

Оглавление

| | | |
|----------|--|----------|
| 1 | CLANN | 2 |
| 1.1 | Введение | 2 |
| 1.2 | Кинематика | 2 |
| 1.3 | Напряжения и термодинамическая корректность | 3 |
| 1.4 | ICNN: архитектура и обучение | 3 |
| 1.4.1 | Функция потерь и обучение | 5 |
| 1.4.2 | Интерполяция и экстраполяция кривых нагружения | 5 |
| 1.4.3 | ? Численные аспекты и интеграция в МКЭ | 5 |
| 1.5 | Численные эксперименты | 6 |
| 1.5.1 | Сравнение с классическими моделями на синтетических данных | 7 |
| 1.6 | Натурные эксперименты | 8 |
| 1.6.1 | Экспериментальная установка | 8 |
| 1.6.2 | Результаты и валидация | 8 |
| 1.7 | Заключение | 8 |

Глава 1

CLANN

1.1 Введение

В данной работе представлена термодинамически корректная гиперупругая модель CLANN (Convex Laplace Artificial Neural Network), основанная на выпуклой нейросети и логарифмической параметризации деформации - тензоре Лапласа. Модель обеспечивает физически корректное интерполирование и экстраполирование поля напряжений и объективное описание механического поведения материалов при больших деформациях, что было проверено при помощи обучения модели на синтетических и натуральных данных, и валидации получившейся модели на численном эксперименте.

1.2 Кинематика

Основные соотношения

Мы рассматриваем равновесие тонкой несжимаемой гиперупругой мембраны под определенными нагрузками. Деформация мембраны характеризуется деформацией её срединной поверхности. Обозначим через \mathbf{X} и \mathbf{x} положения точек в исходной (недеформированной) Ω_0 и текущей (деформированной) Ω_t конфигурациях срединной поверхности мембраны соответственно. Деформация определяется отображением $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$, поверхностный градиент деформации $\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$, а правый тензор Коши—Грина $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$. Для определения меры деформации мы используем тензор Лапласа $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ основанный на QR-разложении \mathbf{F}_{2d} [2]. В параметризации Холецкого $\mathbf{C} = \mathbf{U}^\top \mathbf{U}$, где \mathbf{U} — верхнетреугольный тензор [1]. В этом случае гиперупругий потенциал это функция от деформации Лапласа $\psi = \psi(\boldsymbol{\xi})$.

Мера деформации Лапласа В двумерном случае вводятся координаты

$$\xi_1 = \ln(u_{11}), \quad \xi_2 = \ln(u_{22}), \quad \xi_3 = \frac{u_{12}}{u_{11}}, \quad u_{ij} - \text{компоненты тензора } \mathbf{U}. \quad (1.1)$$

1.3 Напряжения и термодинамическая корректность

Гиперупругие напряжения получаются дифференцированием энергии по мере деформации:

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{C}}, \quad \mathbf{r} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi}. \quad (1.2)$$

Такое построение гарантирует объективность и консервативность напряжений.

Компоненты напряжений в двумерном случае для выбранной параметризации в 2D будут следующими:

$$\begin{aligned} S_{11} &= e^{-2\xi_1} (r_1 - 2\xi_3 r_3) + e^{-2\xi_2} r_2 \xi_3^2, \\ S_{22} &= e^{-2\xi_2} r_2, \\ S_{12} &= -e^{-2\xi_2} r_2 \xi_3 + e^{-2\xi_1} r_3. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Механические ограничения гиперупругости.

Положительность и рост энергии:

$$\psi(\xi) \geq 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^3, \quad \psi(\xi) \rightarrow \infty \text{ при } \|\xi\| \rightarrow \infty. \quad (1.4)$$

Это обеспечивается $\mathbf{W}_2 \geq 0$, положительной активацией и выпуклостью.

Симметрия и объективность:

$$S_{ij} = S_{ji}, \quad \psi = \psi(\mathbf{C}) \Rightarrow \text{инвариантность относительно поворотов.} \quad (1.5)$$

1.4 ICNN: архитектура и обучение

Строго выпуклая энергия Энергия деформации $\psi(\xi)$ задаётся входной выпуклой нейросетью (ICNN):

$$z = \frac{\text{softplus}(\beta \mathbf{W}_1 \xi)}{\beta}, \quad \psi = \mathbf{W}_2^\top z + b_2, \quad \mathbf{W}_2 \geq 0. \quad (1.6)$$

Отсюда гессиан $\mathbf{H} = \partial^2 \psi / \partial \xi^2$ положительно определён.

Аналитический градиент архитектуры ICNN Аналитическая форма градиента ICNN имеет вид

$$\nabla_\xi \psi = \mathbf{W}_1^\top (w_2 \odot \sigma(\beta(\mathbf{W}_1 \xi))), \quad (1.7)$$

где $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ - сигмоида.

