

Scientific Machine Learning zur Vorhersage von Freiform-Mikrolinsen

Annika Dehm, Lucas Fischer, Mike Dohmen, Andreas Heinrich

Aalen School of Applied Photonics, Hochschule Aalen

mailto:annika.dehm@hs-aalen.de

Diese Arbeit präsentiert einen "Scientific Machine Learning" Ansatz zur Vorhersage von elektrisch deformierten Freiform-Mikrolinsen. Ein punktwise arbeitendes Multilayer Perceptron sowie ein sequenzbasiertes 1D-U-Net werden durch weiche und harte Randbedingungen um physikalisches Vorwissen erweitert und vergleichend analysiert.

1 Einleitung

Diese Arbeit befasst sich mit der Vorhersage von Oberflächengeometrien additiv gefertigter Freiform-Mikrolinsen. Die Herstellung der Linsen erfolgt über ein flüssiges Polymertröpfchen das auf eine Kathode aufgebracht, durch eine bewegliche Anode elektrisch deformiert und anschließend mit UV-Licht ausgehärtet wird. Die resultierende Linsenform hängt dabei von verschiedenen Parametern wie der Elektrodenkonfiguration und der angelegten Spannung ab [1].

Ziel der Arbeit ist die Vorhersage der deformierten Tropfenkontur vor der Aushärtung. Neuronale Netze eignen sich hierfür, da sie den Zusammenhang zwischen Prozessparametern und resultierender Geometrie aus experimentellen Daten erlernen können. Rein datengetriebene Modelle liefern jedoch nicht zwangsläufig physikalisch konsistente Ergebnisse. Besonders kritisch sind dabei die Kontaktpunkte, an denen der Tropfen durch die Kanten der Kathode fixiert ist.

Scientific Machine Learning (SciML) ermöglicht es, physikalisches oder geometrisches Vorwissen gezielt in den Lernprozess einzubinden [2]. Zur Bewertung dieses Ansatzes werden ein punktwise arbeitendes Multilayer Perceptron (MLP) und ein sequenzbasiertes 1D-U-Net miteinander verglichen. Die Integration des SciML-Ansatzes wird dabei über weiche und harte Randbedingungen realisiert, deren Auswirkungen auf die Vorhersagequalität und die physikalische Konsistenz an den Kontaktpunkten untersucht werden.

2 Datengrundlage und Modellarchitekturen

Der experimentelle Datensatz umfasst 3500 Tropfendeformationsexperimente mit variierenden Anodenpositionen und Spannungen. Jedes Experiment wird mit zwei senkrecht zueinander angeordneten Kameras aufgenommen. Aus den Kamerabildern wird die diskrete Tropfenkontur extrahiert und in physikalische Einheiten überführt.

Die neuronalen Netze erhalten eine Repräsentation

des experimentellen Zustands als Eingangswerte. Diese umfasst die angelegte Spannung, den initialen Apex des undeformierten Tropfens sowie die räumliche Information entlang der Kathodenkante, einschließlich der Kontaktpunkte. Je nach Architektur werden diese Größen punktwise oder als Sequenz verarbeitet. Zielgröße ist die spannungsinduzierte deformierte Tropfenkontur, beschrieben durch die Konturhöhe z_i .

Das verwendete MLP sagt jeden Konturpunkt unabhängig vorher. Es besteht aus drei versteckten Schichten mit jeweils 50 Neuronen und verwendet eine tanh-Aktivierung. Das 1D-U-Net basiert auf der von Ronneberger et al. vorgestellten Architektur [3] und wurde für eindimensionale Sequenzen angepasst. Durch den Encoder-Decoder-Aufbau mit Skip Connections kann das Modell die gesamte Tropfenkontur auf einmal vorhersagen.

Für beide Architekturen wird zunächst ein rein datengetriebenes Basismodell mit dem mittleren quadratischen Fehler (MSE) als Verlustfunktion trainiert:

$$\mathcal{L}_{\text{data}} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} (\hat{z}_i - z_i^{\text{true}})^2. \quad (1)$$

Dabei beschreibt N_d die Anzahl der Trainingspunkte, $\hat{z}$ die Vorhersagen und z^{true} die Ground-Truth-Werte. Alle Eingangs- und Zielgrößen werden mittels z -Score-Normalisierung skaliert. Die Modellgüte wird abschließend auf einem unabhängigen Testset evaluiert, der 10% der Experimente umfasst.

3 Randbedingungen

Die Kontaktpunkte eines Tropfens entsprechen dem Schnittpunkt der festen, flüssigen und gasförmigen Phase. Im vorliegenden Aufbau werden diese Punkte durch die Kanten der Kathode definiert. Damit stellen sie bekannte geometrische Randpunkte dar und können als Dirichlet-Randbedingungen implementiert werden.

Beim Ansatz mit weichen Randbedingungen wird die gesamte Verlustfunktion ($\mathcal{L}_{\text{tot}}$) um einen

Strafterm ($\mathcal{L}_{\text{CP}}$) erweitert:

$$\mathcal{L}_{\text{tot}} = \mathcal{L}_{\text{data}} + \lambda \cdot \mathcal{L}_{\text{CP}}, \quad (2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{CP}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \left(\hat{z}_{\text{CP}}^j - z_{\text{CP}}^{j,\text{true}} \right)^2. \quad (3)$$

Dadurch werden Abweichungen an den Kontaktpunkten (CP) während des Trainings zusätzlich bestraft. Die Randbedingungen werden dabei näherungsweise erfüllt, wobei der Einfluss wesentlich vom Gewichtungsfaktor λ abhängt [4].

