

# Оглавление

<b>1 Выпуклая нейронная сеть для основанной на данных симуляции гиперупругой механики с использованием меры деформации Лапласа (CLaNN)</b>	<b>2</b>
1.1 Введение . . . . .	2
1.2 Кинематика . . . . .	4
1.3 Напряжение и термодинамическая корректность . . . . .	6
1.4 Архитектура CLaNN и её производные . . . . .	8
1.5 Виртуальный эксперимент . . . . .	11
1.5.1 Интерполяция и экстраполяция кривых нагрузления . . . . .	15
1.5.2 Раздутие мембранны . . . . .	17
1.5.3 Сравнение вычислительной эффективности CLaNN . . . . .	19
1.6 Дискуссия . . . . .	20
1.7 Заключение . . . . .	22
<b>A Эквивалентность QR-факторизации <math>F</math> и разложения Холецкого <math>C = F^\top F</math> для вычисления логарифмических координат <math>\xi</math></b>	<b>23</b>
A.1 Постановка и обозначения . . . . .	23
A.2 Теорема (эквивалентность U и R) . . . . .	23
A.3 Координаты $\xi$ через $\tilde{F}$ . . . . .	24

# Глава 1

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

### 1.1 Введение

Математические модели, способные предсказывать нелинейное механическое поведение мягких материалов при больших деформациях, требуются в широком спектре инженерных отраслей – от полимерной промышленности, до робототехники и персонализированной медицины [? ? ? ]. Основой таких моделей служит нелинейная теория упругости [? ], где зависимость тензора напряжений от переменных, характеризующих кинематику материала, описывается так называемыми определяющими соотношениями, или уравнениями состояния [1]. При моделировании напряженно-деформированного состояния полимеров и биологических тканей широко распространены гиперупругие определяющие соотношения [? ]. В гиперупругой постановке постулируется существование упругого потенциала  $\psi$ , зависящего от выбранной меры деформации, который полностью описывает механическое поведение материала. При этом он должен удовлетворять ряду требований: отражать материальную симметрию, не зависеть от выбранной системы отсчета, обладать свойствами поливыпуклости [? ], что является достаточным условием существования решений краевых задач гиперупругости [? ].

Для мягких материалов предложено множество гиперупругих моделей [? ], большинство из которых удовлетворяют требованиям к материальной симметрии, объективности и поливыпуклости благодаря инвариантному подходу. Это означает, что для выбранной меры деформации задается набор инвариантов, а упругий потен-

циал является функцией этих инвариантов. Обычной практикой является использование инвариантов правых/левых тензоров деформации Коши-Грина. Для изотропных материалов упругий потенциал может быть выражен как функция от трех инвариантов правого тензора деформации Коши-Грина  $\psi = \psi_{vol}(J) + \psi_{iso}(I_1, I_2, I_3)$ , где  $J$  – якобиан, выражающий изменение объема тела при деформации,  $I_1, I_2, I_3$  – инварианты правого тензора деформации Коши-Грина. Дальнейшим расширением инвариантного подхода является введение так называемых псевдоинвариантов правого тензора Коши-Грина  $I_4, \dots, I_8$ , позволяющих описывать классы трансверсальноизотропных и ортотропных материалов. [1].

Такой подход требует априорного задания упругого потенциала аналитической функцией с параметрами, которые определяются из экспериментальных данных. Основными недостатками этого подхода являются неединственность оптимального набора параметров модели, отсутствие у инвариантов прямого физического смысла в терминах деформации [?] с вытекающим из этого требованием к натуральному эксперименту, а именно, достижение однородности деформаций и напряжений при механическом исследовании тестировании материала, субъективность выбора формы потенциала из множества построенных экспертами моделей [?].

В некоторой степени, эти недостатки устраняют конструированием наилучшей гиперупругой модели регрессионными методами из набора априорно заданных мономов на основе инвариантов [?], или редукцией обобщенных моделей на основе информационного анализа экспериментальных данных [?]. В совокупности с полно-полевыми методами оценки экспериментальных деформаций (цифровая корреляция изображений DIC [?]), методами виртуальных полей VFM [?] и inverse FE [?], это становится мощным инструментом моделирования механики материалов в рамках гиперупругости. Однако, такие подходы остаются феноменологическими и все также требуют экспертный выбор модели.

Для построения гиперупругой модели необходимо знать аналитический вид (форму) упругого потенциала, что является преимуществом, обеспечивающим возможность построения модели на основе данных. Для задания определяющих соотношений в случае гиперупругого материала, достаточно знать производные упругого потенциала по выбранной мере деформации, так называемые функции отклика [1]. С применением полнополевых методов оценки экспериментальных деформаций DIC и напряжений [?], функции отклика могут быть построены напрямую на основе экспериментальных данных, полученных при тестировании материала в широком диапазоне различных режимов деформации. Это стимулирует исследование подходов к построению гиперупругих моделей, основанных на данных [2].

В работах [3] предлагается метод прямого моделирования механики изотропных и анизотропных материалов, основанного на данных, с использованием функций отклика, основанных на физически интерпретируемой мере деформации Лапласа[?], в котором обходят проблемы инвариантной формулировки гиперупругой модели,

напрямую строя функции отклика на основе экспериментальных данных. При этом не требуются какие-либо предварительные знания о симметрии материала. Совокупность функций отклика формирует таблично-заданное определяющее соотношение. Нелинейная система алгебраических уравнений для виртуального квазистатического растяжения и раздутия материалов в этих случаях решается простым методом релаксации, где метод интерполяции обратного взвешенного расстояния находит требуемые значения функций отклика на каждой итерации в любой точке пространства деформаций Лапласа. Ограничениями такого подхода являются требования к "богатству" данных и невозможность применения градиентных методов решения нелинейных систем алгебраических уравнений в силу негладкости интерполяции таблично-заданного определяющего соотношения и отсутствия гарантий выпуклости энергии.

Параллельно с этим развиваются физически-информированные нейросетевые подходы. В частности, при использовании выпуклой по входу нейронной сети (ICNN) [4] и монотонного неубывания энергии деформации относительно инвариантов можно гарантировать поливыпуклость [5], тем самым удовлетворяя требованиям к гиперупругим потенциалам [? ]. В работе [? ] показана инвариантная архитектура физически-информированной нейронной сети, совместимая с конечно-элементными пакетами. Несмотря на интерпретируемость и термодинамическую корректность, архитектура сети включает в себя набор предположений – обобщенных структурных тензоров [? ], что фактически фиксирует класс симметрии материала.

