

Оглавление

1 Выпуклая нейронная сеть для основанной на данных симуляции гиперупругой механики с использованием меры деформации Лапласа (CLaNN)	2
1.1 Введение	2
1.2 Кинематика	2
1.3 Напряжение и термодинамическая корректность	3
1.4 Архитектура CLaNN и её производные	4
1.5 Виртуальный эксперимент	7
1.5.1 Интерполяция и экстраполяция кривых нагрузления	12
1.5.2 Раздутие мембранны	14
1.5.3 Сравнение вычислительной эффективности CLaNN	16
1.6 Заключение	17
A Эквивалентность QR-факторизации F и разложения Холецкого $C = F^\top F$ для вычисления логарифмических координат ξ	19
A.1 Постановка и обозначения	19
A.2 Теорема (эквивалентность U и R)	19
A.3 Координаты ξ через \tilde{F}	20

Глава 1

Выпуклая нейронная сеть для основанной на данных симуляции гиперупругой механики с использованием меры деформации Лапласа (CLaNN)

1.1 Введение

Область применимости и ограничения квазистатика, мембранные постановки,

Организация статьи

1.2 Кинематика

Основные соотношения

Мы рассматриваем равновесие тонкой несжимаемой гиперупругой мембраны с толщиной H под определенными нагрузками. Деформация мембраны характеризуется деформацией её срединной поверхности. Обозначим через \mathbf{X} и \mathbf{x} положения точек, в соответствующих базисах \mathbf{E}_α и \mathbf{e}_α , в исходной (недеформированной) $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ и текущей (деформированной) $\Omega_t \subset \mathbb{R}^2$ конфигурациях поверхности мембраны соответственно. Деформация определяется отображением $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$, поверхностный градиент деформации $\mathbb{F} = \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{E}^\alpha$, а правый тензор Коши–Грина $\mathbb{C} = C_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta = \mathbb{F}^\top \mathbb{F}$. Для определения меры деформации мы используем меру Лапласа $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ [1], которая может быть вычислена двумя эквивалентными способами: либо через QR-разложение градиента деформации $\mathbb{F} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ с $\tilde{\mathbb{F}} = \mathbf{R}$, либо через разложение Холецкого правого тензора Коши–Грина $\mathbb{C} = \tilde{\mathbb{F}}^\top \tilde{\mathbb{F}}$ (Приложение А). В этом случае гиперупругий потенциал является функцией от деформации Лапласа $\psi = \psi(\boldsymbol{\xi})$.

Мера деформации Лапласа В двумерном случае вводятся характеристики

$$\xi_1 = \ln(\tilde{f}_{11}), \quad \xi_2 = \ln(\tilde{f}_{22}), \quad \xi_3 = \frac{\tilde{f}_{12}}{\tilde{f}_{11}}, \quad \tilde{\mathbb{F}} = \tilde{f}_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta. \quad (1.1)$$

1.3 Напряжение и термодинамическая корректность

В качестве меры напряжения образца мы используем **второй тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа**, который вычисляется по цепному правилу дифференцированием энергии ψ по правому тензору деформации Коши-Грина \mathbb{C} :

$$\mathbb{S} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{C}} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}} = 2 \mathbf{r}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}, \quad \mathbf{r} := \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (1.2)$$

Вектор $\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}$ называют базисом, он является известным аналитическим выражением, зависящим от выбранной меры деформации; $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)$ – функцией отклика, которая является итоговым *искомым* в процессе обучения *data-driven* определяющего соотношения.

Такое построение имеет ключевые следствия:

Объективность: $\psi(\mathbb{C}) = \psi(\mathbb{Q}^\top \mathbb{C} \mathbb{Q})$ для любой ортогональной \mathbb{Q} , а значит и \mathbb{S} инвариантен к поворотам.

Симметрия напряжений: $\mathbb{S} = \mathbb{S}^\top$ вследствие симметрии \mathbb{C} и корректного применения цепного правила.

Термодинамическая корректность: равенство (1.2) является следствием неравенства Клаузиуса-Дюгема $\mathcal{D} = \mathbb{S} : \dot{\mathbb{C}} - \dot{\psi}(\mathbb{C}) \geq 0$, выражающее второе начало термодинамики для механических процессов [2, 3].

Расписав покомпонентно уравнение (1.2) и подставив туда известный базис $\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}$, получаем аналитические выражения для компонент второго тензора напряжений Пиолы-Кирхгофа в двумерном случае:

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

Ограничения на гиперупругую модель чего? на что? Лучше первым абзацем

В соответствии с принципами термодинамики и механики сплошных сред, гиперупругая модель ψ должна удовлетворять ряду фундаментальных ограничений, обеспечивающих физическую корректность и материальную устойчивость:

Неотрицательность исключает отрицательную энергию деформации

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) \geq 0 \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3. \quad (1.4)$$

Нулевые значения для ψ и \mathbf{S} в естественном состоянии означают, что недеформированное (начальное) состояние среды не имеет остаточных напряжений

$$\psi(\mathbf{0}) = 0, \quad \mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}, \quad (1.5)$$

Бесконечный рост (коэрцитивность). Неограниченный рост меры деформации физически недостижим при конечной работе не совсем понятно, уместно ли говорить про $J \rightarrow \infty$ для случая несжимаемой мембранны

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) \rightarrow \infty \text{ при } \|\boldsymbol{\xi}\| \rightarrow \infty, \quad \mathbb{S} \rightarrow \infty \text{ при } J \rightarrow \infty \text{ или } J \rightarrow 0^+, \quad J = \det \mathbf{F}, \quad (1.6)$$

Свойства (1.4) – (1.6) принято записывать через градиент деформации \mathbf{F} и правый тензор деформации Коши-Грина \mathbf{C} [4–6], но они эквивалентны и для меры деформации Лапласа $\boldsymbol{\xi}$.

1.4 Архитектура CLaNN и её производные

В рамках предложенного подхода CLaNN (Convex Laplace Neural Network) энергия деформации $\psi(\boldsymbol{\xi})$ с мерой деформации Лапласа аппроксимируется посредством выпуклой по выходу нейронной сетью (Input Convex Neural Network, ICNN) [7] и вычисления 2 тензора напряжения Пиолы-Кирхгофа \mathbf{S} , используя явное выражение (1.3).

Обобщенная архитектура ICNN

ICNN представляет собой класс нейронных сетей, гарантирующих выпуклость выходной функции относительно входных переменных. В нашем случае, функция энергии деформации $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ называется выпуклой, если $\forall \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2 \in \mathbb{R}^3$ и $\lambda \in [0, 1]$ выполняется неравенство Йенсена:

$$\psi(\lambda \boldsymbol{\xi}_1 + (1 - \lambda) \boldsymbol{\xi}_2) \leq \lambda \psi(\boldsymbol{\xi}_1) + (1 - \lambda) \psi(\boldsymbol{\xi}_2). \quad (1.7)$$

Ключевые условия ICNN [7]: (i) поэлементно выпуклая, монотонно неубывающая активация φ ; (ii) $\mathbf{W}_z^{(\ell)} \geq 0$ для всех слоёв (только на связях $z \rightarrow z$; $\mathbf{W}_x^{(\ell)}, \mathbf{b}^{(\ell)}$ без ограничений по знаку); (iii) каждый слой имеет прямую аффинную связь с входом $\boldsymbol{\xi}$: $z^{(\ell+1)} = \varphi(\mathbf{W}_z^{(\ell)} z^{(\ell)} + \mathbf{W}_x^{(\ell)} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}^{(\ell)})$; (iv) скалярный выход как $a^\top z^{(L)} + c$ с $a \geq 0$ (или ещё один слой φ).

