	Conv2D	(8, 8, 512)
7	Conv2D	(4, 4, 512)
8	Conv2D	(2, 2, 512)
9	Conv2D	(1, 1, 512)
10	Conv2D transpose	(2, 2, 512)
11	Conv2D transpose	(4, 4, 512)
12	Conv2D transpose	(8, 8, 512)
13	Conv2D transpose	(16, 16, 512)
14	Conv2D transpose	(32, 32, 256)
15	Conv2D transpose	(64, 64, 256)
16	Conv2D transpose	(128, 128, 128)
17	Conv2D transpose*	(256, 256, 1)

*使用Linear函數做為啟動函數

表2 鑑別器網路架構

#	Layer type	Output shape
1	Concatenate layer	(256, 256, 2)
2	Conv2D	(128, 128, 64)
3	Conv2D	(64, 64, 128)
4	Conv2D	(32, 32, 256)
5	ZeroPadding2D	(34, 34, 256)
6	Conv2D	(31, 31, 256)
7	ZeroPadding2D	(33, 33, 256)
8	Conv2D	(30, 30, 1)

3.2 資料前處理

神經網路在訓練優化的過程，部分輸出值較高的神經元透過式與式會獲得較大的梯度值，使神經網路對於這些神經元較為敏感，相對的部分神經元則會因為其梯度相對較小而被忽略。且資料的量級差異過大時，則會導致此情況更為嚴重，因此影響神經網路的準確度。為避免此情況發生，通常會將資料進行正規化處理(normalization)，常見方法如最小值最大值正規化(min-max normalization)，用以將資料範圍縮放到[0,1]區間，其式如所示，圖8為應力數據經過正規化處理前後的比較。

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}$$

205562	205558	205548	0.497935	0.49785	0.497637
205559	205555	205545	0.497871	0.497786	0.497573
205549	205546	205535	0.497658	0.497595	0.497361
205534	205530	205519	0.497339	0.497254	0.49702
205511	205508	205497	0.49685	0.496786	0.496552
205483	205479	205469	0.496254	0.496169	0.495956
205447	205444	205434	0.495488	0.495424	0.495211

圖8 原始應力數據(左) 與正規化後數據(右)

σ_{11}	1.02
σ_{22}	1.33
σ_{12}	72.18

3.3 裂縫擴展準則

本研究利用神經網路來預測任意裂縫條件下的應力場，而裂縫擴展行為則利用現有的斷裂力學方法進行模擬。為了模擬裂縫擴展，首先必須定義裂縫擴展的準則。在Nawres等人的研究[19]中表明在預測彈性材料的裂縫擴展時，最大環向應力準則能夠在保有準確度的前提下，同時擁有比基於能量的準則更高的計算效率，因此本研究採用最大環向應力準則來預測裂縫的擴展方向。環向應力是指在以裂縫尖端為原點的極座標下，其所描述的應力場中的切向應力，如圖9所示。最大環向應力即是指主軸應力，用以判斷裂縫是否向前成長，當主軸應力值大於臨界值(如降伏應力)時，則裂縫會往垂直於最大環向應力的方向成長。

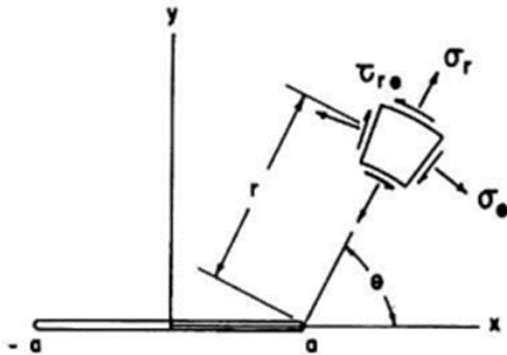


圖9 極座標下裂縫尖端周圍的應力分量示意圖[8]

4. 微裂縫行為預測結果

本節將分別使用本研究所建置的神經網路與延伸有限元素法，計算裂縫擴展前與裂縫擴展後的應力場，並將二者的結果進行比較，以確認本研究方法的準確性。

4.1 裂縫擴展前應力預測

本節利用資料庫中的100筆測試資料來驗證神經網路所預測的應力場是否準確，其分析問題為求解帶不同裂縫的代表體積單元受垂直拉伸荷載下的應力場，接著利用式得到平均應力值並計算誤差，結果如表3所示。

表3 神經網路所預測知平均應力誤差

平均應力	誤差 (%)
------	--------

由結果中可以發現，除了平均剪應力有較大的誤差，其餘應力的誤差大約落在1%左右，可見神經網路在預測應力的準確度是足夠的。接著我們取其中一筆測試資料，神經網路與延伸有限元素法所預測的應力分布則分別如圖10、圖11與圖12所示，圖13則為沿裂縫尖端的垂直路徑上的應力分布曲線。從圖中可以發現神經網路所預測的應力分布趨勢與延伸有限元素法的計算結果相當接近，其中發現剪應力受到應力集中的影響相較x方向與y方向的應力來得大，導致剪應力的峰值與平均值有較大的差距，並造成神經網路在預測剪應力平均值時產生較大誤差的情況發生。然而剪應力的大小相較於x方向與y方向要來得小許多，因此其對於主軸應力的影響並不大。