В рамках данной работы мы предлагаем подход, который объединяет преимущества представления гиперупругой модели таблично-заданным определяющим соотношением в мерах деформаций Лапласа [6] и физически дополненных нейронных сетей на основе ICNN [4], удовлетворяющих требованиям к гиперупругим моделям механики материалов. Мы формулируем термодинамически корректный, объективный по построению, выпуклый по входу, и не требующий знаний о симметрии материала гиперупругий потенциал. Гладкость аппроксимации обеспечивает совместимость с градиентными методами решения систем нелинейных алгебраических уравнений. В сравнении с таблично-заданными определяющими соотношениями, CLaNN снимает ограничения, связанные с дискретностью аппроксимации, сохраняя интерпретируемость мер деформации и повышая устойчивость экстраполяции.

## Организация статьи

### 1.2 Кинематика

Мы рассматриваем равновесие тонкой несжимаемой изотропной гиперупругой мембранны под действием внутреннего давления. Деформация мембранны характеризуется деформацией её срединной поверхности. Исходная конфигурация срединной поверхности  $\Omega_0 \in \mathbb{R}^3$  плоская и определяется положением материальных точек

$\mathbf{X} = X_1 \mathbf{e}_1 + X_2 \mathbf{e}_2 + 0 \cdot \mathbf{e}_3$ , где  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$  — базисные векторы глобальной (фиксированной) декартовой системы координат. Соответствующие ковариантные  $\mathbf{G}_\alpha$  и контравариантные  $\mathbf{G}^\alpha$  базисные векторы для  $\Omega_0$  и вектор нормали  $\mathbf{N}$  к  $\Omega_0$  определяются соотношениями:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}_\alpha &= \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial X_\alpha} = \mathbf{e}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2; \\ \mathbf{G}^\alpha &= \frac{\partial X_\alpha}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{e}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2; \\ \mathbf{N} &= \frac{\mathbf{G}_1 \times \mathbf{G}_2}{\|\mathbf{G}_1 \times \mathbf{G}_2\|}.\end{aligned}$$

Деформация представляет собой взаимно-однозначное отображение  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$ . Текущая конфигурация срединной поверхности  $\Omega_t \in \mathbb{R}^3$  определяется радиус-векторами

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 x_i(X_1, X_2) \mathbf{e}_i, \quad (1.1)$$

где соответствующие ковариантные  $\mathbf{g}_\alpha$  и контравариантные  $\mathbf{g}^\alpha$  базисные векторы для  $\Omega_t$  определяются соотношениями:

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_\alpha &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial X_\alpha} = \frac{\partial x_1}{\partial X_\alpha} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial x_2}{\partial X_\alpha} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial x_3}{\partial X_\alpha} \mathbf{e}_3, \quad \alpha = 1, 2; \\ \mathbf{g}^\alpha &= \frac{\partial X_\alpha}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_1} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_2} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_3} \mathbf{e}_3, \quad \alpha = 1, 2; \\ \mathbf{n} &= \frac{\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2}{\|\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2\|}.\end{aligned}$$

Градиент деформации для мембраны, рассматриваемой как трёхмерная упругая структура, имеет вид [?], [?]:

$$\mathbb{F} = \mathbb{F}_{2d} + \lambda \mathbf{n} \otimes \mathbf{N}, \quad \mathbb{F}_{2d} = \sum_{\alpha=1}^2 \mathbf{g}_\alpha \otimes \mathbf{G}^\alpha, \quad \lambda = h/H.$$

Здесь  $\mathbb{F}_{2d}$  — поверхностный градиент деформации, описывающий деформации срединной поверхности мембранны,  $\lambda$  характеризует изменение толщины при деформации,  $h$  — текущая толщина,  $H$  — начальная толщина,  $\otimes$  обозначает тензорное произведение.

Поверхностные инварианты  $I_1, J$  правого тензора деформации Коши–Грина срединной поверхности  $\mathbb{C}_{2d} = \mathbb{F}_{2d}^T \mathbb{F}_{2d} = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 g_{\alpha\beta} \mathbf{G}^\alpha \otimes \mathbf{G}^\beta$  имеют вид:

$$I_1 = \text{tr}(\mathbb{C}_{2d}) = g_{\alpha\beta} G^{\alpha\beta}, \quad J = \det \mathbb{F}_{2d} = \sqrt{\det \mathbb{C}_{2d}}, \quad (1.2)$$

где  $g_{\alpha\beta} = (\mathbf{g}_\alpha, \mathbf{g}_\beta)$ ,  $G^{\alpha\beta} = (\mathbf{G}^\alpha, \mathbf{G}^\beta)$  — метрические тензоры. Соотношение между поверхностными инвариантами и их трёхмерными аналогами рассмотрено в [?], [?].

Поскольку мембрана изначально плоская, имеем

$$\mathbf{G}_1 = \mathbf{G}^1 = \mathbf{e}_1 = (1, 0, 0)^T, \quad \mathbf{G}_2 = \mathbf{G}^2 = \mathbf{e}_2 = (0, 1, 0)^T,$$

и далее вместо  $\mathbf{G}^\alpha$ ,  $\mathbf{G}_\alpha$  будем использовать  $\mathbf{e}_\alpha$ <sup>1</sup>.

Градиент деформации служит основой для построения различных мер деформации. В настоящей работе мы используем растяжение Лапласа [?], обладающее свойством “ортогональности” [?]. Растяжение Лапласа  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$  основано на QR-разложении  $\mathbb{F}_{2d} = \mathbb{Q}\tilde{\mathbb{F}}_{2d}$  [?], и его компоненты определяются как

$$\xi_1 = \ln \tilde{F}_{11}, \quad \xi_2 = \ln \tilde{F}_{22}, \quad \xi_3 = \tilde{F}_{12}/\tilde{F}_{11}. \quad (1.3)$$

Здесь  $\tilde{F}_{\alpha\beta}$  получаются из разложения Холецкого двумерного поверхностного правого тензора деформации Коши–Грина  $\mathbb{C}_{2d}$ :

$$\tilde{F}_{11} = \sqrt{C_{11}}, \quad \tilde{F}_{12} = C_{12}/\tilde{F}_{11}, \quad \tilde{F}_{22} = \sqrt{C_{22} - \tilde{F}_{12}^2}, \quad (1.4)$$

$$C_{\alpha\beta} = \mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbb{C}_{2d} \cdot \mathbf{e}_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (1.5)$$

