Design und Analyse generischer poröser Materialien mittels Machine-Learning Methoden

Tobias P. Ring[1], Sebastian Kuschmitz[2], Thomas Vietor[3], Sabine C. Langer[4]

[1] *Institut für Akustik, 38106 Braunschweig, Deutschland, Email: t.ring@tu-braunschweig.de*

[2] *Institut für Konstruktionstechnik, 38106 Braunschweig, Deutschland, Email: s.kuschmitz@tu-braunschweig.de*

[3] *Institut für Konstruktionstechnik, 38106 Braunschweig, Deutschland, Email: t.vietor@tu-braunschweig.de*

[4] *Institut für Akustik, 38106 Braunschweig, Deutschland, Email: s.langer@tu-braunschweig.de*

Einleitung

Poröse Materialien finden in vielen Bereichen der Akustik Anwendung, besonders verbreitet sind sie für Anwendungen zur Absorption von Luftschall. Das wesentliche Wirkprinzip besteht in der stark verlustbehafteten Kapillarströmung, die sich aufgrund des Schallflusses innerhalb des Netzwerks miteinander verbundener Poren einstellt. Um das akustische Verhalten poröser Materialien prognostizieren und die Materialien zielgerichtet anwenden zu können, wird das akustische Verhalten mithilfe von Materialmodellen beschrieben. Dabei kommen rein empirische Modelle wie die Modelle von Delany-Bazley und Delany-Bazley-Miki sowie physikalisch motivierte Modelle zur Anwendung. Die physikalisch motivierten Modelle unterscheiden wiederum zwischen einer Modellierung der Schallausbreitung sowohl in der Festkörper- als auch der Fluidphase (Biotmodell) und einer homogenisierten Betrachtung der Schallausbreitung als äquivalentes Fluid, die Festkörperphase wird als starr betrachtet (bspw. Modell von Johnson-Champoux-Allard (-Lafarge), Modell von Zwicker & Kosten u.a.). Alle Modelle verwenden eine Teilmenge der nachfolgend als Biotparameter bezeichneten Größen (Strömungswiderstand Ξ, Porosität Φ, Tortuosität α_∞, viskose und thermale charakteristische Länge Λ, Λ') zur Beschreibung des akustischen Verhaltens. Die Biotparameter sind im Allgemeinen herausfordernd zu messen und nur für Spezialfälle berechenbar. Beide Herangehensweisen, Messung und Berechnung, erfordern dabei typischerweise eine vorhandene Materialprobe. Eine Vorhersage der Biotparameter für eine noch zu gestaltende Probe ist daher bisher sehr unsicher. Somit ist auch die zielgerichtete Gestaltung akustischer Materialien für einen gegebenen Anwendungsfall nur bedingt umsetzbar. [1]

In diesem Beitrag wird ein Vorgehen beschrieben, um aus bekannten Geometrieparametern der Probe die Biotparameter zu berechnen und so die Möglichkeit eines Materialdesigns einerseits und andererseits eine Studie des Zusammenhangs von Mikroskalengeometrie und akustischem Verhalten der Probe zu ermöglichen. Dazu wird eine Population generischer poröser Proben als einfache Gitterstruktur mittels additiver Fertigung (engl. additive manufacturing, AM; auch: 3D-Druck) hergestellt. Mittels akustischer Messverfahren und inverser Parameteridentifikation werden die Biotparameter bestimmt. Ein Neuronales Netz erzeugt schließlich eine mathematische Abbildung der Geometrieparameter auf die Biotparameter und ermöglicht so die Analyse und Prognose des akustischen Verhaltens bisher nicht hergestellter Proben. Das Verfahren wird ausführlich auch in [2] vorgestellt.

Methodik

Um das Training eines Neuronalen Netzes (NN) zu ermöglichen, ist eine ausreichend große Datenbasis erforderlich. Deshalb wird zunächst eine Anzahl von 50 einzelnen Proben gefertigt. Die Proben sind jeweils als eine geschichtete Struktur von parallelen „Balken“ aufgebaut, die Balkengeometrie wird mit den Parametern *Balkenbreite* d, *Balkenabstand* s und *Balkenhöhe* h beschrieben. Jede Schicht paralleler Balken ist gegenüber der darunterliegenden Schicht um den *Ebenenwinkel* φ verdreht. Alle Proben weisen eine einheitliche Länge $l = 15\,\text{mm}$ und einen Durchmesser von 30 mm auf. Probendurchmesser und -länge sind nicht Gegenstand der hier gezeigten Untersuchungen. Abbildung 1 zeigt den Probenaufbau schematisch, Abbildung 2 zeigt ein exemplarisches Foto einer 3D-gedruckten Probe.

