

Оглавление

1	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	8
1.5.1	Интерполяция и экстраполяция кривых нагрузления	11
1.5.2	Раздутие мембранны	13
1.6	Заключение	15
A	Эквивалентность QR-факторизации F и разложения Холецкого $C = F^\top F$ для вычисления логарифмических координат ξ	16
A.1	Постановка и обозначения	16
A.2	Теорема (эквивалентность U и R)	16
A.3	Координаты ξ через U	17

Глава 1

CLANN

1.1 Введение

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

1.2 Кинематика

Основные соотношения

Мы рассматриваем равновесие тонкой несжимаемой гиперупругой мембраны под определенными нагрузками. Деформация мембранны характеризуется деформацией её 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 мембранны соответственно. Деформация определяется отображением $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$, поверхностный градиент деформации $\mathbf{F} = \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{E}^\alpha$, а правый тензор Коши—Грина $\mathbf{C} = C_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta = \mathbf{F}^\top \mathbf{F}$. Для определения меры деформации мы используем меру Лапласа $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ [1], которая может быть вычислен двумя эквивалентными способами: либо через QR-разложение градиента деформации $\mathbf{F} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ с $\mathbf{U} = \mathbf{R}$, либо через разложение Холецкого правого тензора Коши-Грина $\mathbf{C} = \mathbf{U}^\top \mathbf{U}$ (Приложение А). В этом случае гиперупругий потенциал является функцией от деформации Лапласа $\psi = \psi(\boldsymbol{\xi})$.

Мера деформации Лапласа В двумерном случае вводятся характеристики

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

1.3 Напряжение и термодинамическая корректность

Второй тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа вычисляется по цепному правилу дифференцированием энергии ψ по правому тензору деформации Коши-Грина \mathbf{C} :

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

Такое построение имеет ключевые следствия:

- **Объективность:** $\psi(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{Q}^\top \mathbf{C} \mathbf{Q})$ для любой ортогональной \mathbf{Q} , а значит и \mathbf{S} инвариантен к поворотам.
- **Симметрия напряжений:** $\mathbf{S} = \mathbf{S}^\top$ вследствие симметрии \mathbf{C} и корректного применения цепного правила.
- **Термодинамическая корректность:** равенство (1.2) является следствием неравенства Клаузуса-Дюгема $\mathcal{D} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} - \dot{\psi}(\mathbf{C}) \geq 0$, выражающее второе начало термодинамики для механических процессов [2, 3].

Связь тензора Лапласа и второго тензора напряжений Пиолы-Кирхгофа

Применяя цепное правило дифференцирования к выражению (1.2) и используя меру деформации Лапласа, получаем аналитические выражения для компонент второго тензора напряжений Пиолы-Кирхгофа в двумерном случае:

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

r_1, r_2, r_3 — компоненты функции отклика $\mathbf{r} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}}$.

Эти соотношения демонстрируют связь между логарифмическими мерами деформации и компонентами напряжений, характерную для гиперупругих материалов. Экспоненциальные множители $e^{-2\xi_i}$ отражают логарифмическую природу выбранной параметризации, а члены, содержащие ξ_3 , описывают сдвиговые эффекты.

Фундаментальные ограничения

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

1. Неотрицательность.

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

Это исключает отрицательную внутреннюю энергию и согласуется с трактовкой потенциальной энергии как накопленной работы упругих сил.

2. Нулевые значения для ψ и \mathbf{S} в естественном состоянии.

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

Естественная (недеформированная) конфигурация является энергетическим минимумом и не порождает остаточных напряжений.

3. Бесконечный рост (коэрцитивность).

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

Это обеспечивает коэрцитивность: крайние объёмные деформации ($J \rightarrow \infty, J \rightarrow 0^+$) и неограниченный рост меры деформации физически недостижимы при конечной работе.

Эти свойства 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 под хода 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) [7] и вычисления 2 тензора напряжения Пиолы-Кирхгофа \mathbf{S} .