Отметим, что  $C_{\alpha\beta}$  и  $\tilde{F}_{\alpha\beta}$  — компоненты тензоров  $\mathbb{C}_{2d}$ ,  $\tilde{\mathbb{F}}_{2d}$  в одном и том же ортонормированном базисе:

$$\mathbb{C}_{2d} = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 C_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad [\mathbb{C}_{2d}]_{\mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta} = (C_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{22} \end{pmatrix};$$

$$\tilde{\mathbb{F}}_{2d} = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \tilde{F}_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta, \quad [\tilde{\mathbb{F}}_{2d}]_{\mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta} = (\tilde{F}_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} \tilde{F}_{11} & \tilde{F}_{12} \\ 0 & \tilde{F}_{22} \end{pmatrix}.$$

В случае изначально плоской мембранны  $C_{\alpha\beta} \equiv g_{\alpha\beta}$  и поверхностные инварианты (1.2) могут быть выражены через  $\xi_i$ :

$$I_1 = e^{2\xi_1}(1 + \xi_3^2) + e^{2\xi_2}, \quad J = e^{\xi_1 + \xi_2}. \quad (1.6)$$

Таким образом, гиперупругий потенциал является функцией от растяжения Лапласа  $\psi = \psi(\boldsymbol{\xi})$ .

### 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  $\psi$  по правому тензору деформации Коши–Грина  $\mathbb{C}$ :

---

<sup>1</sup>Для изначально неплоской мембранны см. [?].

$$\mathbb{S} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{C}} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}} = 2 \mathbf{r}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}, \quad \mathbf{r} := \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (1.7)$$

Вектор  $\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}$  называют базисом, он является известным в смысле расхожим, или известным из экспериментальных данных? 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 (1.7) является следствием неравенства Клаузиса-Дюгема  $\mathcal{D} = \mathbb{S} : \dot{\mathbb{C}} - \dot{\psi}(\mathbb{C}) \geq 0$ , выражающее второе начало термодинамики для механических процессов [7, 8].

Расписав покомпонентно уравнение (1.7) 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:

$$\begin{aligned} S_{11} &= e^{-2\xi_1} (r_1 - 2\xi_3 r_3) + e^{-2\xi_2} r_2 \xi_3^2, \\ S_{22} &= e^{-2\xi_2} r_2, \\ S_{12} &= -e^{-2\xi_2} r_2 \xi_3 + e^{-2\xi_1} r_3, \end{aligned} \quad (1.8)$$

**Фундаментальные ограничения чего? на что? Лучше первым абзацем архитектуры**

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

*Неотрицательность* исключает отрицательную энергию деформации

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) \geq 0 \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3. \quad (1.9)$$

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

$$\psi(\mathbf{0}) = 0, \quad \mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}, \quad (1.10)$$

*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 мембраны

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) \rightarrow \infty \text{ при } \|\boldsymbol{\xi}\| \rightarrow \infty, \quad \mathbb{S} \rightarrow \infty \text{ при } J \rightarrow \infty \text{ или } J \rightarrow 0^+, \quad J = \det \mathbf{F}, \quad (1.11)$$

Свойства (1.9) – (1.11) принято записывать через градиент деформации  $\mathbf{F}$  и правый тензор деформации Коши-Грина  $\mathbf{C}$  [9–11], 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 входу нейронной сетью (Input Convex Neural Network, ICNN) [4] и вычисления 2 тензора напряжения Пиолы-Кирхгофа  $\mathbf{S}$ , используя явное выражение (1.8).

### 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:

$$\psi(\lambda \boldsymbol{\xi}_1 + (1 - \lambda) \boldsymbol{\xi}_2) \leq \lambda \psi(\boldsymbol{\xi}_1) + (1 - \lambda) \psi(\boldsymbol{\xi}_2). \quad (1.12)$$

Ключевые условия ICNN [4]: (i) поэлементно выпуклая, монотонно неубывающая активация  $\varphi$ ; (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  $\varphi$ ).

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

$$s = \mathbf{W}_1 \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}_1, \quad z = \varphi_\beta(s), \quad \tilde{\psi} = \mathbf{W}_2^\top z + b_2, \quad \mathbf{W}_2 \geq 0. \quad (1.13)$$

$$\varphi_\beta(x) = \frac{\text{softplus}(\beta x)}{\beta}, \quad (1.14)$$

Здесь  $\varphi_\beta$  — выпуклая неубывающая функция активации [12], которая гладко аппроксимирует ReLU и при конечных  $\beta$  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  $\psi$  в естественном состоянии.** Для выполнения условия  $\psi(\mathbf{0}) = 0$  центрируем энергию, вычитая значение нелинейной части

при  $\xi = \mathbf{0}$ :

$$z_0 = \varphi_\beta(\mathbf{b}_1), \quad \psi(\xi) = \mathbf{W}_2^\top(z - z_0), \quad (b_2 \equiv 0). \quad (1.15)$$

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

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

$$\mathbf{r}_0 := \left. \frac{\partial\psi}{\partial\xi} \right|_{\xi=0}, \quad \psi_{\text{phys}}(\xi) = \psi(\xi) - \mathbf{r}_0^\top \xi. \quad (1.16)$$

Тогда  $\psi_{\text{phys}}(\mathbf{0}) = 0$  и  $\mathbf{r}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ , а по цепному правилу (1.7) получаем  $\mathbf{S}(\mathbf{I}) = \mathbf{0}$ . Вычитание линейного члена не меняет гессиан и сохраняет выпуклость. Так как  $\mathbf{r}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ , точка  $\xi = \mathbf{0}$  является минимумом  $\psi_{\text{phys}}$ , и значит  $\psi_{\text{phys}} \geq 0$ .

После получения  $\psi_{\text{phys}}$  автоматически вычисляются  $\partial\psi/\partial\xi$  средствами autodiff, реализованными в современных библиотеках для машинного обучения [13], [14], [15], после чего тензор напряжений  $\mathbf{S}$  находится по формуле (1.8) с использованием связи  $\psi(\mathbf{C}) = \psi(\xi(\mathbf{C}))$ .

Центрирование  $\psi_{\text{phys}}$  и  $\mathbf{r}$  в естественном состоянии дает возможность гарантирования выполнения (1.10) и позволяет избежать дополнительных ограничений на параметры сети

### Аналитические выражения для производных энергии

#### Градиент энергии деформации

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

$$\mathbf{r} = \nabla_\xi \psi_{\text{phys}} = \mathbf{W}_1^T (\mathbf{W}_2 \odot \sigma(\beta(\mathbf{W}_1 \xi + \mathbf{b}_1))) - \mathbf{r}_0, \quad (1.17)$$

где  $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$  - сигмоида, а операция  $\odot$  обозначает поэлементное произведение (Hadamard product). Указанное 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  $\sigma(\beta(\mathbf{W}_1 \xi + \mathbf{b}_1))$ .