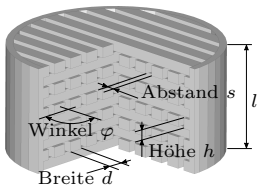

Abb. 1: Proben schematisch

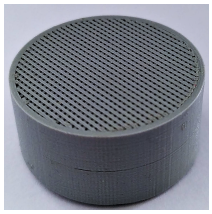

Abb. 2: Gefertigte Probe

Um eine möglichst gleichmäßige Parameterraum-Abdeckung zu erzielen, wird ein Latin-Hypercube (LHS) Sampling der vier Geometrieparameter verwendet. Die Parametergrenzen des Samplings sind in Tabelle 1 angegeben. Somit liegen 50 geometrisch voneinander verschiedene Proben vor, diese werden mittels additiver Fertigung hergestellt.

Tab. 1: Parametergrenzen des LHS Samplings

	Geometrieparameter			
	d in mm	s in mm	h in mm	φ in °
min	0,10	0,10	0,05	0,00
max	0,50	1,00	0,20	90,00

Die vorliegenden Proben werden zunächst bezüglich ihres Strömungswiderstands und ihres Absorptionsgrads vermessen; der Strömungswiderstand wird mittels des Wechselstromverfahrens gemäß ISO 9053-2 bestimmt,

der Absorptionsgrad wird im 2-Mikrofonverfahren gemäß DIN EN ISO 10543-2 gemessen. Abbildung 3 zeigt den Strömungswiderstand aller Proben über der Probennummer, Abbildung 4 zeigt den Absorptionsgrad aller Proben über der Frequenz. Der Probendurchmesser gibt den messbaren Frequenzbereich von 900 – 6.600 Hz vor. In Abbildung 4 sind einige Bereiche grün bzw. rot markiert. Der grüne Bereich wird als derjenige betrachtet, für den in der initialen Probenpopulation bereits Exemplare vorhanden sind. Er gilt damit als bekannt. Der rot markierte Bereich ist ein unbekannter Bereich. Keine der bisher vorhandenen Proben weist Messwerte in diesem Bereich auf. Diese Farbcodierung wird im Bereich des Materialdesigns (vgl. Abschnitt *Ergebnisse*) relevant. Darüber hinaus sind in beiden Abbildungen die Messwerte von zwei Proben (orange, blau) markiert. Orange markiert ist hier die Probe mit dem höchsten, mittleren Absorptionsgrad im betrachteten Frequenzbereich, die blau markierte Kurve gehört zu der Probe mit dem geringsten mittleren Absorptionsgrad, vgl. Abbildung 4. Im Vergleich zu Abbildung 3 ist zu erkennen, dass diese (bzgl. des Absorptionsgrads) „extremen“ Proben nicht die Extremwerte der gemessenen Strömungswiderstände aufweisen, ein trivialer Zusammenhang dieser Größen besteht demnach nicht.

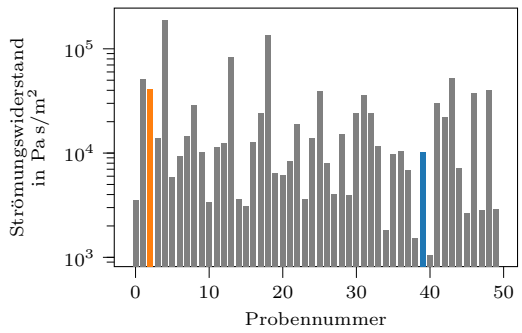

Abb. 3: Messergebnisse Strömungswiderstand; orange: Probe mit maximalem, mittleren Absorptionsgrad; blau: Probe mit minimalem, mittleren Absorptionsgrad.