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

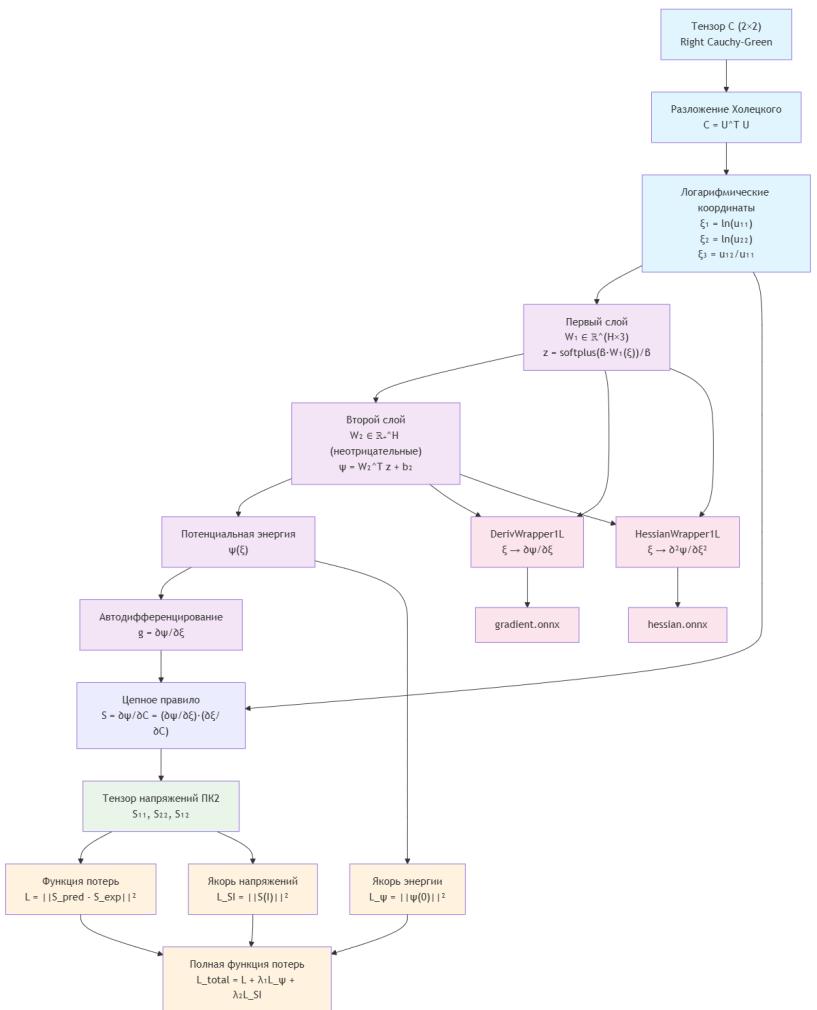


Рис. 1.1. Схема вычислительного процесса CLANN: от входного тензора до функции потерь. Показаны этапы обработки входных данных, вычисления нейросетью, дифференцирования и формирования функции потерь.

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 обеспечивает сходимость метода Ньютона отсутствие сингулярностей в матрице жёсткости.

В рамках предложенного подхода обучение модели осуществляется путём минимизации функции потерь, которая количественно характеризует невязку между предсказанными и экспериментальными значениями напряжений:

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \| \mathbf{S}_{\text{pred}}^{(i)} - \mathbf{S}_{\text{exp}}^{(i)} \|^2. \quad (1.15)$$

Для минимизации функции потерь (1.15) используется оптимизатор Adam [12], который широко используется в задачах машинного обучения. Процесс оптимизации включает вычисление градиентов по всем параметрам сети и обновление весов с использованием аддитивных моментов первого и второго порядка.