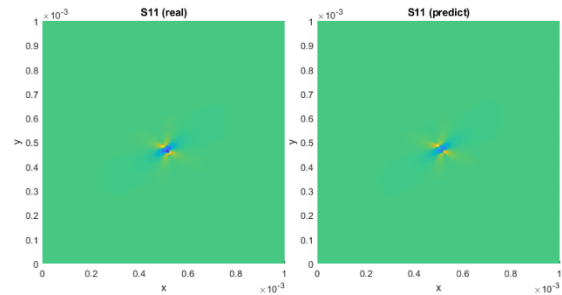


圖10 神經網路(左)與XFEM(右)的x方向應力分布

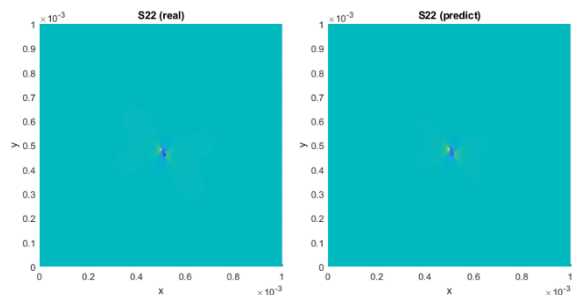


圖11 神經網路(左)與XFEM(右)的y方向應力分布

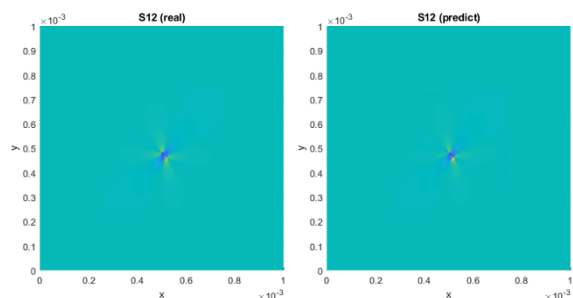


圖12 神經網路(左)與XFEM(右)的剪應力分布

參考文獻

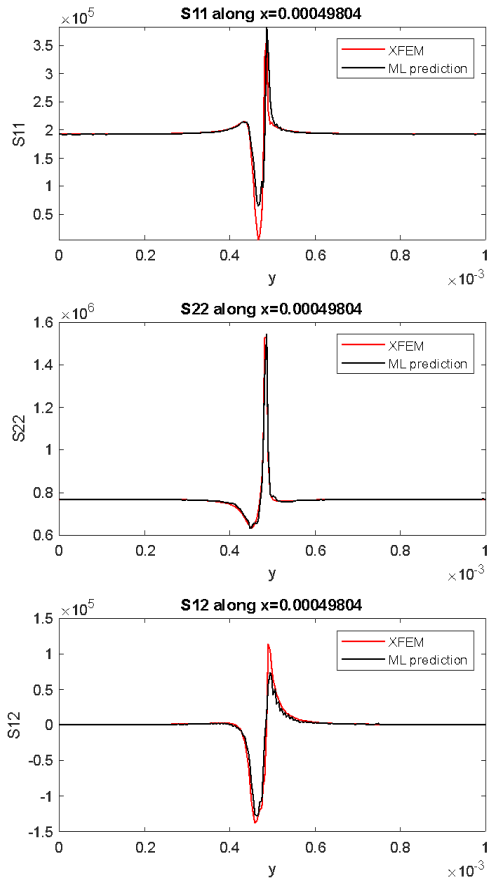


圖13 沿虛線路徑的應力分布曲線

5. 結論

本研究提出利用生成對抗網路來取代傳統數值方法，求解代表體積單元在微裂縫的影響下的應力場，最後求得因微裂縫所造成的非等向性行為。本研究的主要目標在於減少微尺度模型的分析時間，以降低多尺度分析整體所需要耗費的計算成本。在本研究的測試中發現在資料庫充足的前提下，神經網路所預測的應力場與延伸有限元素法的計算結果相當接近，且平均誤差大約落在1%左右，雖然應力集中的現象導致剪應力的平均誤差約落在72%，但由於其值較小，對於主軸應力的影響並不大。而單位裂縫及長裂縫混合的資料庫經過上述測試後，可以發現儘管長裂縫的資料相當少，但透過單位裂縫依舊能維持一定的精準度，透過此透性往後在進行微裂縫預測時可以進一步模擬複雜裂縫。綜上所述神經網路能夠在預測結果與延伸有限元素法相近的前提下，大幅減少原本所需要的計算時間。