Basierend auf den zur Verfügung stehenden Messdaten werden die verbleibenden Biotparameter mittels eines inversen Verfahrens ermittelt. Als Modell wird hier das Johnson-Champoux-Allard (JCA) Modell [3, 4] verwendet. Es handelt sich um ein Fünf-Parameter-Modell (Verwendung aller o.g. Biotparameter) und gehört zur Klasse der äquivalenten Fluide. Während des inversen Parameter-Identifikationsverfahrens ermittelt ein genetischer Algorithmus ausgehend von zufällig gewählten Startwerten einen Satz an Biotparametern, der die Abweichung zwischen gemessenem und dem, mit dem JCA-Modell berechneten, Absorptionsgrad minimiert. Optimiert werden dabei die Parameter Φ, α_∞, Λ, Λ', zusätzlich wird der gemessene Strömungswiderstand verwendet. Aufgrund der stochastischen Natur des genetischen Algorithmus führt eine mehrfache Ausführung des Prozesses zu leicht verschiedenen Ergebnisse. Dies wird zur *data augmentation*, also dem künstlichen Hinzufügen zusätzlicher Daten zum Trainingsdatensatz verwendet. Am Ende der inversen Parameteridentifikation stehen somit 500 Paare von Geometrie- und Biotparametern zur Verfügung.

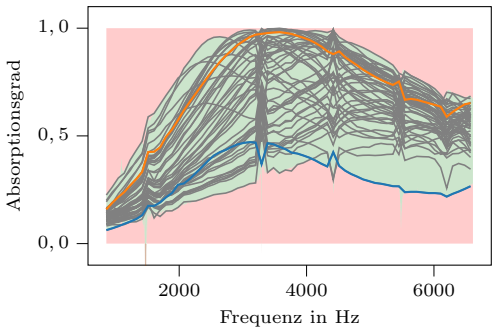

Abb. 4: Messergebnisse Absorptionsgrad; orange: Probe mit maximalem, mittleren Absorptionsgrad; blau: Probe mit minimalem, mittleren Absorptionsgrad; rot/grün: unbekannte / bekannte Bereiche für Materialdesign.

Mit diesen Datenpaaren wird ein einfaches künstliches Neuronales Netz in einem überwachten Lernprozess trainiert. Die zur Verfügung stehenden Daten werden dazu in einen Test-, Validierungs- und Trainingsdatensatz aufgeteilt. Der Testdatensatz umfasst 20 % aller Daten. Die Trainings- und Validierungsdatensätze werden aus den verbleibenden Daten in einer 3-fachen Kreuzvalidierung gebildet. Das verwendete NN hat die Struktur 4–2000–5000–200–5 (iterativ durch Versuch und Irrtum gefunden) und bildet die vier Geometrieparameter auf die fünf Biotparameter (alle Werte auf $[0, 1]$ skaliert) ab. Es handelt sich um ein einfaches, vollverbundenes Vorwärtspropagations-Netzwerk und wird als Regressionsmodell verwendet. Als Aktivierungsfunktion wird durchgängig die *ReLU*-Funktion genutzt. In Abbildung 5 ist eine Korrelationsanalyse der Testdaten und den zugehörigen Prognosen des NN für alle Biotparameter dargestellt. Dabei werden dem NN die Geometriedaten übergeben und die berechneten Werte der einzelnen Biotparameter über den zu den Geometrieparametern zugehörigen Werten aufgetragen. Es wird für fast alle Biotparameter eine sehr gute Korrelation mit einem Pearson-Korrelationskoeffizienten oberhalb 0,90 erreicht. Einzig die viskose charakteristische Länge weist einen Korrelationskoeffizienten von $\rho_\Lambda = 0{,}80$ auf. Grundsätzlich zeigt das NN somit gute Abbildungseigenschaften, dies wird auch durch ein Bestimmtheitsmaß $R^2 = 0{,}93$ auf die Testdaten bestätigt.

Ergebnisse

Das somit zur Verfügung stehende Modell bildet die Geometrieparameter auf die Biotparameter ab und schließt damit die Lücke zwischen Mikroskalengeometrie und akustischem Verhalten. Es ermöglicht verschiedene Anwendungsfälle, von denen nachfolgend die Möglichkeit des Materialdesigns sowie eine Untersuchung zum Einfluss der verschiedenen Geometrieparameter auf die Biotparameter vorgestellt werden.

Die Idee des Materialdesigns geht davon aus, dass für einen bekannten Anwendungsfall ein akustisch möglichst gut geeignetes Material erzeugt werden soll. Hier wird diese Frage in dem Sinne verstanden, als dass ein zu erzeugendes Material einen vorgegebenen Absorptionsgrad aufweisen soll. Dazu werden exemplarisch zwei Zielkur-