#### Гессиан энергии деформации

Вторые производные энергии по переменным  $\xi$  определяют гессиан, который имеет следующую аналитическую форму:

$$H_{ij} = \sum_h \sigma'_h W_{2,h} W_{h,i} W_{h,j}, \quad (1.18)$$

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:

$$\mathbf{H} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} > 0, \quad (1.19)$$

Данное свойство важно для численной стабильности конечно-элементных расчётов, поскольку на практике улучшает сходимость метода Ньютона и отсутствие сингулярностей в матрице жёсткости.

### CLaNN architecture: one-layer ICNN

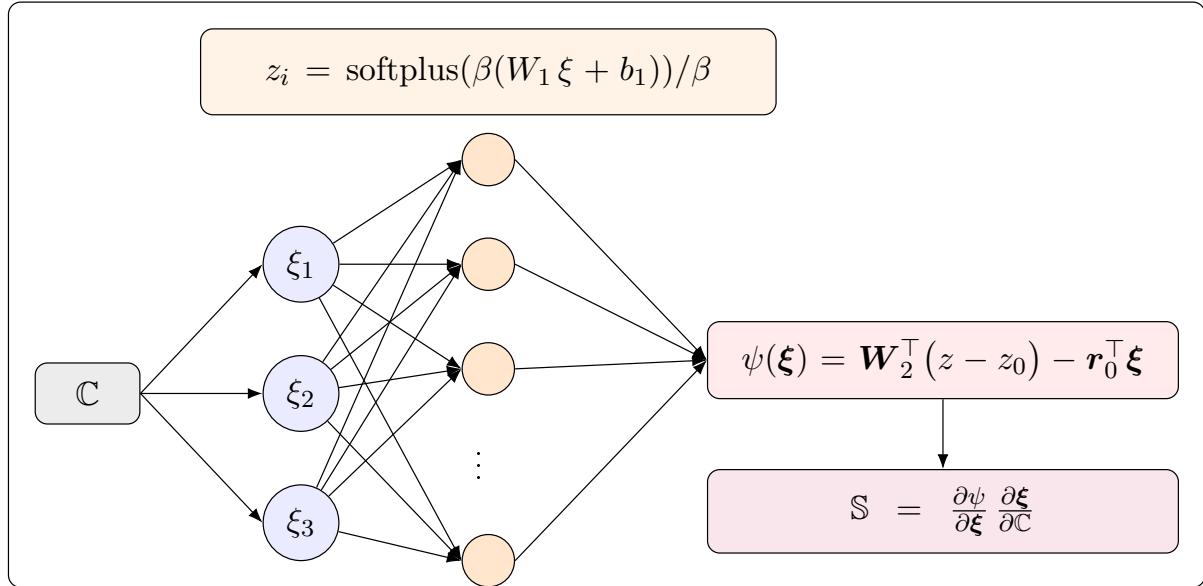


Рис. 1.1. Схема архитектуры CLaNN.

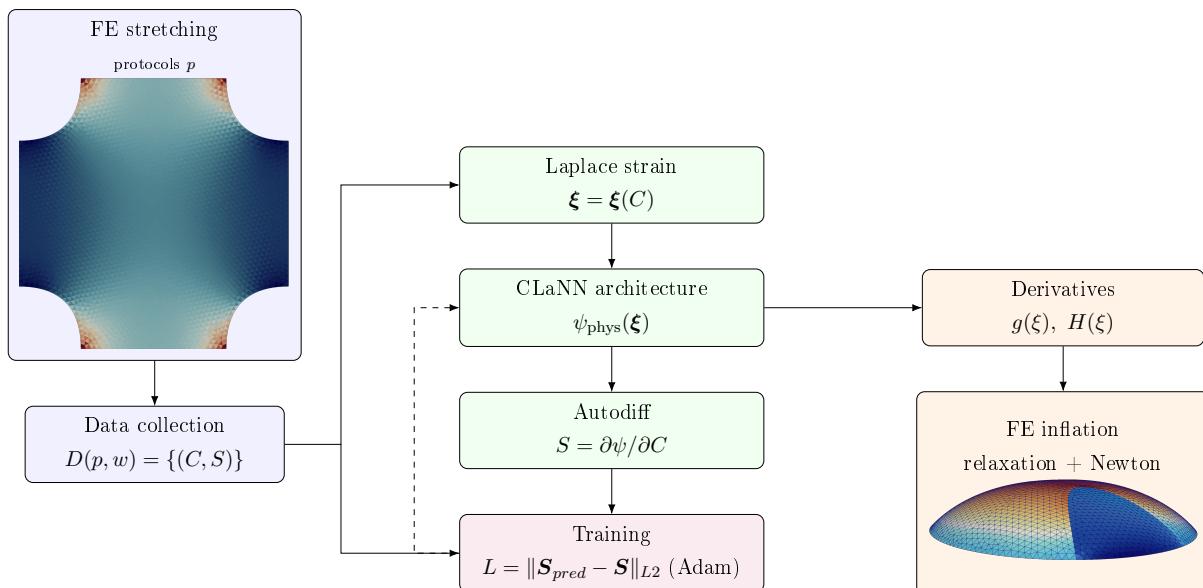


Рис. 1.2. График с крестом нечитаемый . Схема вычислительного контура CLaNN.

Такое построение архитектуры CLaNN обеспечивает выполнение всех необходимых физических свойств гиперупругой модели: **термодинамическая корректность**,

**нность** достигается через строгое соблюдение соотношения (1.7), 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** (1.11) обеспечиваются архитектурой сети CLaNN: монотонные, выпуклые функции активации, неотрицательные весовые коэффициенты, центрирование энергии деформации  $\psi$  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 [6]. Материал мембранны задавался неогуковской моделью [16]:

$$\tilde{\psi} = \frac{\mu H(X)}{2} (I_1 + J^{-2} - 3), \quad I_1 = e^{2\xi_1} (1 + \xi_3^2) + e^{2\xi_2}, \quad J = e^{\xi_1 + \xi_2} \quad (1.20)$$

с  $\mu = 0.43 \cdot 10^6$  Па.