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 $\psi_{\text{phys}}(\xi) = \mathbf{W}_2^\top (z - z_0) - \mathbf{r}_0^\top \xi + \frac{\gamma}{2} \|\xi\|^2$ с $\gamma > 0$, 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 $\|\xi\| \rightarrow \infty$ (см. clann_math.markdown, § Потенциал); 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

Мы используем синтетические экспериментальные данные для тестирования CLaNN на изотропном надувании однородной и неоднородной по толщине мембранны. А именно, мы генерируем данные с помощью виртуальных экспериментов на плоских растяжениях образца и используем их в качестве входных данных для обучения CLaNN, без какого-либо дополнительного знания об изотропности/анизотропии образца и форме потенциала.

Обучение модели проводилось на численных экспериментальных данных, полученных при двухосном растяжении образца с геометрией малтийского креста (Рисунок 1.2). С неогуковской гиперупругой моделью для двумерной мембранны [13]

Причем данные для обучения собирались из одного центрального элемента сетки, что соответствует ограничениям эквивалентного натурного эксперимента, в котором невозможно установить без предположения модели материала полное поле напряжения в образце.

Для решения задачи равновесия гиперупругой мембранны используется метод описанный в [14].

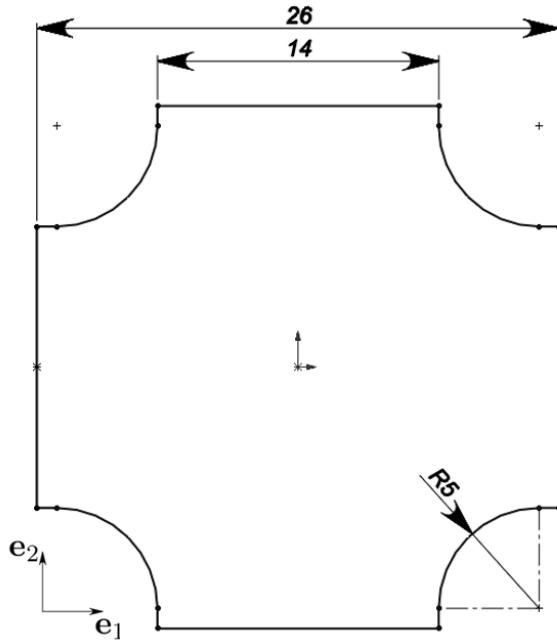


Рис. 1.2. Размеры образца биоматериала в форме малтийского креста. Радиус вырезов одинаков для всех вырезов

Схематическое представление протоколов показано 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 типы экспериментов. В наших виртуальных экспериментах мы постепенно прикладываем смещение с определенным шагом Δs до достижения максимального смещения. 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. Треугольная сетка для образца является квазиравномерной с размером ячейки $h_{\text{fit}} = 0.25$ мм, максимальное смещение $u_{\max} = 2$ мм и $\Delta s = 0.2$ мм. На каждом шаге мы собираем данные (C, S) для всех треугольников, принадлежащих выбранной области наблюдения. Поскольку мы используем линейные (P_1) конечные элементы, значения (C, S) постоянны на каждом треугольнике.

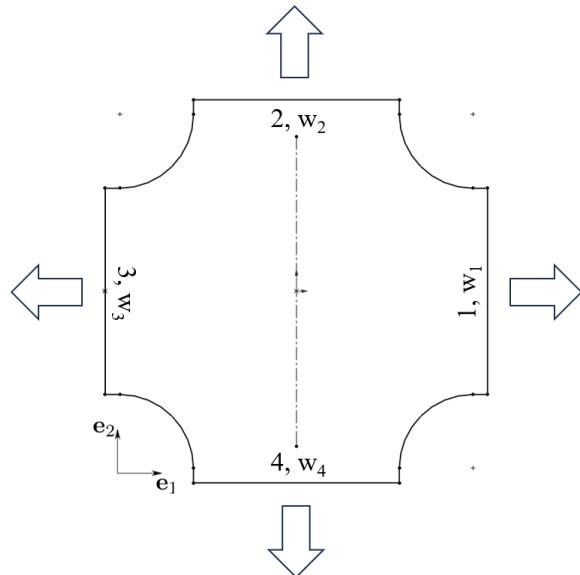


Рис. 1.3. Схематическое представление протоколов. Радиус вырезов одинаков для всех вырезов