Аналитический гессиан Аналитическая форма гессиана ICNN имеет вид

$$H_{ij} = \sum_h \sigma'_h w_{2,h} W_{h,i} W_{h,j}, \quad \sigma' = \beta \sigma(1 - \sigma), \quad \sigma = \text{sigmoid}(\beta s), \quad s = \mathbf{W}_1 \xi + \mathbf{b}_1. \quad (1.8)$$

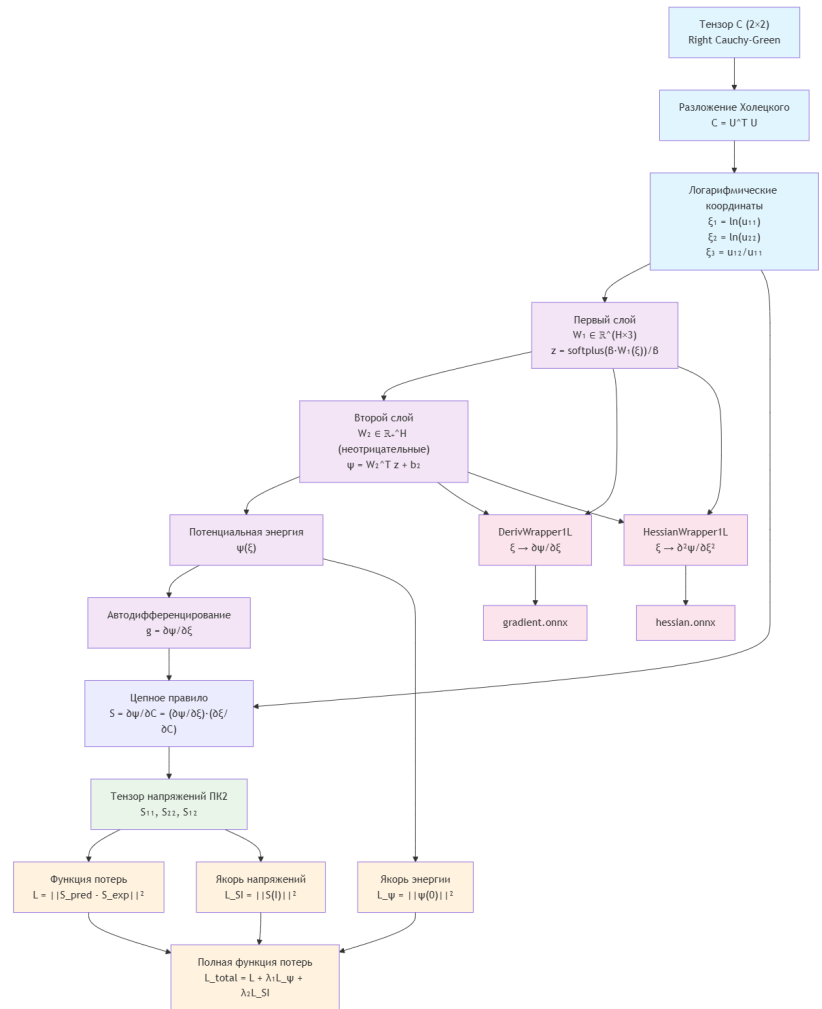


Рис. 1.1. Схема вычислительного процесса CLANN: от входного тензора до функции потерь. Показаны этапы обработки входных данных, вычисления нейросетью, дифференцирования и формирования функции потерь.

1.4.1 Функция потерь и обучение

Основная функция потерь

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{S}_{\text{pred}}^{(i)} - \mathbf{S}_{\text{exp}}^{(i)}\|^2. \quad (1.9)$$

Якорные слагаемые

$$L_{\text{SI}} = \|\mathbf{S}(\mathbf{I})\|^2, \quad L_{\psi} = \|\psi(0)\|^2. \quad (1.10)$$

Полная функция потерь:

$$L_{\text{total}} = L + \lambda_{\text{SI}} L_{\text{SI}} + \lambda_{\psi} L_{\psi}. \quad (1.11)$$

Обучение проводилось на наборах данных с набором из 90 точек деформаций \mathbf{C} и напряжения \mathbf{S} для двухосного растяжения тела с геометрией мальтийский крест. Гиперпараметры модели были следующие: learning rate = 0.001, batch size = 128, $\lambda_{\text{SI}} = 0.1$, $\lambda_{\psi} = 0.1$, количество нейронов на скрытом слое = 16. Ошибка упала за менее чем 5000 эпох на 5 порядков.