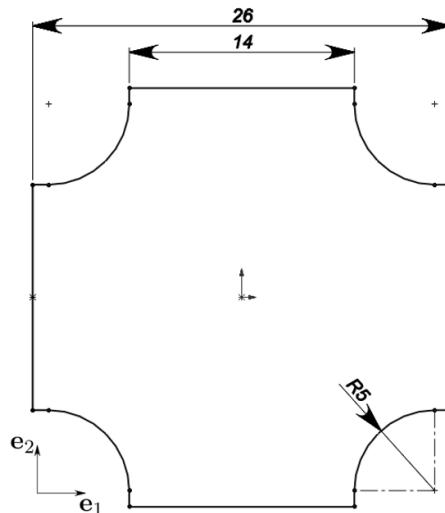


Рис. 1.3. Геометрия образца

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  $\Delta s$ . 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

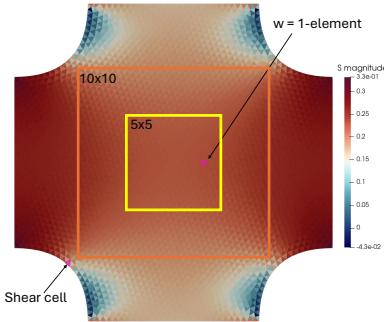


Рис. 1.4. Поле напряжения  $\mathbb{S}$  деформированной мембраны с геометрией "мальтийский крест" с различными окнами наблюдения  $w$ .

### Правила отбора данных

**Центральное окно  $w$ .** Окно задаётся в исходной конфигурации  $\Omega_0$  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  $\Omega_0$ . Для  $w = 1$ -элемент берётся единственный центральный треугольник (ячейка с минимальным номером на вычислительной сетке для окна 5x5 мм  $\Omega_0$  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  $w = 1$ -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  $D_{\text{tr}}$  — обучающая,  $D_{\text{val}}$  — 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).

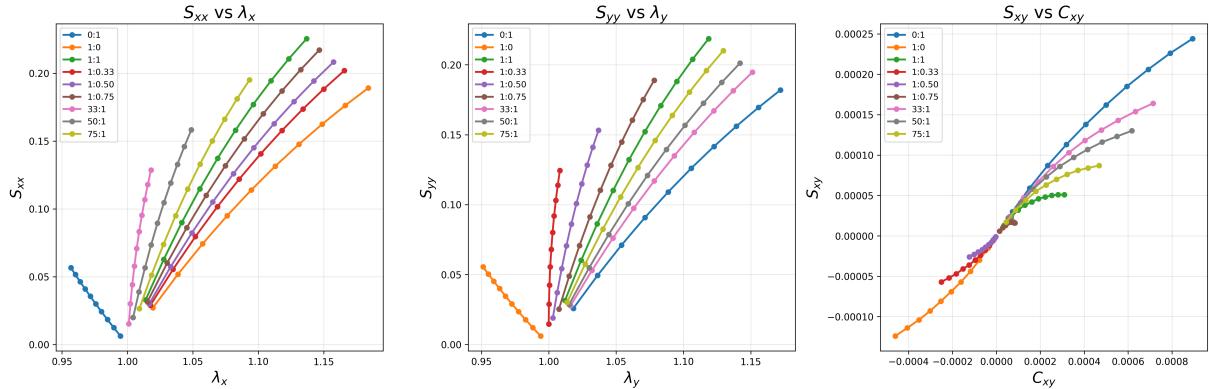


Рис. 1.5. Обучающий набор данных

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, [1, 16, 17]).

**Коэффициент детерминации  $R^2$ .**

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (1.21)$$

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.

$$\epsilon = \frac{\|\mathbb{S} - \mathbb{S}_{\text{ref}}\|}{\|\mathbb{S}_{\text{ref}}\|}. \quad (1.22)$$

**P1-ошибка** [18] — комбинация абсолютной и относительной ошибок, чувствительная к малым значениям:

$$\epsilon_{\text{P1}} = \frac{\|\mathbb{S} - \mathbb{S}_{\text{ref}}\|}{s_0 + \|\mathbb{S}_{\text{ref}}\|}, \quad s_0 = \max(\mathbb{S}_{\text{pred}}). \quad (1.23)$$

**Абсолютная интегральная ошибка для напряжений (Фробениус-норма).**

$$\|e\|_{L^2} = \left( \sum_K \overline{\|\mathbb{S}_{\text{ref}} - \mathbb{S}_{\text{pred}}\|_F^2}^K |K| \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.24)$$

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

$$\|e\|_{L^2} = \left( \sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K} - \mathbb{S}_{\text{pred},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.25)$$

Назначение: сворачивает поле ошибки в скаляр и инвариантна к измельчению сетки (при фиксированном поле) [19–21].

### Относительная интегральная ошибка.

$$\|e\|_{L^2, \text{rel}} = \frac{\left( \sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K} - \mathbb{S}_{\text{pred},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}}{\left( \sum_K \|\mathbb{S}_{\text{ref},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (1.26)$$

### 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  $\beta$ : 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.

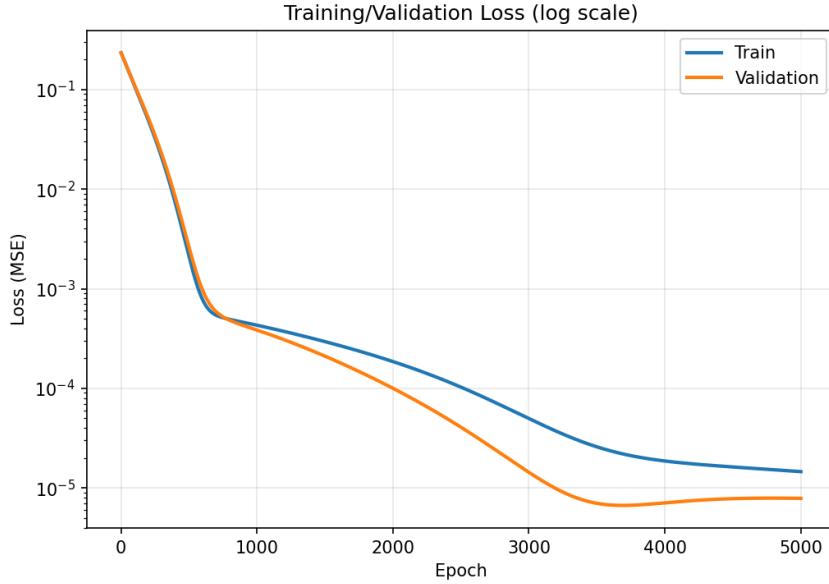


Рис. 1.6. Кривая функции потерь при обучении на 90 точках данных

### 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 (1.21)). 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:

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

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).

