

Robert Eggersmann

Constitutive-model-free data-driven
computational mechanics

Constitutive-model-free data-driven computational mechanics

Von der Fakultät für Bauingenieurwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Robert Eggersmann, M. Sc.

Berichter*innen: Universitätsprofessorin Dr.-Ing. Stefanie Reese
Frank and Ora-Lee Marble Professor Emeritus Michael Ortiz

Tag der mündlichen Prüfung: 2. Dezember 2021

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Universitätsbibliothek online verfügbar.

Applied Mechanics – RWTH Aachen University
Editor: Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese

Volume 10

Robert Eggersmann

**Constitutive-model-free data-driven
computational mechanics**

Shaker Verlag
Düren 2022

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2021)

Copyright Shaker Verlag 2022

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8455-9

ISSN 2363-488X

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Phone: 0049/2421/99011-0 • Telefax: 0049/2421/99011-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Dedicated to my family.

Acknowledgements

The following dissertation results from my time as a research assistant at the Institute of Applied Mechanics (IFAM) at the RWTH Aachen University. Here, I would like to thank everyone who supported me on my way to the completion of this thesis. First of all, I want to express my gratitude to my doctoral advisor, Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese. She finally convinced me to stay for three more years at the university when she offered me to work on this thesis' topic. At the institute, she always left me free to develop and implement new and own ideas. I want to thank her, especially, for teaching me how to present difficult issues in a clear and structured way. I would also like to thank her for the possibility to present my work at several international conferences. Through her efforts to present these results by herself to a larger audience at different conferences, I felt my work was consistently valued. Furthermore, my special thanks to Prof. Michael Ortiz, who laid the theoretical foundation for my thesis on data-driven computational mechanics. Thank you for offering to be my second thesis advisor. I appreciated learning how to promote a new idea and making people rethink old ways of doing things. Furthermore, I would like to express my great gratitude for hosting me at the California Institute of Technology. It was a pleasure for my family and me to visit California. I want to thank Prof. Laurent Stainier for giving valuable advice to all my publications and setting up the joint France-German project, which will continue my work. I also want to thank Trenton Kirchdoerfer, who greatly supported me during my first publication. For sure, I have to thank the whole institute and all my dear colleagues. Especially, I want to express my gratitude to Steffen Kastian, who was a great office colleague. Thank you for all the black-board discussions, your support in various situations, and for ceding our office to me during the Corona crisis. Many other colleagues made the past three years a great and interesting time for me as well. Being at the institute was so much more than work. I am looking forward to visiting the A-team as often as possible.

Last but not least, I want to thank my family. My dear parents, thank you for letting me follow my own ideas. Thank you for all the support and all the trust. Further credit goes to my parents-in-law, who are always on hand to help. And finally, and most importantly, I would like to thank my outstanding wife. It is great having you, someone I can rely on in every situation. We had such an intensive time experiencing Aachen with Karl in the past years, and there is so much more to come. I am excitedly looking forward to the next chapter with you.

Summary

One of the most powerful tools for the design and engineering of technical innovations is numerical simulation. Based on simulations, engineers have to make decisions that influence everyone's daily life. This can affect how we deal with resources in any sense, personal safety, or simply our well-being. Among all engineering disciplines, the field of solid mechanics is essential and also well-established. For many years, researchers have been developing great improvements of the finite element method to design structures and compute, e.g., critical loads. Here, a central challenge is to formulate material models. Over the years, these models became more and more accurate, but also more complex and complicated. To circumvent this complexity, a paradigm shift has taken place in recent years. Next to classical material modeling, the idea of data-driven computing has gained importance.

The present cumulative dissertation targets to make a helpful contribution in this regard. It represents a merger of three published works of the author and his coauthors concentrating on the data-driven computing paradigm in mechanics initially introduced by Kirchdoerfer and Ortiz in 2016. The overall goal is to develop methods for finite element simulations, which come along without the formulation of a constitutive model. Here, the ansatz is to treat the fundamental laws in mechanics, i.e., the equilibrium of forces and compatibility, as boundary conditions of a minimization problem. The material data is used directly in the computation without replacing it by any model simplification. This procedure makes it unnecessary to formulate complicated constitutive equations or to fit model parameters. On the one hand, uncertainties that come along with the material modeling step are bypassed. On the other hand, this method standardizes material modeling in order to save time and resources.

The current thesis begins with an introduction, including a literature overview and a detailed description of research-relevant questions. The first article follows the introduction and extends the data-driven formulation to inelasticity. This fundamental extension enables computations with history-dependent or path-dependent materials and, therefore, represents a generalization to the data-driven paradigm. To derive the underlying theory, we investigate three material representations: (1) materials with memory, (2) differential materials, and (3) materials described by history variables. We use the equivalence between these three formulations to derive possible representations of data sets, describing, among others viscoelastic, and elastoplastic material behavior.