Наш предлагаемый тестовый протокол предполагает девять экспериментов:

Таблица 1.1. Протоколы тестовых 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

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 $w = 1$ -элемент берётся единственный центральный треугольник

(ячейка, чей барицентр ближайший к центру Ω_0). 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 . 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 $(\mathbf{C}_T^{(n)}, \mathbf{S}_T^{(n)})$, где \mathbf{C} — правый тензор Коши–Грина, \mathbf{S} — второй тензор Пиолы–Кирхгофа. Единицы: размеры окна — мм; \mathbf{C} — безразмерен; \mathbf{S} — МПа.

Формирование выборок. Для фиксированных (p, w) совокупность всех пар $(\mathbf{C}_T^{(n)}, \mathbf{S}_T^{(n)})$ 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 $w \in \{1\text{-элемент}, 5 \times 5, 10 \times 10, \text{всё поле}\}$ 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 \mathbf{C} и второго тензора напряжений Пиолы–Кирхгофа \mathbf{S} (Рисунок 1.4).

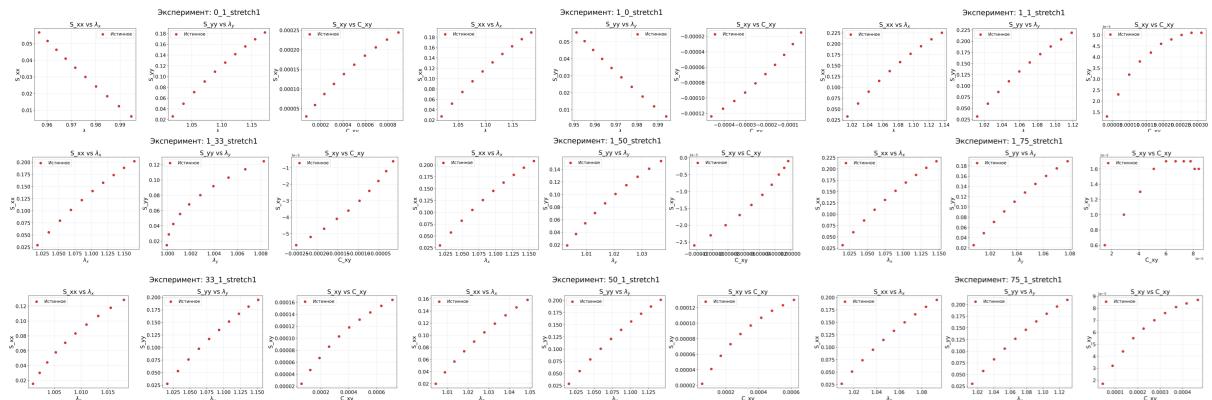


Рис. 1.4. Обучающий набор данных

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

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 1.5), 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.