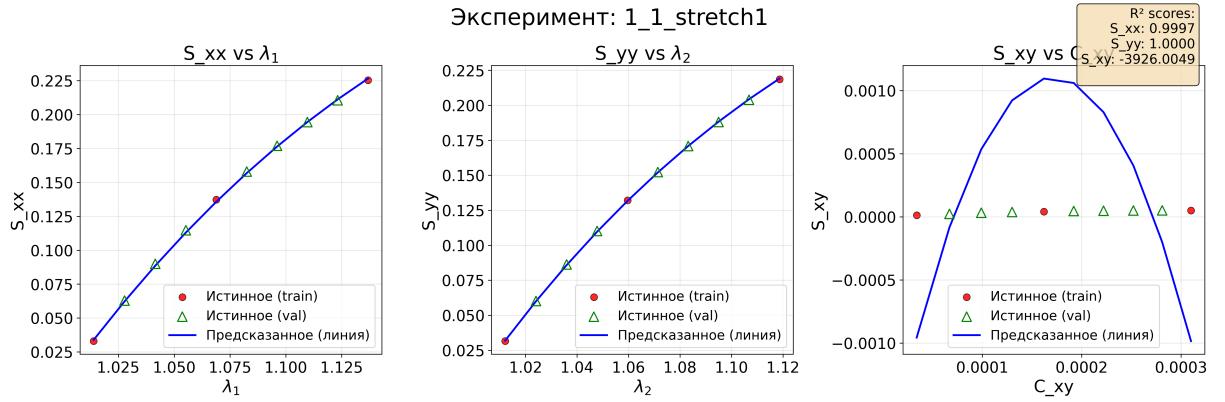


Рис. 1.7. Кривая нагружения для равнодвухосного растяжения

### 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).

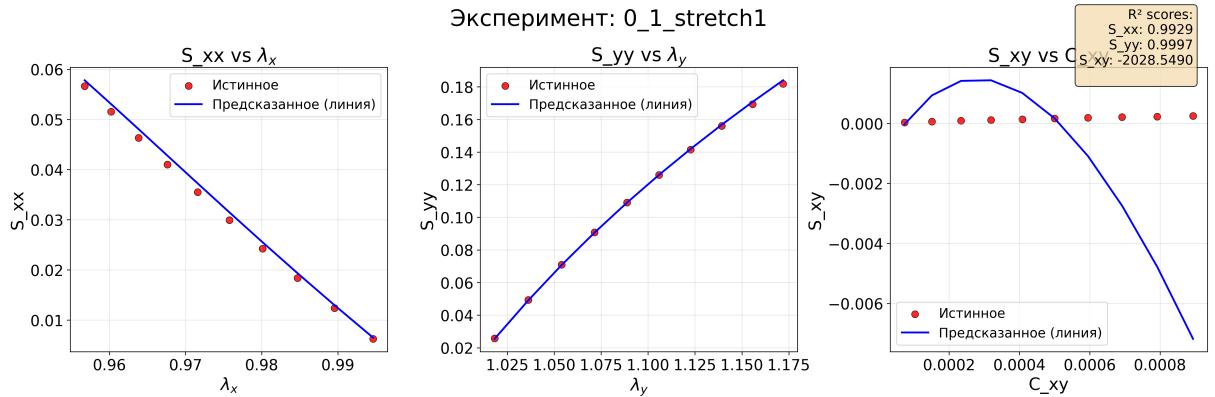


Рис. 1.8. Кривая нагружения для неравнодвухосного растяжения

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 описательной и предсказательной способностей 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 (1.22)); для сравнения сдвиговых компонент — Р1-ошибку [18] (см. формулу (1.23)).

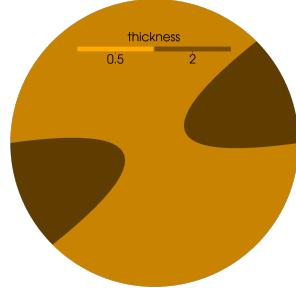


Рис. 1.9. Гетерогенное поле толщин элементов  $T$  круглой мембранны.

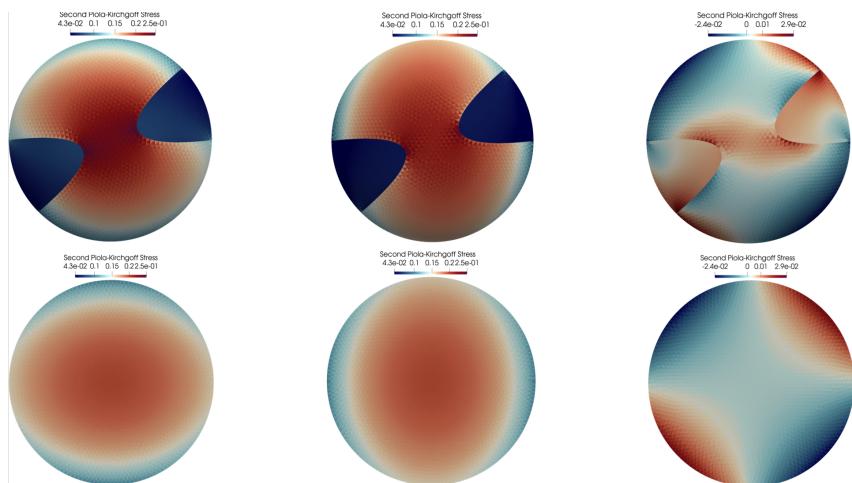


Рис. 1.10. Поле напряжений  $\mathbb{S}$  круглой мембранны (пример результата численного эксперимента).

В результате численного эксперимента на раздутие мембранны с гиперупругим определяющим соотношением CLaNN, используя набор данных  $D(\{1..10\}, w =$

1-элемент) для обучения, мы получили поле напряжений 2 тензора Пиолы-Кирхгофа  $\mathbb{S}$  для гомогенной и гетерогенной мембранны по толщине и сравнили его с референсными значениями (Рисунок 1.10) и построили поле ошибок  $\epsilon$  и  $\epsilon_{P1}$  (Рисунок 1.11). Сдвиговая компонента напряжений  $\mathbb{S}_{xy}$  показывает наибольшую ошибку для гетерогенной мембранны, 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 1.25) и  $\|e\|_{L^2, \text{rel}}$  (Формула 1.26) поля напряжения  $\mathbb{S}$  от размера окна наблюдения  $w$  (Рисунок 1.12). В итоге абсолютная интегральная ошибка  $\|e\|_{L^2}$  для гетерогенной мембранны 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.