1. Moës, N., Dolbow, J., Belytschko, T., "A finite element method for crack growth without remeshing." *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 46, 131-150 (1999).
2. Ghorashi, S.S., Valizadeh, N. and Mohammadi, S., "Extended isogeometric analysis for simulation of stationary and propagating cracks." *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 89, 1069-1101 (2012).
3. Liu, Hui, et al. "A hierarchical multilevel finite element method for mechanical analyses of periodical composite structures." *Composite Structures*, 131, 115-127(2015)
4. Fish, J., Wagner, G.J., Keten, S., "Mesoscopic and multiscale modelling in materials." *Nat. Mater.*, 20, 774-786 (2021).
5. Xiao, Shaoping, et al. "A machine-learning-enhanced hierarchical multiscale method for bridging from molecular dynamics to continua." *Neural Computing and Applications* 32, 14359-14373 (2020)
6. Jiang, H., Nie, Z., Yeo, R., Farimani, A.B., Kara, L.B., "StressGAN: A Generative Deep Learning Model for Two-Dimensional Stress Distribution Prediction." *J. Appl. Mech.*, 88 (2021)
7. 張凱程, "Artificial Intelligence Aided Multi-scale Isoge-ometric Method for Fracture Strength Analysis of ship structures." 國立臺灣海洋大學碩士論文 (2021)
8. Erdogan, F., Sih, G.C., "On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear." *Journal of basic engineering*, 85, 519-527 (1963).
9. Sun, C.T., Vaidya, R.S., "Prediction of composite properties from a representative volume element." *Composites Science and Technology*, 56, 171-179 (1996).
10. Xia, W., Yakubu, K.G., Erkan, O., Selda, O., "Representative volume element homogenization of a composite material by using bond-based peridynamics." *Journal of Composites and Biodegradable Polymers*, 7, 51-56 (2019)
11. Suh, C.M., Yuuki, R., Kitagawa, H., "FATIGUE MICROCRACKS IN A LOW CARBON STEEL." *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 8, 193-203 (1985).
12. Luo, C., Chattopadhyay, A., "Prediction of fatigue crack initial stage based on a multiscale damage criterion." *Int. J. Fatigue.*, 33, 403-413 (2011).
13. Hornik, K., Stinchcombe, M., White, H., "Multilayer feedforward networks are universal approximators." *Neural Networks*, 2, 359-366 (1989).
14. Cybenko, G., "Approximation by superpositions of a sigmoidal function." *Math. Control Signal Systems*, 2, 303-314 (1989).
15. Rumelhart, D., Hinton, G., Williams, R., "Learning representations by back-propagating errors." *Nature*, 323, 533-536 (1986).
16. Goodfellow, I.J., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., Warde-Farley, D., Ozair, S., Courville, A., Bengio, Y., "Generative Adversarial Nets." arXiv:1406.2661 (2014).
17. Isola, P., Zhu, J.Y., Zhou, T., Efros, A.A., "Image-to-image translation with conditional adversarial networks." arXiv:1611.07004 (2016)
18. Kingma, D.P., Ba, J., "Adam: A method for stochastic optimization." arXiv:1412.6980 (2014).

19. Al-Ramahi, N., Joffe, R., Varna, J., “Criteria for crack path deviation in adhesive layer of bi-material DCB specimen.” *Composites Part A, Applied science and manufacturing*, 147 (2021).

Application of Deep Neural network prediction of complex microscale crack behavior

Meng-Hung Lin, Pai-Chen Guan¹

Department of Systems Engineering and Naval Architecture, National Taiwan Ocean University

Keywords: Representative volume element, Generative Adversarial Network, complex microcracks

ABSTRACT

During the cyclic loading process, materials gradually form cracks at the microscale and accumulate as the path and quantity of microcracks grow. Although concentrated directional damage eventually occurs, the stress-strain relationship during the process leads to anisotropic and nonlinear behavior, further resulting in uncertainty in fatigue failure. In conventional multiscale analysis, there are often challenges with either the high computational cost of microscale calculations or oversimplified approaches.

With the rapid development of artificial intelligence, which enhances the computational efficiency or accuracy of numerical methods in recent years, this study proposes the application of Generative Adversarial Networks (GANs) to predict the complex crack propagation behavior within two-dimensional microscale representative volume elements. By utilizing the concept of image transformation, the crack positions within the representative volume elements are treated as input images, and the corresponding stress fields are generated computationally by neural networks to achieve rapid computation of physical fields.

To reduce the complexity of the neural network database, this study employs the Extended Finite Element Method to compute stress fields of representative volume elements with different unit cracks under unit strain loading. Here, unit cracks reference the original crack size and are approximately the length of one element. Unlike conventional crack databases, which focus on individual cracks, this study predicts complex cracks by composing target cracks from interconnected unit cracks, considering unit cracks as microscale entities within a multiscale framework. Thus, various cracks are composed of unit cracks in the solution, eliminating the need to establish databases for general or specific cracks.

Finally, leveraging the rapid computation capabilities of neural networks, this approach can replace traditional numerical methods and effectively reduce the computational time required for microscale models. The study concludes by conducting the same test problems using both neural networks and the Extended Finite Element Method, simulating crack propagation and calculating equivalent stress values to compare and ensure the accuracy of the neural network's predictive results.