Шаг 1. Однослойный ICNN и выбор активации. Рассмотрим однослойный вариант ICNN (с одним скрытым слоем) для аппроксимации $\psi(\boldsymbol{\xi})$:

$$s = \mathbf{W}_1 \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}_1, \quad z = \varphi_\beta(s), \quad \tilde{\psi} = \mathbf{W}_2^\top z + b_2, \quad \mathbf{W}_2 \geq 0. \quad (1.8)$$

$$\varphi_\beta(x) = \frac{\text{softplus}(\beta x)}{\beta}, \quad (1.9)$$

Здесь φ_β — выпуклая неубывающая функция активации [8], которая гладко аппроксимирует ReLU и при конечных β является строго выпуклой; $\varphi_\infty(x) = \max(0, x)$. Условие $\mathbf{W}_2 \geq 0$ сохраняет выпуклость линейной комбинации. Размерности: $\mathbf{W}_1 \in \mathbb{R}^{h \times 3}$, $\mathbf{b}_1 \in \mathbb{R}^h$, $\mathbf{W}_2 \in \mathbb{R}_{\geq 0}^h$, h — размерность скрытого слоя.

Шаг 2. Центрирование энергии ψ в естественном состоянии. Для выполнения условия $\psi(\mathbf{0}) = 0$ центрируем энергию, вычитая значение нелинейной части при $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$:

$$z_0 = \varphi_\beta(\mathbf{b}_1), \quad \psi(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{W}_2^\top(z - z_0), \quad (b_2 \equiv 0). \quad (1.10)$$

Тогда $\psi(\mathbf{0}) = 0$. Поскольку z_0 не зависит от $\boldsymbol{\xi}$, градиент $\partial\psi/\partial\boldsymbol{\xi}$ и гессиан $\partial^2\psi/\partial\boldsymbol{\xi}^2$ совпадают с таковыми для $\tilde{\psi}$, сохраняя выпуклость и гладкость.

Шаг 3. Центрирование отклика \mathbf{r} в естественной конфигурации. Для выполнения условия $\mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}$ обнулим линейный отклик в точке $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$:

$$\mathbf{r}_0 := \left. \frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\xi}} \right|_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{0}}, \quad \psi_{\text{phys}}(\boldsymbol{\xi}) = \psi(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{r}_0^\top \boldsymbol{\xi}. \quad (1.11)$$

Тогда $\psi_{\text{phys}}(\mathbf{0}) = 0$ и $\mathbf{r}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, а по цепному правилу (1.2) получаем $\mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}$. Вычитание линейного члена не меняет гессиана и сохраняет выпуклость. Так как $\mathbf{r}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, точка $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$ является минимумом ψ_{phys} , и значит $\psi_{\text{phys}} \geq 0$.

После получения ψ_{phys} автоматически вычисляются $\partial\psi/\partial\boldsymbol{\xi}$ средствами autodiff, реализованными в современных библиотеках для машинного обучения [9], [10], [11], после чего тензор напряжений \mathbf{S} находится по формуле (1.3) с использованием связи $\psi(\mathbf{C}) = \psi(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{C}))$.

Центрирование ψ_{phys} и \mathbf{r} в естественном состоянии дает возможность гарантирования выполнения (1.5) и позволяет избежать дополнительных ограничений на параметры сети

Аналитические выражения для производных энергии

Градиент энергии деформации

Аналитическое дифференцирование функции энергии по переменным $\boldsymbol{\xi}$ даёт выражение для градиента:

$$\mathbf{r} = \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \psi_{\text{phys}} = \mathbf{W}_1^T (\mathbf{W}_2 \odot \sigma(\beta(\mathbf{W}_1 \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}_1))) - \mathbf{r}_0, \quad (1.12)$$

где $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ — сигмоида, а операция \odot обозначает поэлементное произведение (Hadamard product). Данное выражение демонстрирует, что градиент энергии является линейной комбинацией строк матрицы \mathbf{W}_1^T с весами, определяемыми произведением выходных весов \mathbf{W}_2 и значений функции активации $\sigma(\beta(\mathbf{W}_1 \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}_1))$.

Гессиан энергии деформации

Вторые производные энергии по переменным $\boldsymbol{\xi}$ определяют гессиан, который

имеет следующую аналитическую форму:

$$H_{ij} = \sum_h \sigma'_h W_{2,h} W_{h,i} W_{h,j}, \quad (1.13)$$

где $\sigma' = \beta \sigma(1 - \sigma)$ - производная сигмоиды, $\sigma = \text{sigmoid}(\beta s)$, а $s = \mathbf{W}_1 \xi + \mathbf{b}_1$.

Материальная устойчивость и положительная определённость

Из строгой выпуклости $\psi(\xi)$ следует положительная определённость гессиана:

$$\mathbf{H} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} > 0, \quad (1.14)$$

что обеспечивает положительную определённость касательных модулей упругости $\mathbb{C} = \partial^2 \psi / \partial \mathbf{C}^2$ через цепное правило дифференцирования. Это свойство важно для численной стабильности конечно-элементных расчётов, поскольку на практике улучшает сходимость метода Ньютона и отсутствие сингулярностей в матрице жёсткости.

Архитектура CLaNN: однослойная ICNN

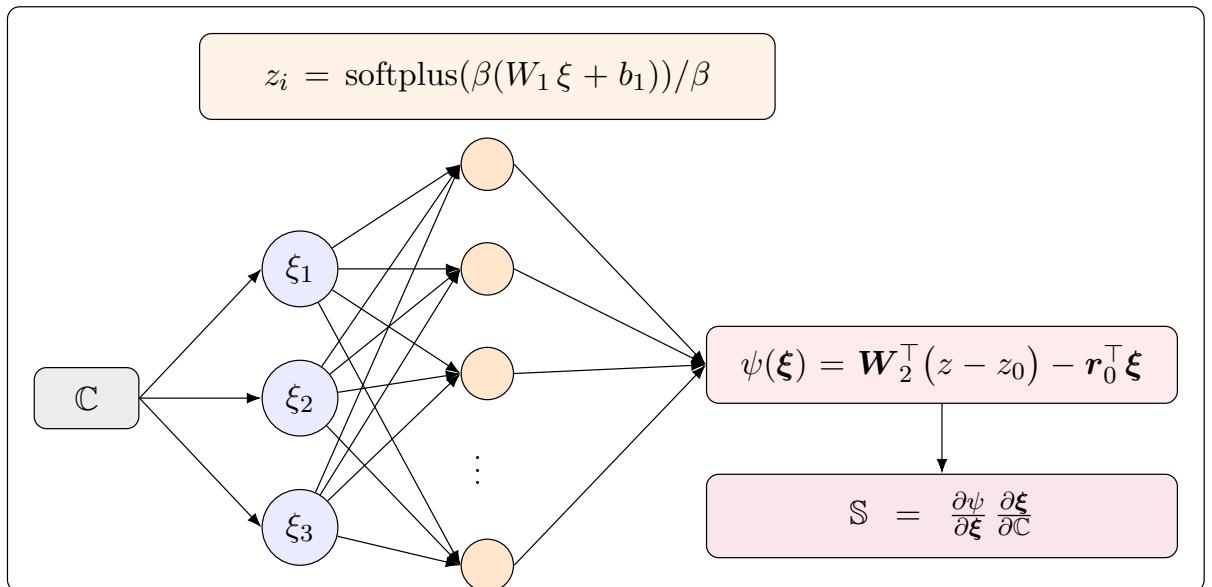


Рис. 1.1. Схема архитектуры CLaNN.