1.4.2 Интерполяция и экстраполяция кривых нагружения

вставить рисунок

1.4.3 ? Численные аспекты и интеграция в МКЭ

Разложение Холецкого

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}^{\top} \mathbf{U}, \quad \mathbf{U} = \text{cholesky_upper}(\mathbf{C}).$$

Автоматическое дифференцирование и экспорт

Используются автодифференцирование для $\mathbf{r} = \partial\psi/\partial\xi$ и аналитические формулы для \mathbf{S} и гессиана; возможен экспорт вычислителей в онлайн-форматы.

Физическая корректность и стабильность ICNN

Архитектура ICNN обеспечивает несколько ключевых свойств, критически важных для физической корректности модели:

Объективность: Модель инвариантна относительно поворотов благодаря параметризации через инварианты деформации. Это гарантирует, что предсказания напряжений не зависят от выбора системы координат.

Выпуклость энергии: Строгая выпуклость $\psi(\xi)$ обеспечивает единственность решения задачи минимизации энергии и положительную определённость ка-

сательной жёсткости. Это критически важно для стабильности численного решения в конечно-элементных расчётах.

Положительность энергии: Ограничение $W_2 \geq 0$ вместе с положительной активацией softplus гарантирует, что $\psi(\xi) \geq 0$ для всех допустимых деформаций, что соответствует физическому принципу положительности энергии деформации.

Стабильность численного решения: Положительная определённость гессиана $\mathbf{H} = \partial^2 \psi / \partial \xi^2$ обеспечивает сходимость метода Ньютона при решении нелинейных уравнений равновесия. Это свойство особенно важно при больших деформациях, когда классические модели могут терять устойчивость.

Регуляризация и обобщающая способность: Выпуклая структура ICNN естественным образом предотвращает переобучение и обеспечивает плавную интерполяцию между точками обучения. Модель способна к экстраполяции за пределы диапазона обучающих данных благодаря физически обоснованной структуре энергии.

Эффективность вычислений: Аналитические выражения для градиента и гессиана позволяют избежать дорогостоящего численного дифференцирования, что критично для интеграции в конечно-элементные пакеты и реального времени расчётов.

Термодинамическая корректность: прямое вычисление напряжений из автоматического дифференцирования функции энергии по формуле (1.2) гарантирует термодинамическую корректность.

1.5 Численные эксперименты

В первом эксперименте CLANN был обучен на синтетических данных двухосного растяжения тела с геометрией мальтийский крест и потенциалом неогук

Таблица 1.1. Сводка проведенных экспериментов по обучению и валидации модели CLANN

| Обучение | | | | Валидация | | |
|-------------------|--------|----------|-------|-------------------------------|---------------|----------------------|
| Геометрия | Размер | Материал | Время | Геометрия | Время расчёта | Количество элементов |
| Мальтийский крест | 90 | Нео-Гук | – | Гетерогенная круглая мембрана | 329.816 сек | 4886 |
| Мальтийский крест | | | | Гомогенная круглая мембрана | 329.816 сек | 4886 |
| Мальтийский крест | | | | Чистый сдвиг | – сек | – |

1.5.1 Сравнение с классическими моделями на синтетических данных

Для оценки качества модели CLANN проведено сравнение с классической гиперупругой моделью Нео-Гука. Для валидации модели CLANN на синтетических данных были проведены численные эксперименты с различными типами деформаций.

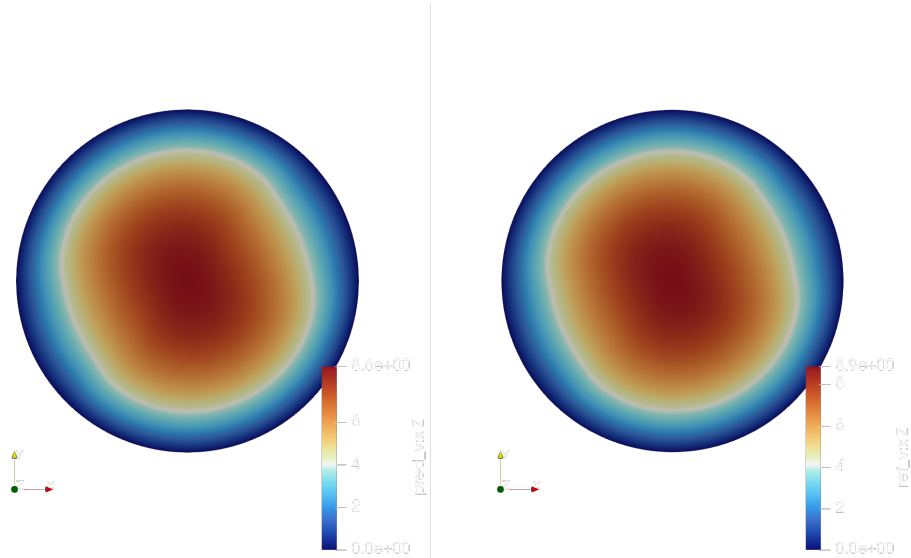


Рис. 1.2. Результаты численного эксперимента: поле деформаций при различных типах нагружения. Показаны компоненты деформации u_{11} , u_{22} и u_{12} для различных конфигураций нагружения.