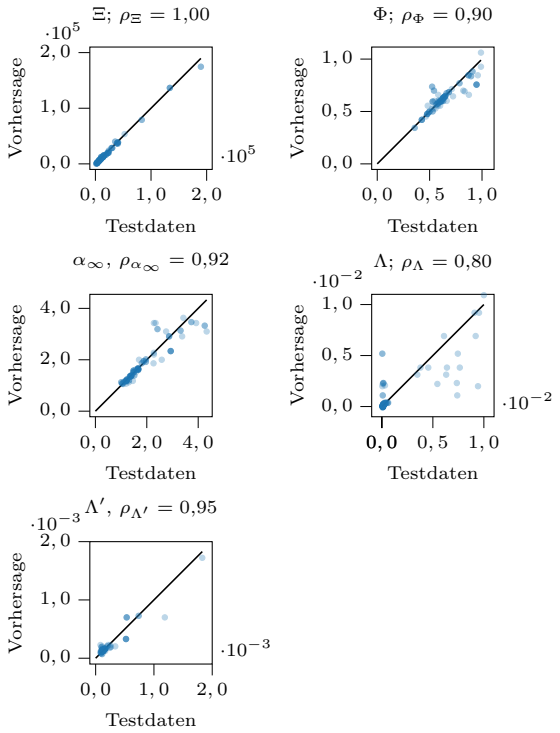

Abb. 5: Abbildungsverhalten des Neuronalen Netzes

ven definiert, die jeweils einen gewünschten Absorptionsgrad vorgeben. Die Aufgabe besteht in der Berechnung eines Materials dass diesen Absorptionsgrad möglichst gut annähert. Abbildung 6 zeigt die zwei Zielkurven „niedrig“ und „hoch“ sowie die aus Abbildung 4 bekannten bzw. unbekannten Bereiche. Es ist zu erkennen, dass die Kurve „niedrig“ ausschließlich innerhalb des grünen Bereichs verbleibt, die zu generierenden Kombinationen von Geometrieparametern sollten daher in der Nähe bereits bekannter Parameterkombinationen liegen. Demgegenüber verlässt die Kurve „hoch“ den bekannten Bereich oberhalb ca. 4.500 Hz. Das NN hat hier somit nicht die Möglichkeit zwischen bekannten Parameterkombinationen zu interpolieren, sondern es muss eine gewisse Extrapolationsfähigkeit aufweisen.

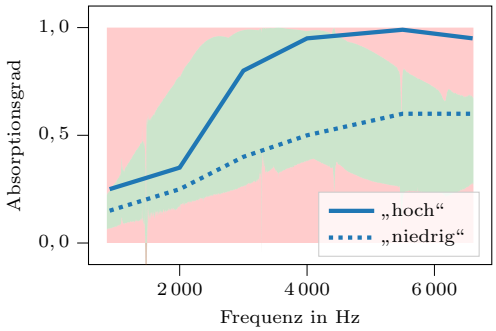

Abb. 6: Absorptionsgrad-Zielkurven für Materialdesign

Das Materialdesign erfolgt, ähnlich der Extraktion der Biotparameter mittels eines inversen Verfahrens basierend auf einem genetischen Algorithmus. Dieser Optimierungsalgorithmus ermittelt, in Verbindung mit dem NN und dem JCA-Modell einen Satz an Geometrieparametern, welche die Abweichung zwischen Zielkurve und berechnetem Absorptionsgrad minimieren. Die so definierten Materialien werden wiederum in Form von Proben mittels AM hergestellt und hinsichtlich des Absorptionsgrads im Impedanzrohr vermessen. Abbildung 7 zeigt die Ergebnisse für die Kurve „niedrig“, Abbildung 8 zeigt die Ergebnisse für die Zielkurve „hoch“.