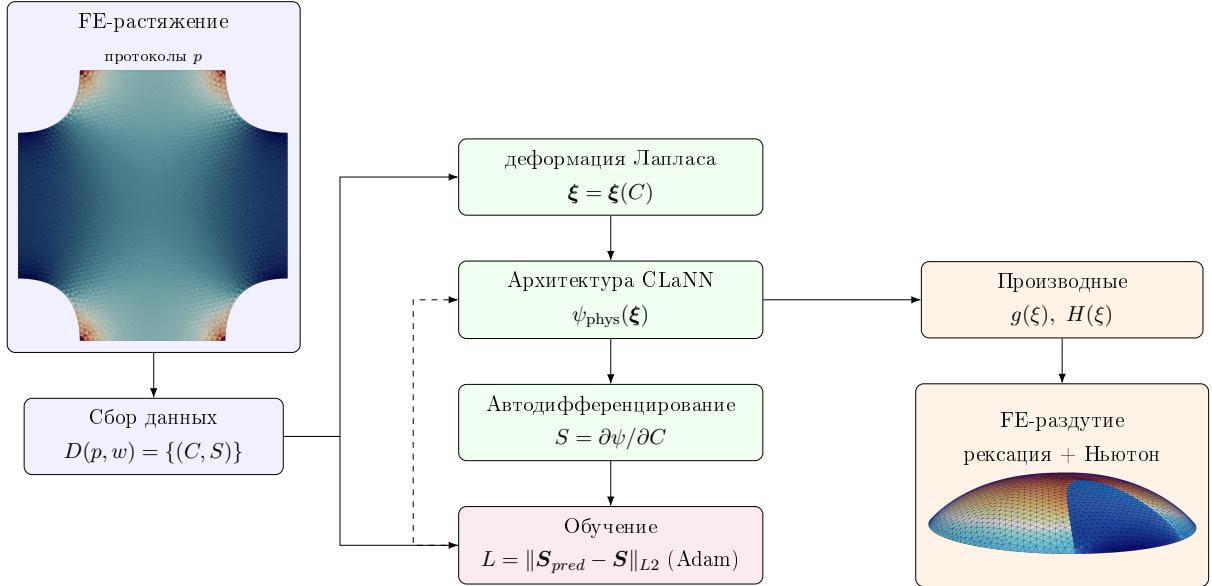


Рис. 1.2. График с крестом нечитаемый . Схема вычислительного контура CLaNN.

Такое построение архитектуры CLaNN обеспечивает выполнение всех необходимых физических свойств гиперупругой модели: **термодинамическая корректность** достигается через строгое соблюдение соотношения (1.2), что гарантирует консервативность напряжений $\oint \mathbf{S} : d\mathbf{C} = 0$ и согласованность с законами термодинамики; **материальная устойчивость** обеспечивается и существенно улучшается за счёт строгой выпуклости функции энергии $\psi(\xi)$, гарантированной архитектурой ICNN ($\mathbf{W}_2 \geq 0$, выпуклая неубывающая активация); **объективность** автоматически выполняется благодаря параметризации через тензор Коши-Грина $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$, обеспечивая инвариантность относительно поворотов и симметрию напряжений; **строгая неотрицательность и коэрцитивность энергии** обеспечиваются архитектурной калибровкой $\psi_{\text{phys}}(\xi) = \mathbf{W}_2^\top(z - z_0) - \mathbf{r}_0^\top \xi$, что даёт $\psi_{\text{phys}}(\mathbf{0}) = 0$, $\psi_{\text{phys}}(\xi) > 0$ при $\xi \neq \mathbf{0}$ и $\psi_{\text{phys}}(\xi) \rightarrow \infty$ при $\|\xi\| \rightarrow \infty$; наконец, **физические ограничения** (1.6) обеспечиваются архитектурой сети CLaNN: монотонные, выпуклые функции активации, неотрицательные весовые коэффициенты, центрирование энергии деформации ψ и отклика \mathbf{r} .

1.5 Виртуальный эксперимент

Для обучения и тестирования CLaNN мы использовали синтетические данные двухосного растяжения и раздувания гиперупругой мембранны соответственно. Обучение модели проводилось на численных экспериментальных данных, полученных при двухосном растяжении образца с геометрией "мальтийский крест" и толщиной $H = 0.53$ мм (Рисунок 1.3) методом гиперупругой узловой силы [12]. Материал мем-

бранны задавался неогуковской моделью [13]:

$$\tilde{\psi} = \frac{\mu H(X)}{2} (I_1 + J^{-2} - 3), \quad I_1 = e^{2\xi_1} (1 + \xi_3^2) + e^{2\xi_2}, \quad J = e^{\xi_1 + \xi_2} \quad (1.15)$$

с $\mu = 0.43 \cdot 10^6$ Па.

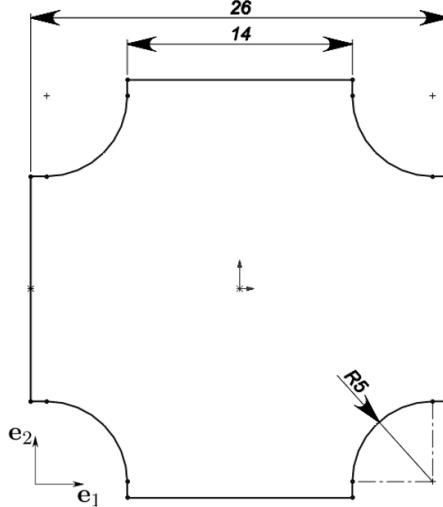


Рис. 1.3. Размеры образца биоматериала в форме мальтийского креста. Радиус вырезов одинаков для всех вырезов

Схема нагружения образца показана на рисунке 1.3, где $w_i \in [0, 1]$, $i \in \{1, 4\}$ представляет собой долю от заданного максимального смещения u_{max} для i -го плеча: $w_i = 0$ соответствует неподвижному плечу, а $w_i = 1$ — соответствует плечу, чьё положение было сдвинуто и фиксировано на расстояние u_{max} . Изменяя w_i , можно получить различные варианты двухосного нагружения. В наших виртуальных экспериментах мы последовательно смещаем плечи с приращением Δs . Смещение $w_i \cdot n \cdot \Delta s$ прикладывается к i -му плечу на n -м шаге, где $n = 1, \dots, N$, $N = u_{max}/\Delta s$ — количество шагов. Метод гиперупругой узловой силы применялся к изначально плоской квазиоднородной неструктурированной триангуляции с шагом сетки $h = 0.5$ мм и размером 5404 треугольников. Максимальное смещение плеча $u_{max} = 2$ мм и $\Delta s = 0.2$ мм. На каждом шаге извлекались \mathbb{C}, \mathbb{S} для всех треугольников, принадлежащих выбранной области наблюдения.