The second article deals with an extension to the data-driven computing paradigm for sparse data sets. These data sets appear, e.g. for history-dependent materials. The article states the possible incorporation of locally-linear tangent spaces into the solver. Here, the key idea is that

the data's underlying structures can be used and approximated by linear representations. Those linear representations are computed by the tensor voting method introduced by Mordohai and Medioni. The tensor voting method can be seen as an unsupervised machine learning technique based on manifold learning. In contrast to global approximations, the method is instance-based and, therefore, analyzes the data structure pointwise. Numerical examples are investigated to illustrate the higher-order convergence behavior of the extension w.r.t. the data set size.

The final article addresses the efficiency of the data-driven solver. This iterative solver mainly consists of two steps or projections in each iteration. Starting from a state in the material data set, the constraint set's closest state is computed, where equilibrium and kinematics are fulfilled. Afterwards, we find the closest state in the data set. The article focuses on treating the latter step, which is the most time consuming for large data sets since a nearest neighbor problem is solved at each integration point. Therefore, we analyzed and adopted different data structures. We discovered that approximate nearest neighbor algorithms accelerate the search in these problems by many orders of magnitude compared to exact algorithms. The treated numerical examples cover computations with up to a billion data points analyzing a 3D elastic solid.

Zusammenfassung

Für den Entwurf und die Entwicklung technischer Innovationen ist die numerische Simulation eines der leistungstärksten Werkzeuge. Auf der Grundlage von Simulationen oder Berechnungen müssen Ingenieure Entscheidungen treffen, die das tägliche Leben aller Menschen beeinflussen. Dies kann sich auf den Umgang mit Ressourcen in jeder Hinsicht, auf die persönliche Sicherheit oder einfach auf unser Wohlbefinden auswirken. Eine wesentliche und gut etablierte ingenieurwissenschaftliche Disziplin ist die Festkörpermechanik. Seit vielen Jahren tragen zahlreiche Forscherinnen und Forscher zur Verbesserung der Finite-Elemente-Methode bei. Hierzu, gehören unter Anderem die Weiterentwicklung von Materialmodellen, um Strukturen zu entwerfen und z.B. kritische Belastungen zu berechnen. Im Laufe der Jahre wurden diese Modelle immer genauer, aber auch komplexer und komplizierter. Um diese Komplexität zu umgehen, hat in den letzten Jahren ein Paradigmenwechsel stattgefunden. Neben der klassischen Materialmodellierung hat die Idee des datengetriebenen Rechnens an Bedeutung gewonnen.

Die vorliegende kumulative Dissertation zielt darauf ab, hierzu einen hilfreichen Beitrag zu leisten. Sie stellt einen Zusammenschluss von drei veröffentlichten Arbeiten des Autors (und seiner Koautoren) dar, die sich auf das ursprünglich von Kirchdoerfer und Ortiz im Jahr 2016 eingeführte Paradigma des datengetriebenen Rechnens in der Mechanik konzentrieren. Das Gesamtziel ist die Entwicklung von Methoden für Finite-Elemente-Simulationen, die ohne die Formulierung eines Materialmodells auskommen. Der Ansatz besteht darin, die Grundgesetze der Mechanik, d.h. Kräftegleichgewicht und Kompatibilität, als Randbedingungen eines Minimierungsproblems zu behandeln. Die Materialdaten werden direkt in der Berechnung verwendet, ohne sie durch eine Modellvereinfachung zu ersetzen. Dieses Verfahren macht es überflüssig, komplizierte konstitutive Gleichungen zu formulieren oder Modellparameter anzupassen. Einerseits werden Unsicherheiten, die mit dem Schritt der Materialmodellierung einhergehen, umgangen. Auf der anderen Seite können erhebliche Zeit- und auch Personalressourcen eingespart werden.

Die vorliegende Arbeit beginnt mit einem einleitenden Teil, der einen Literaturüberblick und eine detaillierte Beschreibung forschungsrelevanter Fragen enthält. Der auf die Einleitung folgende erste Artikel erweitert die datengetriebene Formulierung auf inelastisches Materialverhalten. Diese grundlegende Erweiterung ermöglicht Berechnungen mit geschichts- oder pfadabhängigen Materialien und stellt somit eine Verallgemeinerung des datengetriebenen Paradigmas dar. Um die zugrunde liegende Theorie herzuleiten, werden drei Materialformulierungen untersucht: (1) Materialien mit Gedächtnis, (2) differentielle Materialien und (3)

Materialien, die durch Geschichtsvariablen beschrieben werden. Die Äquivalenz zwischen diesen drei Formulierungen wird zur Herleitung möglicher Datensätze verwendet, die unter Anderem viskoelastisches und elastoplastisches Materialverhalten beschreiben.