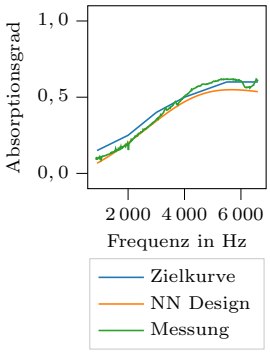

Abb. 7: Vergleich Zielkurve „niedrig“, Prognose mittels NN und Messergebnis

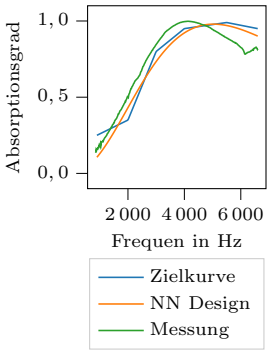

Abb. 8: Vergleich Zielkurve „hoch“, Prognose mittels NN und Messergebnis

Anhand der Abbildungen 7 und 8 ist zu erkennen, dass das Ziel des Materialdesigns prinzipiell gut erreicht wird. Für den Fall der Zielkurve „niedrig“ stimmen die Zielkurve, das durch das NN gefundene Design und die erzielten Messwerte sehr gut überein. Das Material verhält sich akustisch wie gewünscht. Für den Fall der Zielkurve „hoch“ sind etwas größere Abweichungen vor allem im hohen Frequenzbereich erkennbar. Prinzipiell ist der Verlauf der Zielkurve dennoch gut durch das erzeugte Material abgebildet. Für den im hohen Frequenzbereich im Vergleich zur Zielkurve geringeren Absorptionsgrad sind mehrere Gründe möglich. Einerseits kann es sich hier um Fertigungsungenauigkeiten handeln, andererseits besteht die Möglichkeit, dass das grundsätzliche Balken-Design der Probe selbst derartige, hohe Absorptionsgrade verhindert. Dennoch ist das erzielte Materialverhalten prinzipiell wie gewünscht. Der gemessene Absorptionsgrad liegt im hohen Frequenzbereich immer noch innerhalb des aus der ursprünglichen Probenpopulation unbekannten (vgl. roter Bereich in Abb. 4) Bereichs. Das hier vorgestellte Modell ist also prinzipiell in der Lage, über den Informationsgehalt des ursprünglichen Trainingsdatensatzes hinaus zu extrapolieren und somit neue Materialien zu erzeugen.

Eine weitere Anwendung des NN-basierten Modells ist die Untersuchung des Einflusses der verschiedenen Geometrieparameter auf das akustische Verhalten. Dazu wird eine globale Sensitivitätsanalyse nach Sobol durchgeführt. Die Berechnung der Sensitivitätskoeffizienten erster und zweiter Ordnung mit der Methode von Saltelli ermöglichen Einblicke in den Einfluss der einzelnen Parameter und deren Interaktionen [5]. Für die hier gezeigten Ergebnisse wird eine globale Sensitivitätsanalyse mit einer Sobol-Sequenz und $1 \cdot 10^6$ Simulationen durchgeführt. Die Ergebnisse für die totalen Sensitivitätskoeffizienten sind in Abbildung 9 dargestellt. Der totale Sensitivitätskoeffizient gibt den Einfluss eines Parameters insgesamt auf die Ausgangsgröße wieder und berücksichtigt somit sowohl den direkten Einfluss als auch Einflüsse höherer Ordnung (Interaktion).

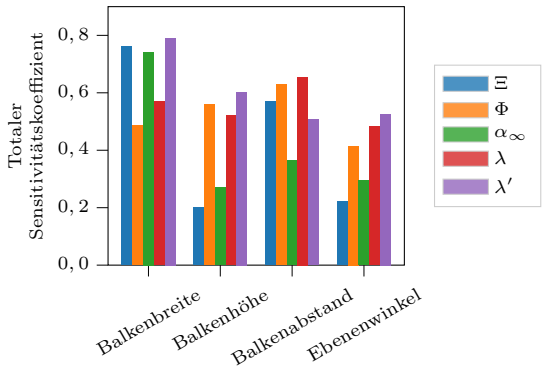

Abb. 9: Totale Sensitivitätskoeffizienten

In Abbildung 9 ist zunächst zu erkennen, dass die Totalen Sensitivitätskoeffizienten der Balkenbreite im Mittel am höchsten sind. Die Balkenbreite wirkt sich dabei besonders auf Strömungswiderstand, Tortuosität und thermale charakteristische Länge aus. Demgegenüber wirken sich die Balkenhöhe und der Ebenenwinkel nur in geringem Maße auf den Strömungswiderstand aus, während der Balkenabstand den größten Einfluss auf die Porosität zeigt. Diese Ergebnisse entsprechen der Intuition: eine Vergrößerung des Balkenbreite erzeugt eine größere Verblockung und erhöht somit den Strömungswiderstand; eine Erhöhung des Balkenabstandes führt zu weniger Balken je Ebene – der Anteil der Luft am Gesamtvolumen der Probe (= Porosität) steigt.