Наш предлагаемый тестовый протокол предполагает девять экспериментов:

№	w_1	w_2	w_3	w_4
1	1	1	1	1
2	1	0.75	1	0.75
3	0.75	1	0.75	1
4	1	0.5	1	0.5
5	0.5	1	0.5	1
6	1	1/3	1	1/3
7	1/3	1	1/3	1
8	1	0	1	0
9	0	1	0	1

Таблица 1.1. Протоколы тестовых экспериментов

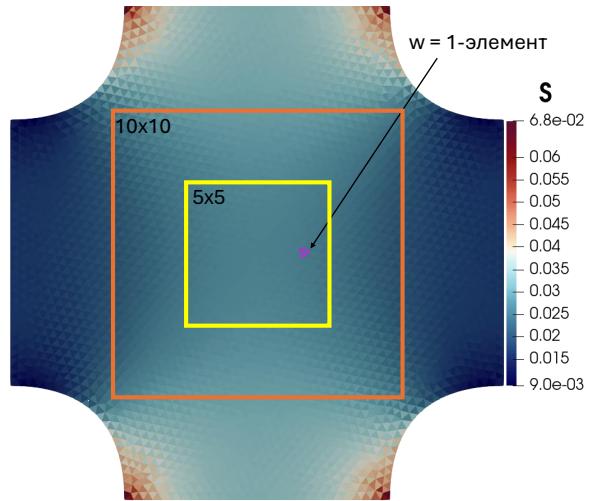


Рис. 1.4. Поле напряжения \mathbf{S} деформированной мембраны с геометрией "мальтийский крест" с различными окнами наблюдения w .

Правила отбора данных

Центральное окно w . Окно задаётся в исходной конфигурации Ω_0 как центральная область вокруг геометрического центра образца, согласованная с осями расчётной сетки. Для $w = 5 \times 5$ мм и $w = 10 \times 10$ мм берётся квадрат со сторонами 5 и 10 мм соответственно, центрированный в центре образца; для $w = \text{всё поле}$ — вся область Ω_0 . Для $w = 1\text{-элемент}$ берётся единственный центральный треугольник (ячейка с минимальным номером на вычислительной сетке для окна 5x5 мм Ω_0 как показано на рисунке 1.4). Наблюдения включают все треугольники, барицентры которых \mathbf{X}_T лежат внутри выбранного окна $\mathcal{W}_w \subset \Omega_0$.

Состав наблюдений (данные). На каждом шаге нагружения $n = 1, \dots, N$ и для каждого треугольника $T \in \mathcal{T}_w$ (ячейки, попавшие в окно) фиксируется пара $(\mathbb{C}_T^{(n)}, \mathbb{S}_T^{(n)})$, где \mathbb{C} — правый тензор Коши–Грина, \mathbb{S} — второй тензор Пиолы–Кирхгофа. Единицы: размеры окна — мм; \mathbb{C} — безразмерен; \mathbb{S} — МПа. При этом количество элементов сетки в окне наблюдения $|\mathcal{T}_w|$ для различных окон различно: 1 для $w = 1\text{-элемент}$, 252 для $w = 5 \times 5$ мм, 954 для $w = 10 \times 10$ мм и 5404 для $w = \text{всё поле}$.

Формирование выборок. Для фиксированных (p, w) совокупность всех пар $(\mathbb{C}_T^{(n)}, \mathbb{S}_T^{(n)})$ образует базовый набор $D(p, w)$, из которого формируются разбиения $D_{\text{tr}}(p, w)$ и $D_{\text{val}}(p, w)$. Для заданных протокола p (см. табл. 1.1) и окна центральной области образца $w \in \{1\text{-элемент}, 5 \times 5 \text{ мм}, 10 \times 10 \text{ мм}, \text{всё поле}\}$ обозначим

$$D_{\text{tr}} \equiv D_{\text{tr}}(p, w), \quad D_{\text{val}} \equiv D_{\text{val}}(p, w),$$

где D_{tr} — обучающая, D_{val} — валидационная выборки.

Например, $|D(\{1..10\}, 1\text{-элемент})| = 90$ точек данных правого тензора деформаций Коши-Грина \mathbb{C} и второго тензора напряжений Пиолы-Кирхгофа \mathbb{S} (Рисунок 1.5).

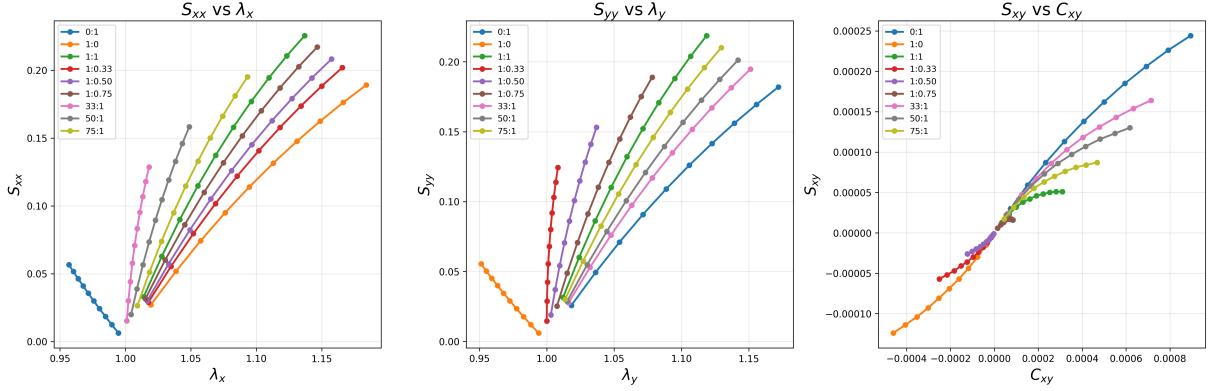


Рис. 1.5. Обучающий набор данных

Так как мы собираем данные из одного центрального элемента сетки, то растягивающие компоненты xx, yy тензоров деформации \mathbb{C} и напряжения \mathbb{S} имеют значения на 2-3 порядка большие чем сдвиговые компоненты xy .

Метрики и критерии качества

Для количественной оценки качества предсказаний используем интегральные и точечные метрики, согласующиеся с энергетической нормой из вариационной постановки задач упругости (см., например, [13–15]).

Коэффициент детерминации R^2 .

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (1.16)$$

где y_i — экспериментальные значения, \hat{y}_i — предсказания модели, \bar{y} — среднее экспериментальных значений, n — число точек. Назначение: удобно сравнивать кривые нагружения; даёт нормированную меру согласия по траекториям.

Точечная относительная ошибка.

$$\epsilon = \frac{\|\mathbb{S} - \mathbb{S}_{\text{ref}}\|}{\|\mathbb{S}_{\text{ref}}\|}. \quad (1.17)$$

P1-ошибка [16] — комбинация абсолютной и относительной ошибок, чувствительная к малым значениям:

$$\epsilon_{\text{P1}} = \frac{\|\mathbb{S} - \mathbb{S}_{\text{ref}}\|}{s_0 + \|\mathbb{S}_{\text{ref}}\|}, \quad s_0 = \max(\mathbb{S}_{\text{pred}}). \quad (1.18)$$

Абсолютная интегральная ошибка (L2 по сетке) для напряжений

(Фробениус-норма).

$$\|e\|_{L^2} = \left(\sum_K \overline{\|\mathbb{S}_{\text{ref}} - \mathbb{S}_{\text{pred}}\|_F^2}^K |K| \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.19)$$

где $|K|$ — мера ячейки (объём/площадь/длина). Для ячеекных данных усреднение по ячейке не требуется:

$$\|e\|_{L^2} = \left(\sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K} - \mathbb{S}_{\text{pred},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.20)$$

Назначение: сворачивает поле ошибки в скаляр и инвариантна к измельчению сетки (при фиксированном поле) [17–19].