Der zweite Artikel befasst sich mit einer Erweiterung des datengesteuerten Berechnungsparadigmas für unzureichend große Datensätze. Diese Datensätze treten z.B. für geschichtsabhängige Materialien auf. Der Artikel stellt die mögliche Einbeziehung lokal-linearer Tangentenräume in den Solver dar. Der Kerngedanke dabei ist, dass die den Daten zugrundeliegenden Strukturen verwendet und durch lineare Darstellungen approximiert werden können. Diese linearen Darstellungen werden durch die von Mordohai und Medioni eingeführte Tensor-Voting-Methode berechnet. Tensor-Voting kann als eine unüberwachte maschinelle Lerntechnik angesehen werden, die auf Manifold Learning basiert. Im Gegensatz zu globalen Approximationen ist die Methode speicher- oder instanzbasiert und analysiert daher die Datenstruktur punktuell. Anhand numerischer Beispiele wird eine Konvergenz höherer Ordnung des erweiterten Verfahrens bzgl. der Datensatzgröße veranschaulicht.

Der letzte Artikel befasst sich mit der Effizienz des datengetriebenen Löser. Dieser iterative Löser besteht in jeder Iteration aus zwei Schritten bzw. Projektionen. Ausgehend von einem Zustand im Materialdatensatz wird der nächstgelegene Zustand, bei dem Gleichgewicht und Kinematik erfüllt ist, gesucht. Danach muss der nächstgelegene Zustand im Datensatz gefunden werden. Der Artikel konzentriert sich auf die Behandlung des zweitgenannten Schritts, der für große Datensätze am zeitaufwändigsten ist, da an jedem Integrationspunkt ein Nächste-Nachbar-Problem gelöst werden muss. Daher werden verschiedene Datenstrukturen analysiert und angepasst. Es konnte gezeigt werden, dass approximative Nächste-Nachbar-Algorithmen im Vergleich zu exakten Algorithmen die Suche in dem betrachteten Beispiel um viele Größenordnungen beschleunigen. Die untersuchten Randwertprobleme umfassen Berechnungen eines elastischen 3D-Körpers mit bis zu einer Milliarde Punkten.

Contents

1	Introduction	1
1.1	Motivation	1
1.2	State-of-the-art of data-driven methods in solid mechanics	3
1.2.1	Model-based data-driven methods	5
1.2.2	Model-free data-driven computational mechanics	7
1.2.3	Model-free data-driven material data identification	13
1.3	Outline of the dissertation	14
2	Article 1: Model-free data-driven inelasticity	17
2.1	Introduction	18
2.2	Background: Data-Driven elasticity	21
2.3	Extension to inelasticity	24
2.3.1	General materials with memory	25
2.3.2	Internal variable formalism	26
2.3.3	Relation between the internal variable and hereditary representations	27
2.3.4	History variables	28
2.3.5	Differential representations	29
2.3.6	Equivalence between the internal variable and differential formalisms	30
2.4	Numerical examples: Viscoelasticity	31
2.4.1	Example: The Standard Linear Solid	31
2.4.2	Example: The relaxation test	32
2.4.3	Convergence analysis: Truss structures	34
2.5	Numerical examples: Plasticity	36
2.5.1	Example: The isotropic-kinematic linear-hardening solid	37
2.5.2	Convergence analysis: Truss structures	40
2.6	Summary and concluding remarks	42
3	Article 2: Model-free data-driven comp. mechanics enhanced by tensor voting	47
3.1	Introduction	48

3.2	Background: The data-driven computing paradigm	51
3.3	Background: Instance-based learning using tensor voting	54
3.4	Numerical results for trusses	59
3.4.1	Noise free material data	60
3.4.2	Maximum entropy approach for noisy material data	63
3.5	Numerical results for 2D problem	65
3.5.1	Identification of phase space coverage of importance	67
3.6	Summary and concluding remarks	70
4	Article 3: Efficient data structures for model-free data-driven comp. mechanics	73
4.1	Introduction	74
4.2	The iterative solver of the data-driven problem	78
4.3	Example: 3D elastic solid with exact nearest neighbor projections	81
4.3.1	Performance studies using an exact 12-d tree.	82
4.3.2	Search in k-d trees	85
4.4	Nearest neighbor approximations	87
4.4.1	Approximate nearest-neighbors using k-d trees	88
4.4.2	Approximate nearest-neighbors using k-means trees	91
4.4.3	Approximate nearest-neighbors using k-nearest-neighbor graphs	94
4.4.4	Comparisons of different algorithms on a 100 million points data set	99
4.4.5	k-means tree on a 1 billion points data set	100
4.5	Summary and concluding remarks	101
5	Conclusions and Outlook	105
	List of Figures	109
	List of Tables	111
	Bibliography	113