Dennoch sind diese Ergebnisse nur teilweise aussagekräftig, da beispielsweise eine *gleichzeitige* Erhöhung von Balkenbreite und -abstand sich bzgl. des Strömungswiderstands auch kompensieren könnte. Derartige Interaktionseffekte können anhand der Sensitivitätskoeffizienten höherer Ordnung erkannt werden, Abbildung 10 zeigt die Sensitivitätskoeffizienten zweiter Ordnung in Matrixform. Auf der Hauptdiagonalen sind keine Einträge vorhanden, da keine Wechselwirkung der Parameter mit sich selbst definiert ist; darüber hinaus sind die Matrizen symmetrisch. Das Diagramm oben-links zeigt die Interaktionseffekte für den Strömungswiderstand. Deutlich zu sehen ist, dass die Interaktion von Balkenbreite und Balkenabstand am einflussreichsten für den Strömungswiderstand ist, wie bereits angedeutet. Bezüglich des Strömungswiderstand sind die weiteren Interaktionseffekte von untergeordneter Bedeutung. Für die Porosität wird ein besonderes Zusammenwirken von Balkenbreite und Balkenhöhe erkannt, ebenso bezüglich der thermalen charakteristischen Länge. Gleichwohl sind die Größenordnungen dieser Interaktion mit ca. 0,09 deutlich geringer als die Interaktion von Balkenbreite und -abstand bezüglich des Strömungswiderstands ($\approx$ 0,20).

Insgesamt zeigen die hier gezeigten Ergebnisse, dass sowohl der Einfluss einzelner Geometrieparameter, als auch die gegenseitige Beeinflussung der Geometrieparameter jeweils relevante Auswirkungen auf die Akustik bewirken. Die Ergebnisse bieten damit einen Ansatz, zukünftig konkrete Modelle zur Schätzung der Biotparameter aus

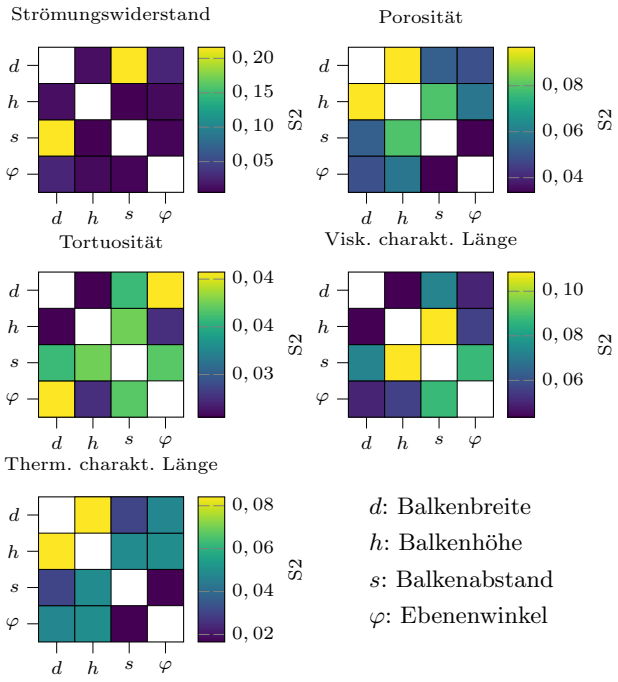

Abb. 10: Sensitivitätskoeffizienten 2. Ordnung

Mikroskalen-Geometrieparametern zu ermitteln und damit ein effizientes Materialdesign zu ermöglichen.

Zusammenfassung und Ausblick

Der vorliegende Beitrag zeigt Anwendungsmöglichkeiten von Machine-Learning Methoden in Verbindung mit porösen Medien auf. Dazu wird ein Neuronales Netz generiert, welches Biotparameter aus Parametern der Mikroskalengeometrie generischer poröser Strukturen berechnet. Vorgestellte Anwendungsfälle sind das „Maßschneidern“ von Materialien mit einem vordefiniertem akustischen Verhalten und das Studium der zugrundeliegenden physikalischen Zusammenhänge. Nächste Schritte bestehen in der Betrachtung komplexerer Strukturen und der Ableitung allgemeiner Aussagen.

Literatur

[1] Allard, J., Atalla, N.: Propagation of sound in porous media: modelling sound absorbing materials. 2e. John Wiley & Sons, Chichester, 2009

[2] Kuschmitz, S., Ring, T.P., Watschke, H., Langer, S.C., Vietor, T.: Design and Additive Manufacturing of Porous Sound Absorbers – A Machine-Learning Approach. Materials 14 (2021), 1747 https://doi.org/10.3390/ma14071747

[3] Johnson, D. L., Koplik, J., Dashen, R.: Theory of dynamic permeability and tortuosity in fluid-saturated porous media. J. of fl. mech., 176 (1987), 379-402

[4] Champoux, Y., Allard, J. F. Dynamic tortuosity and bulk modulus in air-saturated porous media. J. of appl. phys., 70(4) (1991), 1975-1979

[5] Saltelli et al.: Global sensitivity analysis: the primer. John Wiley & Sons, Hoboken NJ, 2008