Относительная интегральная ошибка.

$$\|e\|_{L^2, \text{rel}} = \frac{\left(\sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K} - \mathbb{S}_{\text{pred},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (1.21)$$

Гиперпараметры оптимизации:

- Скорость обучения (learning rate): 0.001
- Размер батча (batch size): 4 при обучении на 90 точек данных и 128 для остальных обучающих наборов данных.
- Архитектура: 16 нейронов на скрытом слое
- Сглаживающий параметр β : 10

Результаты обучения: Процесс оптимизации показал высокую эффективность: ошибка аппроксимации снизилась на 5 порядков за менее чем 5000 эпох (рисунок 1.6), что демонстрирует как качество предложенной архитектуры, так и корректность выбора гиперпараметров. Столь быстрая сходимость обусловлена строгой выпуклостью функции энергии, что обеспечивает единственность минимума и отсутствие локальных минимумов в пространстве параметров.

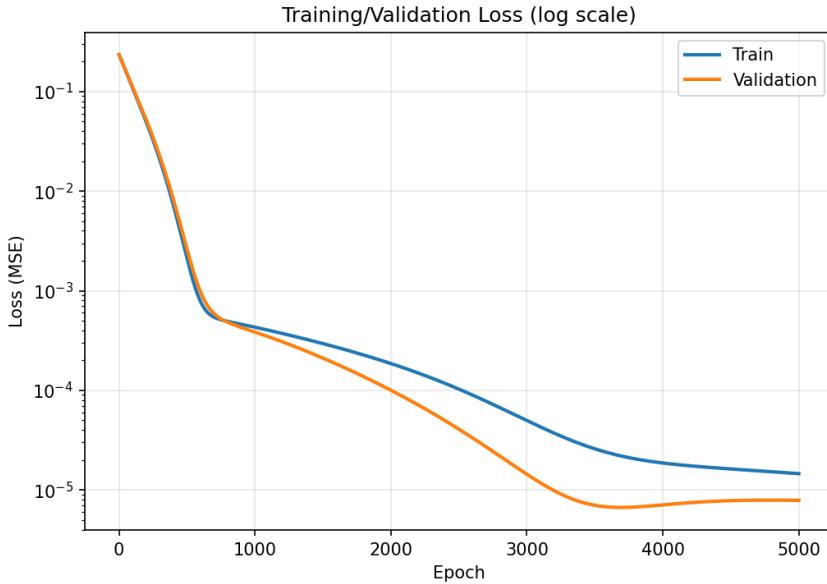


Рис. 1.6. Кривая функции потерь при обучении на 90 точках данных

1.5.1 Интерполяция и экстраполяция кривых нагрузления

Сначала мы проверили, как модель CLaNN интерполирует и экстраполирует кривые нагрузления, используя выборки $D_{\text{tr}}(p, w)$ и $D_{\text{val}}(p, w)$ для заданного окна наблюдения w . Для оценки качества использовали коэффициент детерминации R^2 (см. раздел 1.5, формулу (1.16)). Метрику качества фиксируем как:

$$R_\alpha^2(D_{\text{val}}), \quad \alpha \in \{xx, yy, xy\}.$$

Интерполяция.

Для тестирования способности архитектуры CLaNN к интерполяции кривых нагрузления мы использовали данные из 10 точек кривой нагрузления равнодвухосного растяжения мембранны $p = 1$, окно наблюдения $w = 1$ -элемент:

$$\begin{aligned} D_{in} &= D(p=1, w=1\text{-элемент}), n = 1..10, \\ D_{\text{tr}} &= \{\forall (\mathbb{C}^{n_{tr}}, \mathbb{S}^{n_{tr}}) \in D_{in} \mid n_{tr} = \{1, 5, 10\}\}, \\ D_{\text{val}} &= \{\forall (\mathbb{C}^{n_{val}}, \mathbb{S}^{n_{val}}) \in D_{in} \mid n_{val} = n \\ &n_{tr}\}. \end{aligned}$$

CLaNN показал высокую точность интерполяции кривой нагрузления равнодвухосного растяжения мембранны для растягивающих компонент $R_{xx}^2 = 0.999$, $R_{yy}^2 = 0.999$, и отсутствие достоверного предсказания сдвиговых компонент $R_{xy}^2 = 0$ (рисунок 1.7).

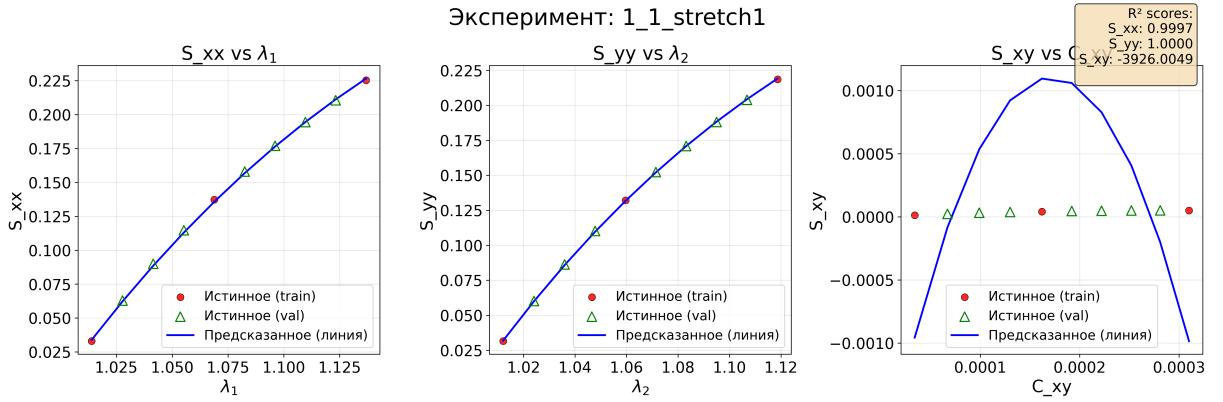


Рис. 1.7. Кривая нагружения для равнодвухосного растяжения

Экстраполяция.

Для проверки способности CLaNN к экстраполяции кривых нагружения использовали обучение на равнодвухосном растяжении ($p = 1$) и валидацию на неравнодвухосном ($p = 9$), окно наблюдения $w = 1$ -элемент:

$$D_{\text{tr}} = D(p=1, w=1\text{-элемент}), n = 1..10,$$

$$D_{\text{val}} = D(p=9, w=1\text{-элемент}), n = 1..10,$$

CLaNN показал высокую точность экстраполяции для растягивающих компонент $R^2_{xx} = 0.993$, $R^2_{yy} = 1.0$, и отсутствие достоверного предсказания сдвиговой компоненты $R^2_{xy} = 0$ (рисунок 1.8).

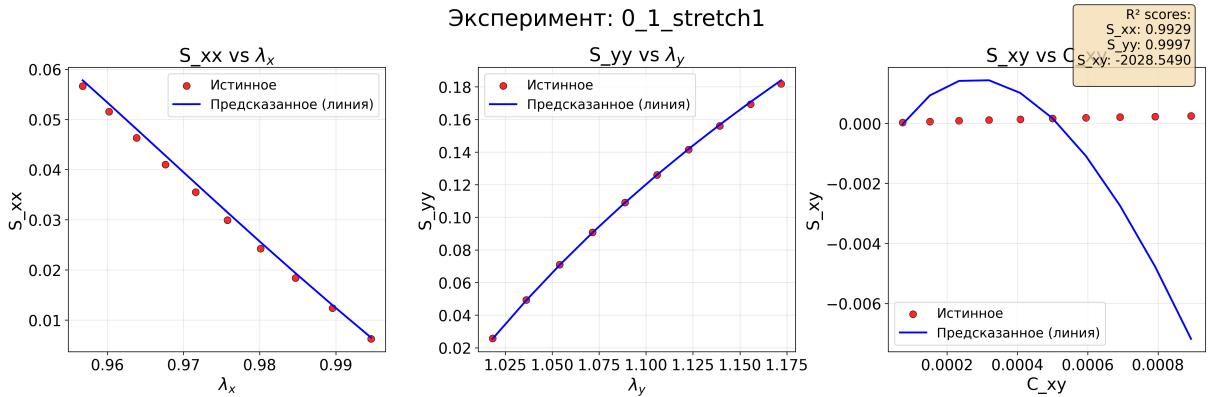


Рис. 1.8. Кривая нагружения для неравнодвухосного растяжения

Таким образом, CLaNN способен интерполировать и экстраполировать кривые нагружения с высокой точностью, что свидетельствует о его способности к обобщению на новые данные. Однако, не справляется с предсказанием сдвиговых компонент \mathbb{S}_{xy} , что может быть связано с тем, что данные для сдвиговых компонент не достаточно большие.