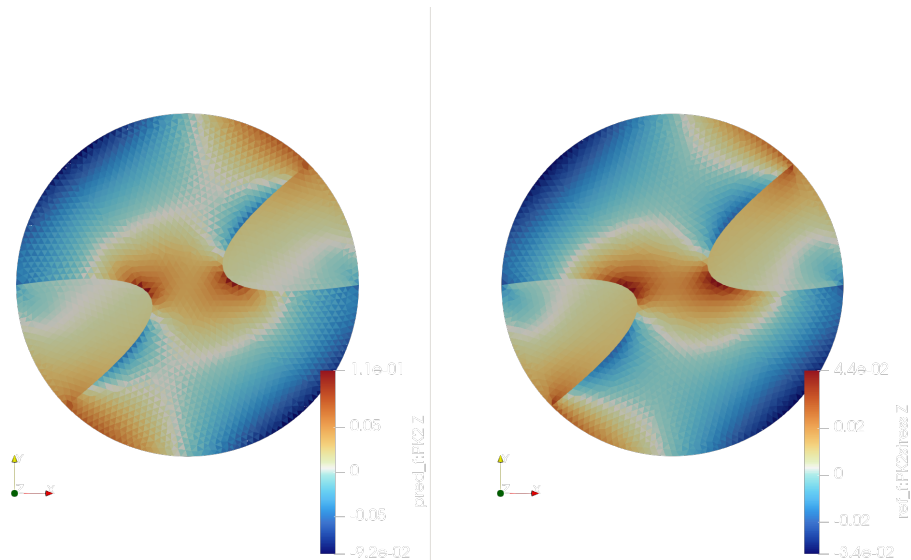


Рис. 1.3. Результаты численного эксперимента: поле напряжений ПК2. Показаны компоненты напряжений S_{11} , S_{22} и S_{12} , вычисленные моделью CLANN для соответствующих деформаций.

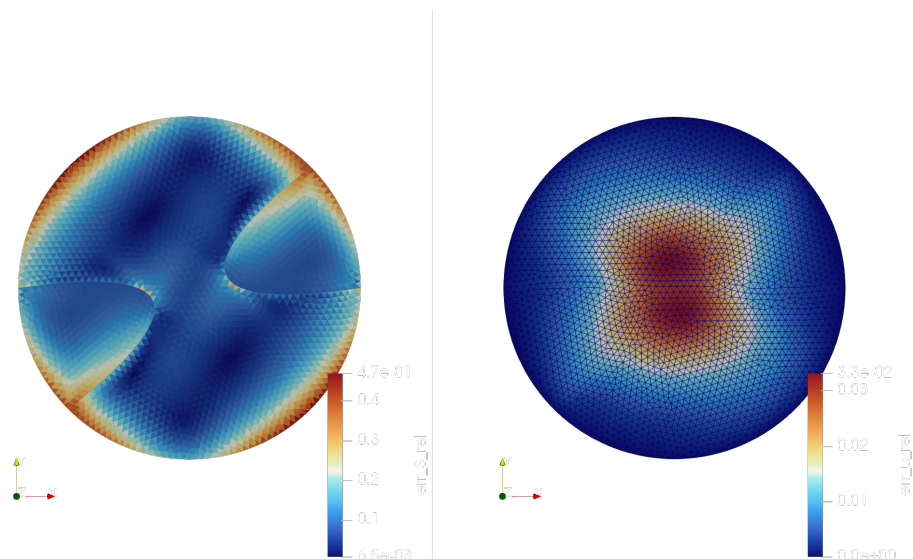


Рис. 1.4. Анализ ошибок численного эксперимента: распределение относительных ошибок между предсказанными и эталонными значениями напряжений. Показаны локальные и глобальные метрики точности модели.

1.6 Натурные эксперименты

1.6.1 Экспериментальная установка

1.6.2 Результаты и валидация

1.7 Заключение

Список литературы

- [1] Alexey Liogky and Victoria Salamatova. Data-driven anisotropic biomembrane simulation based on the laplace stretch. *Computation*, 12(3):39, 2024.
- [2] Victoria Salamatova and Alexey Liogky. Interpretable data-driven modeling of hyperelastic membranes. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 39(11):e3757, 2023.