Оглавление

Глава 1

CLANN

1.1 Введение

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

1.2 Кинематика деформаций

Основные соотношения Пусть $\boldsymbol{F}$ — градиент деформации, а правый тензор Коши—Грина $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^\top \boldsymbol{F}$. В параметризации Холецкого $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U}$, где $\boldsymbol{U}$ — верхнетреугольный тензор.

Мера деформации Лапласа В двумерном случае вводятся координаты

$$\xi_1 = \ln(u_{11}), \quad \xi_2 = \ln(u_{22}), \quad \xi_3 = \frac{u_{12}}{u_{11}}. \tag{1.1}$$

1.3 Напряжения и термодинамическая корректность

Гиперупругие напряжения Гиперупругие напряжения получаются дифференцированием энергии по мере деформации:

$$\boldsymbol{S} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{C}} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \boldsymbol{C}}, \qquad \boldsymbol{r} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi}. \tag{1.2}$$

Такое построение гарантирует объективность и консервативность напряжений.

Компоненты напряжений в двумерном случае Для выбранной параметризации в 2D справедливы выражения

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

Механические ограничения гиперупругости.

Положительность и рост энергии:

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

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

Симметрия и объективность:

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

Консервативность напряжений:

$$\oint \boldsymbol{S} : d\boldsymbol{C} = 0. \tag{1.6}$$

1.4 ICNN: архитектура и обучение

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

$$z = \frac{\text{softplus}(\beta\, \boldsymbol{W}_1 \xi)}{\beta}, \qquad \psi = \boldsymbol{W}_2^\top z + b_2, \qquad \boldsymbol{W}_2 \geq 0. \tag{1.7}$$

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

Аналитический градиент архитектуры ICNN Аналитическая форма градиента ICNN имеет вид

$$\nabla_\xi \psi = W_1^T \left(w_2 \odot \sigma(\beta(W_1 \xi)) \right), \tag{1.8}$$

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

Аналитический гессиан Аналитическая форма гессиана ICNN имеет вид

$$H_{ij} = \sum_h \sigma'_h\, w_{2,h}\, W_{h,i} W_{h,j}, \quad \sigma' = \beta\, \sigma(1-\sigma), \ \sigma = \text{sigmoid}(\beta s), \ s = \boldsymbol{W}_1 \xi + \boldsymbol{b}_1. \tag{1.9}$$

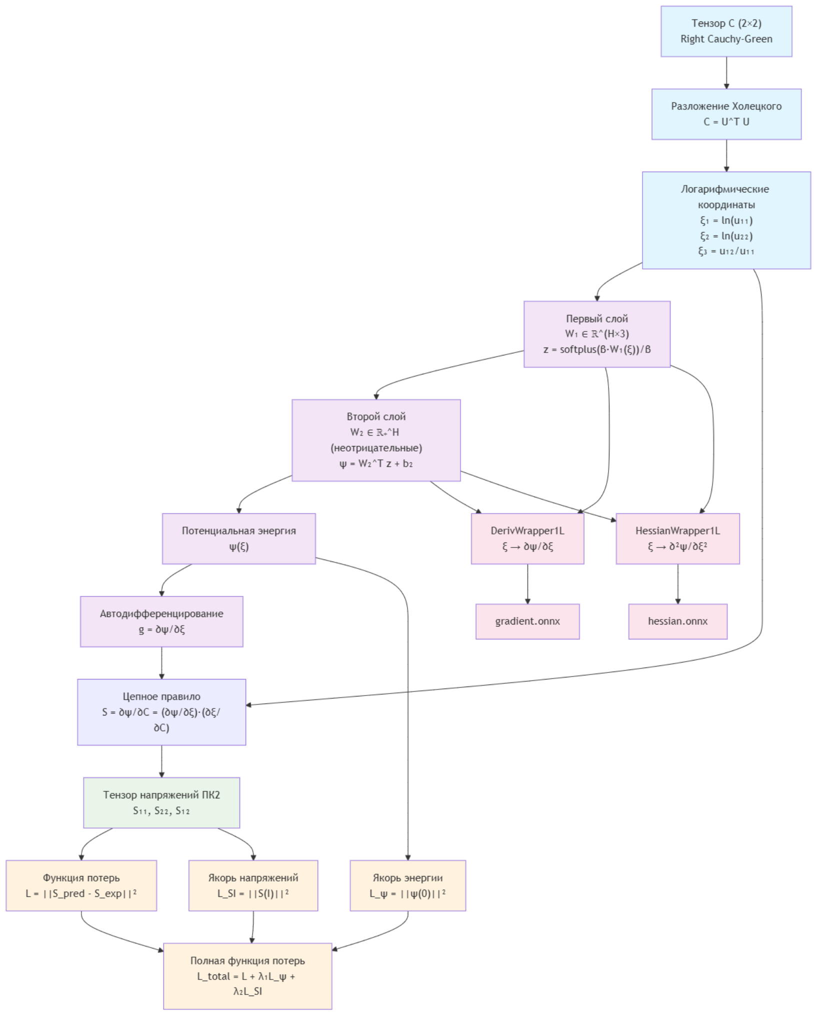

Рис. 1.1. Схема вычислительного процесса CLANN: от входного тензора до функции потерь. Показаны этапы обработки входных данных, вычисления нейросетью, дифференцирования и формирования функции потерь.

1.4.1 Функция потерь и обучение

Основная функция потерь

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \| \boldsymbol{S}_{\mathrm{pred}}^{(i)} - \boldsymbol{S}_{\mathrm{exp}}^{(i)} \|^2. \tag{1.10}$$

Якорные слагаемые

$$L_{\mathrm{SI}} = \| \boldsymbol{S}(\boldsymbol{I}) \|^2, \qquad L_{\psi} = \| \psi(0) \|^2. \tag{1.11}$$

Полная функция потерь:

$$L_{\mathrm{total}} = L + \lambda_{\mathrm{SI}} L_{\mathrm{SI}} + \lambda_{\psi} L_{\psi}. \tag{1.12}$$

1.4.2 ? Численные аспекты и интеграция в МКЭ

Разложение Холецкого

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{U}^{\top} \boldsymbol{U}, \quad \boldsymbol{U} = \mathrm{cholesky\_upper}(\boldsymbol{C}).$$

Автоматическое дифференцирование и экспорт

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

Физическая корректность и стабильность ICNN

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

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

Выпуклость энергии: Строгая выпуклость $\psi(\xi)$ обеспечивает единственность решения задачи минимизации энергии и положительную определённость касательной жёсткости. Это критически важно для стабильности численного решения в конечно-элементных расчётах.

Положительность энергии: Ограничение $\boldsymbol{W}_2 \geq 0$ вместе с положительной активацией softplus гарантирует, что $\psi(\xi) \geq 0$ для всех допустимых деформаций, что соответствует физическому принципу положительности энергии деформации.

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

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

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

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

1.5 Численные эксперименты

1.5.1 Валидация на синтетических данных

1.5.2 Сравнение с классическими моделями

1.6 Натурные эксперименты

1.6.1 Экспериментальная установка

1.6.2 Результаты и валидация

1.7 Заключение

Литература