Проблему недостатка данных для обучения модели CLaNN на сдвиговых компонентах деформации/напряжения мы обсудим дальше.

1.5.2 Раздутие мембраны

Для проверки способности CLaNN, мы поставили численный эксперимент по раздутию круглой мембранны радиусом 25 мм. Мембрана закреплена по внешнему контуру и подвергается равномерному растяжению по всей поверхности при заданном давлении 5 МПа. Как референс мы использовали результаты численного эксперимента с использованием гиперупругой модели Нео-Гука с тем же параметром сдвига, что и при генерации данных для обучения CLaNN.

Мы использовали два поля толщин элементов T : 1) с гомогенным полем толщины 0.54 мм. 2) с гетерогенным полем толщины, где в окружности высекаются два параболических сектора с толщиной 2 мм и остальной части мембранны 0.54 мм (Рисунок 1.9).

В качестве точечной метрики используем относительную ошибку (см. раздел 1.5, формулу (1.17)); для сравнения сдвиговых компонент — Р1-ошибку [16] (см. формулу (1.18)).

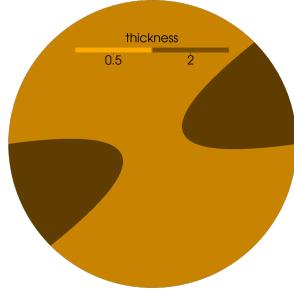


Рис. 1.9. Гетерогенное поле толщин элементов T круглой мембранны.

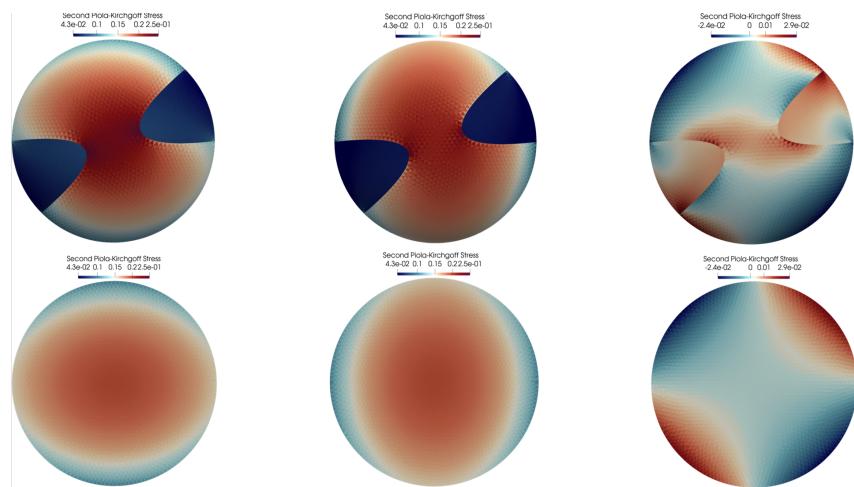


Рис. 1.10. Поле напряжений \mathbb{S} круглой мембранны (пример результата численного эксперимента).

В результате численного эксперимента на раздутие мембранны с гиперупругим определяющим соотношением CLaNN, используя набор данных $D(\{1..10\}, w = 1\text{-элемент})$ для обучения, мы получили поле напряжений 2 тензора Пиолы-Кирхгофа

\mathbb{S} для гомогенной и гетерогенной мембраны по толщине и сравнили его с референсными значениями (Рисунок 1.10) и построили поле ошибок ϵ и ϵ_{P1} (Рисунок 1.11). Сдвиговая компонента напряжений \mathbb{S}_{xy} показывает наибольшую ошибку для гетерогенной мембраны, что может быть связано с тем, что данные для сдвиговых компонент не достаточно большие. Поэтому мы последовательно расширяли набор данных для обучения до $D(\{1..10\}, w = 5 \times 5)$, $D(\{1..10\}, w = 10 \times 10)$, $D(\{1..10\}, w = \text{все поле})$, и построили зависимость интегральной ошибки $\|e\|_{L^2}$ (Формула 1.20) и $\|e\|_{L^2, \text{rel}}$ (Формула 1.21) поля напряжения \mathbb{S} от размера окна наблюдения w (Рисунок 1.12). В итоге абсолютная интегральная ошибка $\|e\|_{L^2}$ для гетерогенной мембраны уменьшается с увеличением размера окна наблюдения w , это может быть связано с тем, что при увеличении размера окна наблюдения мы учитываем больше данных для обучения, в том числе данных для сдвиговых компонент напряжений, например, при отборе ячеек из области ближе к углам квадрата, в который вписана мембрана, сдвиговые компоненты напряжений в этой области вырастают на 1-2 порядка.

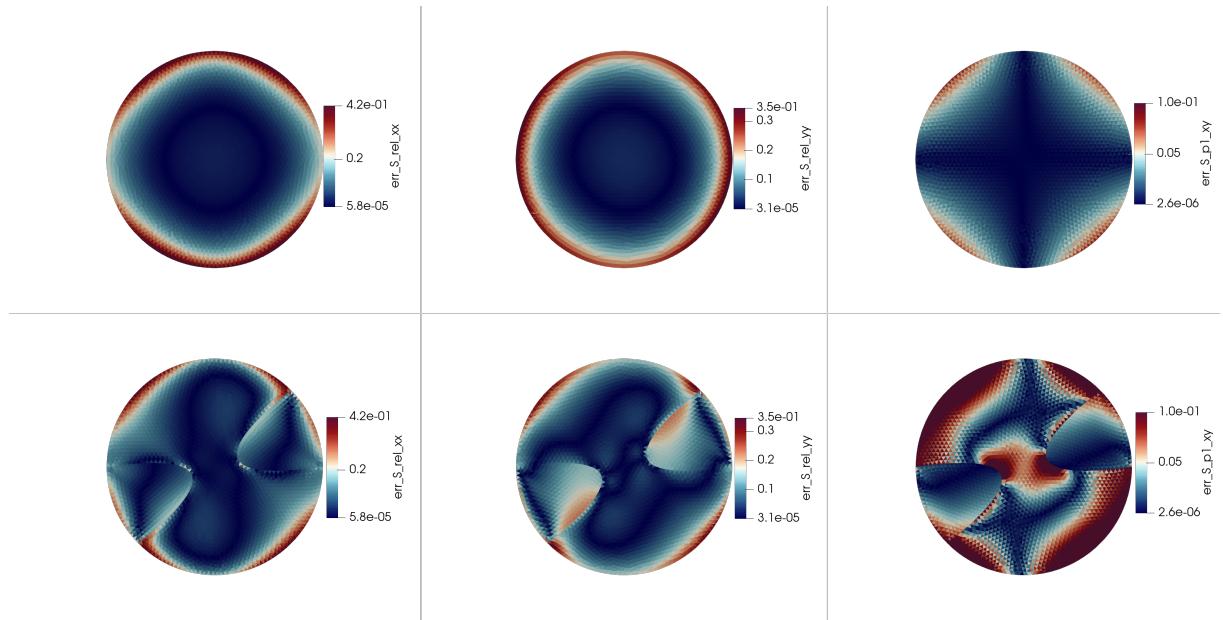


Рис. 1.11. Поле ошибок между предсказанными и эталонными значениями напряжений.