Im Gegensatz dazu integriert der Ansatz mit harten Randbedingungen die Kontaktpunkte direkt in die Netzwerkarchitektur, sodass die vorhergesagte Kontur die vorgegebenen Randwerte inhärent erfüllt. Hierfür wird die Netzwerkausgabe $\hat{z}_{\text{NN}}$ durch eine zusätzliche Trial Function modifiziert:

$$\hat{z}_{\text{NN}}^*(\tilde{y}) = g(\tilde{y}) + \Phi(\tilde{y}) \cdot \alpha \cdot \hat{z}_{\text{NN}}(\tilde{y}), \quad (4)$$

wobei $\tilde{y} \in [0, 1]$ die normierte Konturkoordinate bezeichnet. Die Funktion $g(\tilde{y})$ interpoliert zwischen den beiden Kontaktpunkthöhen und $\Phi(\tilde{y})$ ist an beiden Randpunkten null, sodass die Netzwerkkorrektur die exakten Randwerte dort nicht beeinflusst. α ist ein zusätzlicher Optimierungsparameter [4].

4 Ergebnisse und Diskussion

Beide Modellarchitekturen rekonstruieren die globale Tropfenkontur mit hoher Genauigkeit. Die quantitativen Ergebnisse sind in Tab. 1 zusammengefasst. Ohne Randbedingungen erreicht das 1D-U-Net mit einem Root Mean Squared Error (RMSE) von $3,8 \mu\text{m}$ eine geringere Abweichung als das MLP mit $5,9 \mu\text{m}$. Dies unterstreicht die Eignung einer sequenzbasierten Vorhersage für die untersuchten Konturdaten. Gleichzeitig reagiert das U-Net jedoch empfindlicher auf die Wahl der Hyperparameter.

Randbedingung	MLP		1D U-Net	
	MAE	RMSE	MAE	RMSE
Keine	3,6	5,9	2,7	3,8
Weich	3,6	6,0	2,1	3,4
Hart	3,7	6,0	1,9	3,1

Tab. 1 Mittlerer absoluter Fehler (MAE) und RMSE auf dem unabhängigen Testsatz. Alle Werte sind in μm angegeben.

Eine orts aufgelöste Betrachtung der Vorhersagefehler zeigt, dass die größten Abweichungen im Bereich der Kontaktpunkte auftreten. Die weiche Randbedingung reduziert diese Fehler lokal, und verringert beim 1D-U-Net zudem den globalen RMSE von $3,8 \mu\text{m}$ auf $3,4 \mu\text{m}$. Die harte Randbedingung hält die Kontaktpunkthöhen in allen Fällen exakt ein und reduziert den globalen Fehler des U-Net weiter auf $3,1 \mu\text{m}$. Beim MLP bleibt der

globale RMSE hingegen nahezu unverändert. Die Wirksamkeit der Randbedingungen auf die globale Vorhersagegüte ist demnach stark architekturabhängig. Die physikalische Plausibilität wird durch die Randbedingungen hauptsächlich lokal verbessert. Eine zwangsläufige Verbesserung der gesamten Konturvorsage ergibt sich daraus jedoch nicht, da die Abweichungen in benachbarte Konturbereiche verlagert werden können. Insbesondere harte Randbedingungen setzen zudem präzise Messdaten voraus, da Messrauschen direkt in die Modellvorhersagen übertragen wird.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Vorhersage spannungsinduzierter Freiform-Mikrolinsen mit einem MLP und einem 1D-U-Net untersucht. Das 1D-U-Net erzielt auf dem unabhängigen Testsatz die bessere Vorhersagegüte, während das MLP weniger empfindlich gegenüber Änderungen der Hyperparameter ist. Die größten Abweichungen der rein datengetriebenen Modelle treten an den Kontaktpunkten auf, was zu physikalisch unplausiblen Konturen führen kann. Durch die Einbindung weicher und harter Randbedingungen lässt sich die physikalische Konsistenz an diesen Kontaktpunkten gezielt verbessern. Die harte Randbedingung eliminiert den Randfehler exakt, während die weiche Randbedingung eine flexiblere, näherungsweise Formulierung darstellt.

Insgesamt wirken beide Ansätze vor allem lokal. Zukünftige Arbeiten werden sich daher darauf konzentrieren, zusätzlich zu den geometrischen Randbedingungen auch die zugrunde liegenden Differentialgleichungen des Deformationsprozesses in die Verlustfunktion zu integrieren. Dadurch soll die lokale physikalische Konsistenz um eine globale physikalische Beschreibung der Tropfenform ergänzt werden.

6 Danksagung

Gefördert durch die Carl-Zeiss-Stiftung (KI-Booster-Projekt P2019-00-043) und die DFG (HE3533/10-1).

References

- [1] M. Dohmen, A. Heinrich, and C. Neumann, "Electric-field deformation of polymer droplets resolved by pressure-curvature," *JCIS Open* **23**, 100188 (2026).
- [2] G. Karniadakis, I. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, "Physics-informed machine learning," *Nature Reviews Physics* **3**, 422–440 (2021).
- [3] O. Ronneberger, P. Fischer, and T. Brox, "U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation," *CoRR* **abs/1505.04597** (2015).
- [4] M. Sheikholeslami, S. Salehi, W. Mao, A. Eslamdoost, and H. Nilsson, "Physics-informed neural networks with hard and soft boundary conditions for linear free surface waves," *Physics of fluids* **37**(8) (2025).