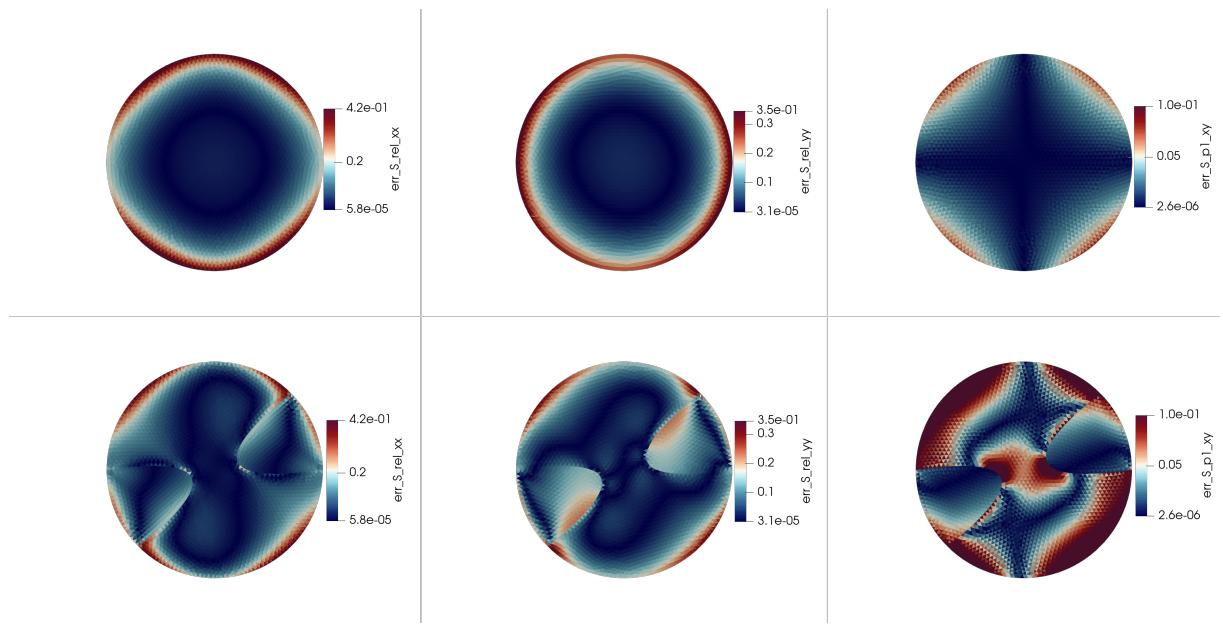


Рис. 1.11. Поле ошибок между предсказанными и эталонными значениями напряжений.

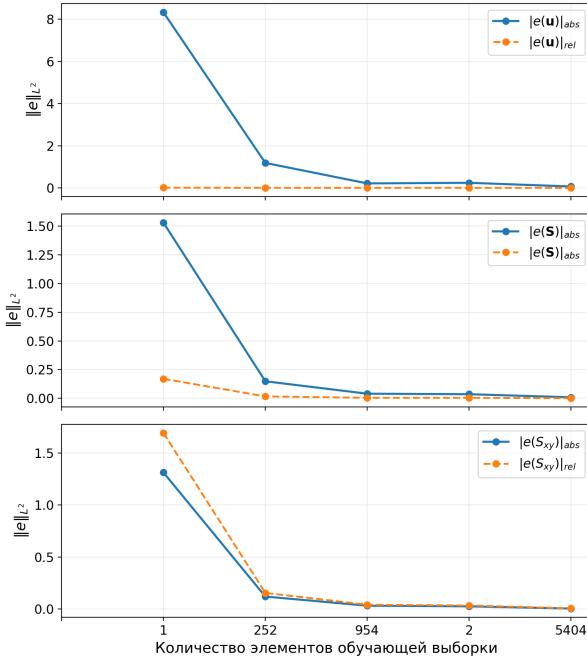


Рис. 1.12. Зависимость интегральной ошибки  $\|e\|_{L^2}$  и  $\|e\|_{L^2, \text{rel}}$  от количества элементов в окне наблюдения размера  $w$ .

### 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 [22–25]. В окрестности минимума сильная выпуклость и липшицевость гессиана обеспечивают локально квадратичную сходимость Ньютона, а квазиньютоновские схемы (L-BFGS) дают сверхлинейные скорости [24].

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 [2, 26]. Такие методы устойчивы, но, как правило, требуют существенно большего числа шагов нагружения и внутренних итераций (а также повторяющихся k-NN запросов), что приводит к росту времени расчёта.

Мы сравнили время решения для CLaNN, классической гиперупругой модели Нео–Гука и DD-модели мембранны на основе kNN и IDW [3]. Задача: раздувание закреплённой круглой мембранны,  $R=25$  мм, равномерное давление 5 МПа, две конфигурации по толщине  $T$  (гомогенная и гетерогенная; см. рис. 1.9). 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 функ-

ций отклика  $(\xi, r)$ , которые были вычислены из  $D(\{1..10\}, w=10 \times 10)$  [3]. 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. 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 Дискуссия

В данной работе предложена и реализована физически-информированная архитектура CLaNN для гиперупругих материалов, основанная на выпуклой потенциальной энергии деформации и меры деформации Лапласа.

В исследованиях по основанной на данных механике [2? ] отклик строится как локальная интерполяция (Voronoi, k-NN) в пространствах деформаций-напряжений, что ведет к невыпуклой задаче равновесия и необходимости применения релаксационных стратегий решения, вместо градиентных и второпорядковых методов со строгими гарантиями сходимости (квазиньютоновские схемы, Ньютон и т.д.). 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.

Локальную интерполяцию мы заменили интерполяцией таблично-заданного в мерах Лапласа определяющего соотношения [? ] выпуклым по выходу нейропотенциалом на базе ICNN. Такой подход априори удовлетворяет требованию к объективности, материальной симметрии [? ], симметрии тензора напряжения и выпуклости гиперупругой модели. Последнее достигалось архитектурно, через монотонно неубывающую функцию активации и неотрицательные веса в соответствии с [4]. Для построения гиперупругой модели CLaNN мы провели виртуальный аналог двухосного экспериментального исследования (по протоколу из [? ]) крестообразного образца неогуковского материала. Входными данными для обучения модели CLaNN стали

пары деформация-напряжение  $\xi_r^{(n)}, \mathbb{S}_r^{(n)}$ , извлеченные из виртуального эксперимента. Полученная модель продемонстрировала высокую точность интерполяции для главных компонент напряжений при растяжении обучающих данных.