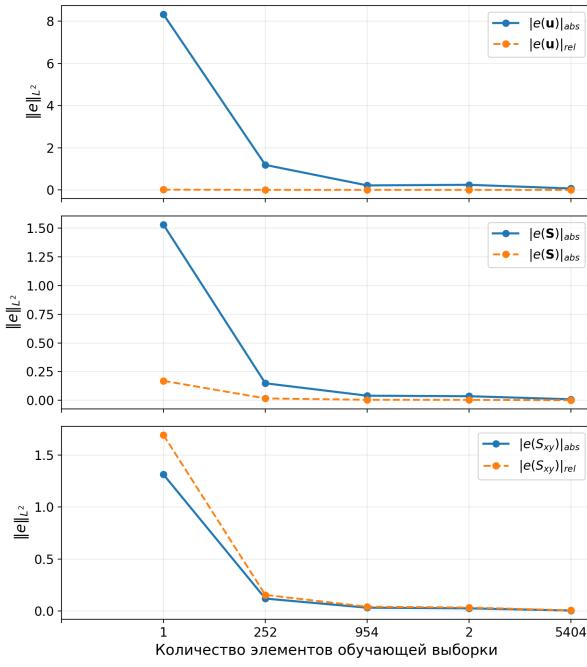


Рис. 1.12. Зависимость интегральной ошибки $\|e\|_{L^2}$ и $\|e\|_{L^2, \text{rel}}$ от количества элементов в окне наблюдения размера w .

1.5.3 Сравнение вычислительной эффективности CLaNN

Благодаря выпуклости потенциальной энергии деформации $\psi(\xi)$ в CLaNN задача стационарного равновесия формулируется как гладкая выпуклая минимизация. Это позволяет использовать градиентные и второрядковые методы со строгими гарантиями сходимости (квазиньютон, Ньютона и тд) и предсказуемой сложностью до заданной точности [20–23]. В окрестности минимума сильная выпуклость и липшицевость гессиана обеспечивают локально квадратичную сходимость Ньютона, а квазиньютоновские схемы (L-BFGS) дают сверхлинейные скорости [22].

В таблично-заданных/локально-интерполяционных DD-моделях (в т.ч. k-NN, IDW) выпуклость энергии, как правило, не гарантируется, а функция отклика может быть негладкой. Это приводит к невыпуклой постановке с множеством стационарных точек и отсутствием глобальных гарантий у классических квазиньютоновских методов. На практике применяются квазистатические/релаксационные стратегии: (добавить описание) [24, 25]. Такие методы устойчивы, но, как правило, требуют существенно большего числа шагов нагружения и внутренних итераций (а также повторяющихся k-NN/IDW-запросов), что приводит к росту времени расчёта.

Мы сравнили время решения для CLaNN, классической гиперупругой модели Нео–Гука и DD-модели мембранны, описанной в [1]. Задача: раздувание закреплённой круглой мембранны, $R=25$ мм, равномерное давление, две конфигурации по толщине T (гомогенная и гетерогенная; см. рис. 1.9). Для CLaNN обучаем на наборе данных $D(\{1..10\}, w=1\text{-элемент})$; для сравнения используем DD-модель на основе kNN и IDW, которые работает в пространстве деформаций Лапласа и функций откли-

ка (ξ, r) , которые были вычислены из $D(\{1..10\}, w=10 \times 10)$ [1]. Численное решение выполняем в одной и той же КЭ-постановке для мембранный задачи. Все варианты останавливаем по одинаковым нормам допускам по невязке.

Таблица 1.2. Время расчёта (сек) на задаче раздувания: гомогенная vs гетерогенная толщина

Метод	Гомогенная	Гетерогенная
CLaNN	7	16
Neo-Hooke	13	16
kNN	993	–

На одинаковой сетке и допусках CLaNN достигает решения сравнимым числом глобальных итераций с Нео-Гуком (за счёт выпуклости и корректной кривизны энергии в ICNN), но большим итоговым вычислительным временем, что связано с низкой вычислительной эффективностью взаимодействия экспортируемой модели CLaNN и мембранным решателя [1]. Метод CLaNN существенно опережает DD-модель по времени расчета за счёт отсутствия внешних проекций на данные и дорогих k-NN/IDW-запросов на каждой итерации. Также стоит отметить невозможность расчета DD-модели на гетерогенной толщине без линейной интерполяции данных вблизи нуля, что может происходить из-за нехватки данных для этой области деформаций.

1.6 Заключение

В работе предложена физически информированная архитектура CLaNN для гиперупругих материалов, основанная на выпуклой потенциальной энергии деформации и лог-лапласовой параметризации кинематики.

Архитектура обеспечивает термодинамическую согласованность; благодаря выпуклости задача решается как гладкая выпуклая минимизация с предсказуемой сходимостью градиентных и квазиньютоновских методов. При этом в архитектуре для вычисления тензора напряжений явно не используется информация о сжимаемости/несжимаемости изотропности/анизотропности материала, что позволяет использовать CLaNN для решения задач с различными типами материалов.

В тестах интерполяции CLaNN достигает малых ошибок при наличии репрезентативных обучающих данных; в режиме экстраполяции сохраняет устойчивость и физическую правдоподобность отклика, тогда как локально-интерполяционные DD-модели (k-NN/IDW) проявляют артефакты за пределами окна обучения.

На численных экспериментах раздувания закреплённой круглой мембранны (гомогенная и гетерогенная толщина) CLaNN корректно воспроизводит поля перемещений и напряжений и демонстрирует быстрое, предсказуемое сходимостное поведение в единой КЭ-постановке для всех сравниваемых моделей.

По вычислительной эффективности CLaNN превосходит kNN-основанную DD-модель: на гомогенной задаче выигрыш составляет порядка $\times 1.9$ за счёт от-

существия дорогостоящих k–NN/IDW–запросов и внешних проекций на данные на каждой итерации. Стоит отметить, что полученная величина выигрыша может быть и выше за счет оптимизации взаимодействия решателя и CLaNN, а также подбора оптимальных гиперпараметров. На гетерогенной толщине CLaNN сохраняет работоспособность без специальных эвристик, тогда как DD–модель требует дополнительной регуляризации и/или интерполяции данных в окрестности малых деформаций. Также из-за отсутствия критерия остановки расчета по норме невязки у релаксационных методов решения задачи равновесия может привести к сложноценому увеличению времени расчета по сравнения с ньютоновскими методами, с которыми позволяет работать CLaNN.

В итоге CLaNN объединяет механическую корректность и эффективность нейросетей: выпуклая энергия и дифференцируемость обеспечивают устойчивое решение вариационных задач и ускоряют расчёт по сравнению с классическими DD–подходами, а также высокую способность к аппроксимации гиперупругих материалов на малых выборках данных. Дальнейшие направления: протестировать анизотропные материалы и реальные экспериментальные данные.

Приложение А

Эквивалентность QR-факторизации \mathbf{F} и разложения Холецкого $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$ для вычисления логарифмических координат ξ

A.1 Постановка и обозначения

Рассматривается двумерная гиперупругая кинематика. Пусть:

- $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ — градиент деформации, $\det \mathbf{F} > 0$,
- $\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$ — правый тензор Коши–Грина (симметричный положительно определённый, SPD),
- Холецкий: $\mathbf{C} = \tilde{\mathbf{F}}^\top \tilde{\mathbf{F}}$, где $\tilde{\mathbf{F}}$ — верхнетреугольная и $\text{diag}(\tilde{\mathbf{F}}) > 0$,
- Логарифмические координаты: $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\ln u_{11}, \ln u_{22}, u_{12}/u_{11})$.

Цель: показать, что при наличии \mathbf{F} можно заменить вычисление $\tilde{\mathbf{F}} = \text{chol}(\mathbf{C})$ на $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{R}$ из тонкого $\text{QR}(\mathbf{F}) = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ (с $\text{diag}(\mathbf{R}) > 0$), и получить те же ξ .

A.2 Теорема (эквивалентность U и R)

Пусть $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ невырождённая ($\det \mathbf{F} > 0$). Рассмотрим тонкую QR-факторизацию

$$\mathbf{F} = \mathbf{Q}\mathbf{R}, \quad (\text{A.1})$$

где $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ — ортогональная ($\mathbf{Q}^\top \mathbf{Q} = \mathbf{I}$), $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ — верхнетреугольная. Выберем стандартную нормализацию $\text{diag}(\mathbf{R}) > 0$. Тогда \mathbf{R} совпадает с фактором Холецкого для \mathbf{C} :

$$\mathbf{R} = \text{chol}(\mathbf{C}), \quad \text{с} \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}. \quad (\text{A.2})$$

Доказательство.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^\top \mathbf{F} = (\mathbf{Q}\mathbf{R})^\top (\mathbf{Q}\mathbf{R}) = \mathbf{R}^\top \mathbf{Q}^\top \mathbf{Q}\mathbf{R} = \mathbf{R}^\top \mathbf{R}. \quad (\text{A.3})$$

Так как \mathbf{C} — SPD и \mathbf{R} — верхнетреугольная с положительной диагональю, то представление $\mathbf{C} = \mathbf{R}^\top \mathbf{R}$ единственное. По единственности фактора Холецкого (с $\text{diag} > 0$) следует $\mathbf{R} = \text{chol}(\mathbf{C})$. \square

Следствие. Логарифмические координаты $\boldsymbol{\xi}$, определённые через $\tilde{\mathbf{F}} = \text{chol}(\mathbf{C})$, можно эквивалентно вычислять из $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{R}$ в $\text{QR}(\mathbf{F})$, при условии $\text{diag}(\mathbf{R}) > 0$.

A.3 Координаты $\boldsymbol{\xi}$ через $\tilde{\mathbf{F}}$

$$\text{Для } \tilde{\mathbf{F}} = \begin{bmatrix} \tilde{f}_{11} & \tilde{f}_{12} \\ 0 & \tilde{f}_{22} \end{bmatrix}, \text{diag}(\tilde{\mathbf{F}}) > 0,$$

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\ln \tilde{f}_{11}, \ln \tilde{f}_{22}, \tilde{f}_{12}/\tilde{f}_{11}). \quad (\text{A.4})$$

Тем самым, $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{F}) := \boldsymbol{\xi}(\mathbf{R}(\mathbf{F})) = \boldsymbol{\xi}(\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{C}))$.

Список литературы

- [1] Victoria Salamatova and Alexey Liogky. Interpretable data-driven modeling of hyperelastic membranes. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 39(11):e3757, 2023.
- [2] Clifford Truesdell. Historical introit the origins of rational thermodynamics. In *Rational thermodynamics*, pages 1–48. Springer, 1984.
- [3] Clifford Truesdell and Walter Noll. *The non-linear field theories of mechanics*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [4] Stuart S Antman. *Nonlinear problems of elasticity*. Springer, 2005.
- [5] George Green. On the laws of the reflection and refraction of light at the common surface of two non-crystallized media. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 7:1–24, 1839.
- [6] Gustav Kirchhoff. Ueber das gleichgewicht und die bewegung einer elastischen scheibe. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 40:51–88, 1850.
- [7] Brandon Amos, Lei Xu, and J Zico Kolter. Input convex neural networks. In *International conference on machine learning*, pages 146–155. PMLR, 2017.
- [8] Charles Dugas, Yoshua Bengio, François Bélisle, Claude Nadeau, and René Garcia. Incorporating second-order functional knowledge for better option pricing. *Advances in neural information processing systems*, 13, 2001.
- [9] Adam Paszke, Sam Gross, Francisco Massa, Adam Lerer, James Bradbury, Gregory Chanan, Trevor Killeen, Zeming Lin, Natalia Gimelshein, Luca Antiga, Alban Desmaison, Andreas Kopf, Edward Yang, Zachary DeVito, Martin Raison, Alykhan Tejani, Sasank Chilamkurthy, Benoit Steiner, Lu Fang, Junjie Bai, and Soumith Chintala. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In *Advances in Neural Information Processing Systems 32*, 2019.
- [10] Martín Abadi, Paul Barham, Jianmin Chen, Zhifeng Chen, Andy Davis, Jeffrey Dean, Matthieu Devin, Sanjay Ghemawat, Geoffrey Irving, Michael Isard, Manjunath Kudlur, Josh Levenberg, Rajat Monga, Sherry Moore, Derek G Murray, Benoit Steiner, Paul Tucker, Vijay Vasudevan, Pete Warden, Martin Wicke, Yuan Yu, and

- Xiaoqiang Zheng. Tensorflow: A system for large-scale machine learning. In *12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16)*, pages 265–283. USENIX Association, 2016.
- [11] James Bradbury, Roy Frostig, Chris Hawkins, Matthew James Johnson, Chris Leary, Dougal Maclaurin, George Necula, Adam Paszke, Jake VanderPlas, Skye Wanderman-Milne, and Qiao Zhang. Jax: composable transformations of python+numpy programs. <https://github.com/google/jax>, 2018.
 - [12] Alexey Liogky and Victoria Salamatova. Data-driven anisotropic biomembrane simulation based on the laplace stretch. *Computation*, 12(3):39, 2024. doi: 10.3390/computation12030039.
 - [13] R.W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications, 1997. ISBN 978-0486696481.
 - [14] Philippe G Ciarlet. *Mathematical elasticity: Three-dimensional elasticity*, volume 1. Elsevier, 1988.
 - [15] Gerhard A Holzapfel. *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering*. John Wiley & Sons, 2000.
 - [16] Peichen Xie. P1 error: A combination of absolute and relative errors. *CoRR*, 2024.
 - [17] Susanne C. Brenner and L. Ridgway Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, volume 15 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, 3 edition, 2008. ISBN 978-0-387-75933-3.
 - [18] Mark Ainsworth and J. Tinsley Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Wiley, 2000. ISBN 978-0-471-29413-0.
 - [19] Rüdiger Verfürth. *A Posteriori Error Estimation Techniques for Finite Element Methods*, volume 37 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer, 2 edition, 2013. ISBN 978-3-642-33133-5.
 - [20] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004. ISBN 978-0521833783.
 - [21] Yurii Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*, volume 87 of *Applied Optimization*. Springer, 2004. ISBN 978-1402075537.
 - [22] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2 edition, 2006. ISBN 978-0387303031.
 - [23] A. R. Conn, N. I. M. Gould, and Ph. L. Toint. *Trust-Region Methods*. SIAM, 2000. ISBN 978-0-89871-460-9.

- [24] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data-driven computational mechanics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(32):8386–8391, 2016. doi: 10.1073/pnas.1609450113.
- [25] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 113(11):1697–1710, 2017. doi: 10.1002/nme.5716.