В работе [?] авторы сравнивают подходы к моделированию гиперупругости физически-информированными архитектурами CANN (Constitutive Artificial Neural Networks), ICNN (Input Convex Neural Networks), NODE (Neural Ordinary Differential Equations). Для изотропных эластомеров (при одноосных, равнодвухосных, сдвиговых модах деформирования) показано, что обучение физически дополненных сетей на равнодвухосном растяжении обеспечивает лучшую межрежимную экстраполяцию. Подобным образом мы протестировали экстраполяционную способность трех вариантов CLaNN, обученных на данных сложного двухосного протокола, извлеченных из разных областей образца. Моделировалось два инфляционных сценария – раздувание гомогенной по толщине мембранны и гетерогенной мембранны с утолщениями-концентриаторами, продукирующими неоднородные поля деформаций со значительными сдвиговыми компонентами тензора напряжений в полюсе образца. Точность наших решений, полученная с CLaNN, сравнивалась с референтным конечно-элементным решением для раздутия неогуковской модели мембранны с тем же параметром модуля сдвига, с которым генерировались двухосные данные для обучения CLaNN. При сопоставимой с неогуковским решением скоростью CLaNN корректно предсказывает поля перемещений и напряжений при инфляции гомогенной и гетерогенной по толщине круглой гиперупругой мембранны. Абсолютные и относительные интегральные ошибки норм перемещений и напряжений падают при увеличении области извлечения данных для обучения CLaNN – к дужкам крестообразного образца растет порядок сдвиговой компоненты напряжений. Это соответствует наблюдениям из бенчмарка [?]: с расширением покрытия экспериментальными данными пространства деформаций при обучении CANN/ICNN/NODE, растет точность межрежимной экстраполяции.

Отметим, что по вычислительной эффективности CLaNN превосходит методы локальной интерполяции: на гомогенной задаче выигрыш составляет порядка  $\times 141.8$  за счёт отсутствия 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 в предыдущей работе [?] таблично-заданная гиперупругая 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 сложнооцененному увеличению времени расчета по сравнения с ньютоновскими методами, с которыми позволяет работать CLaNN.

В работе [6] была показана применимость таблично-заданных определяющих соотношений в мерах Лапласа для анизотропных биоматериалов. При этом инварианты для описания анизотропии не вводились. Таблично-заданное определяющее соотношение строилось по синтетическим экспериментальным данным, которые были получены с гиперупругой моделью Хользапфеля-Гассера-Огдена [6] для свиной кожи. Трех функций отклика, зависящих от трех соответствующих компонент тензора Лапласа было достаточно для описания механического поведения анизотропного материала в двумерной постановке. Это обнадеживает применение CLaNN для анизотропного материала без введения предположений о симметриях материала, как это недавно делалось родственных работах с ICNN определяющим соотношениям, базирующимся на инвариантах и псевдо-инвариантах правого тензора деформаций Коши-Грина [? ]. В будущем мы планируем обучить модель CLaNN на экспериментальных данных, полученных при тестировании перикардиальной ткани. Как итог, на фоне феноменологических гиперупругих моделей CLaNN не требует предположений о форме потенциала и предлагает гибкость универсального аппроксиматора потенциала при удовлетворении законов термодинамики. На фоне локально интерполяционных подходов, основанных на данных CLaNN возвращает в постановку гладкость и выпуклость энергии, что превращает задачу равновесия в хорошо обусловленную минимизацию с предсказуемой сходимостью и выигрышем по времени. Ограничения. Наши результаты демонстрируют, что мы можем успешно применять архитектуру CLaNN для моделирования гиперупругой изотропной мембранны. Однако мы столкнулись с некоторыми ограничениями, которые указывают на будущую работу. Во-первых, в данной работе предполагается гиперупругость мембранны. Во-вторых, мы рассматриваем только изотропный случай в двумерных сценариях. В дальнейшем мы расширим применение CLaNN на анизотропию, устранив это ограничение аппроксимацией таблично-заданного определяющего соотношения в мерах Лапласа для анизотропного материала.

В-третьих, ...

## 1.7 Заключение

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.

# Приложение А

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

### 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:  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\ln u_{11}, \ln u_{22}, u_{12}/u_{11})$ .

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  $\boldsymbol{\xi}$ .

### 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] Gerhard A Holzapfel. *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering*. John Wiley & Sons, 2000.
- [2] 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.
- [3] Victoria Salamatova and Alexey Liogky. Interpretable data-driven modeling of hyperelastic membranes. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 39(11):e3757, 2023.
- [4] Brandon Amos, Lei Xu, and J Zico Kolter. Input convex neural networks. In *International conference on machine learning*, pages 146–155. PMLR, 2017.
- [5] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.
- [6] Alexey Liogky and Victoria Salamatova. Data-driven anisotropic biomembrane simulation based on the laplace stretch. *Computation*, 12(3):39, 2024. doi: 10.3390/computation12030039.
- [7] Clifford Truesdell. Historical introit the origins of rational thermodynamics. In *Rational thermodynamics*, pages 1–48. Springer, 1984.
- [8] Clifford Truesdell and Walter Noll. *The non-linear field theories of mechanics*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [9] Stuart S Antman. *Nonlinear problems of elasticity*. Springer, 2005.
- [10] 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.
- [11] Gustav Kirchhoff. Ueber das gleichgewicht und die bewegung einer elastischen scheibe. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 40:51–88, 1850.

- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] R.W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications, 1997. ISBN 978-0486696481.
- [17] Philippe G Ciarlet. *Mathematical elasticity: Three-dimensional elasticity*, volume 1. Elsevier, 1988.
- [18] Peichen Xie. P1 error: A combination of absolute and relative errors. *CoRR*, 2024.
- [19] 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.
- [20] Mark Ainsworth and J. Tinsley Oden. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. Wiley, 2000. ISBN 978-0-471-29413-0.
- [21] 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.
- [22] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004. ISBN 978-0521833783.

- [23] Yurii Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*, volume 87 of *Applied Optimization*. Springer, 2004. ISBN 978-1402075537.
- [24] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2 edition, 2006. ISBN 978-0387303031.
- [25] A. R. Conn, N. I. M. Gould, and Ph. L. Toint. *Trust-Region Methods*. SIAM, 2000. ISBN 978-0-89871-460-9.
- [26] 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.