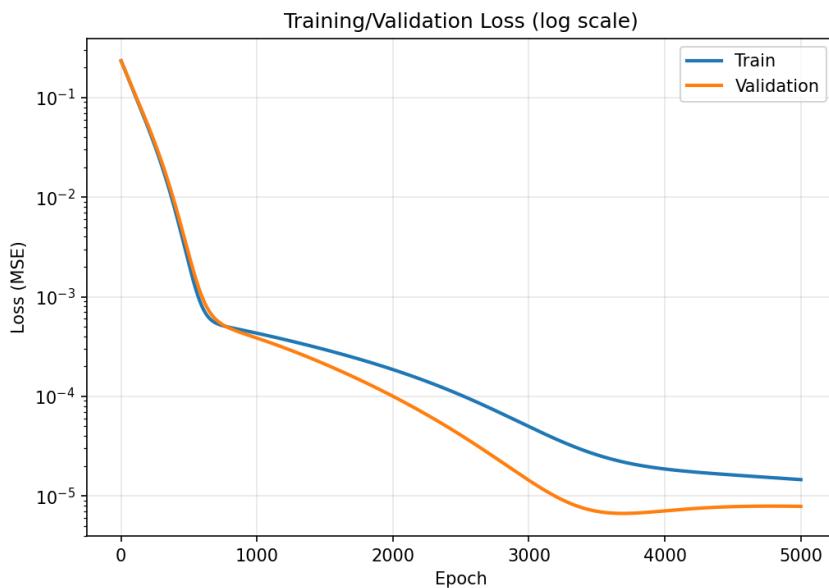


Рис. 1.5. Кривая функции потерь при обучении на 90 точках данных

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 :

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

где y_i — экспериментальные значения, \hat{y}_i — предсказания модели, \bar{y} — среднее экспериментальных значений, n — количество точек данных. Метрику качества фиксируем как коэффициент детерминации (см. (1.16)):

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

Интерполяция.

Для тестирования способности архитектуры CLaNN мы использовали данные из 10 точек кривой нагрузления равнодвухосного растяжения мембранны $p = 1$, окно

наблюдения $w = 1$ -элемент:

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

$$D_{tr} = \{\forall (\mathbf{C}^{n_{tr}}, \mathbf{S}^{n_{tr}}) \in D_{in} \mid n_{tr} = \{1, 5, 10\}\},$$

$$D_{val} = \{\forall (\mathbf{C}^{n_{val}}, \mathbf{S}^{n_{val}}) \in D_{in} \mid n_{val} = n \setminus n_{tr}\}.$$

CLaNN показал высокую точность интерполяции кривой нагружения 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 1.6).

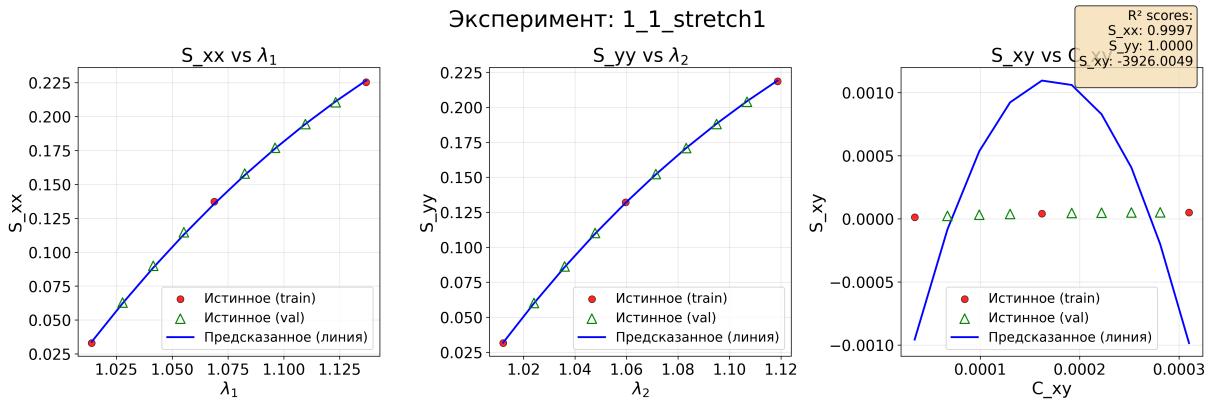


Рис. 1.6. Кривая нагружения для равнодвухосного растяжения

Экстраполяция.

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

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

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

CLaNN показал высокую точность экстраполяции для растягивающих компонент $R_{xx}^2 = 0.993$, $R_{yy}^2 = 1.0$, и отсутствие достоверного предсказания сдвиговой компоненты $R_{xy}^2 = 0$ (рисунок 1.7).

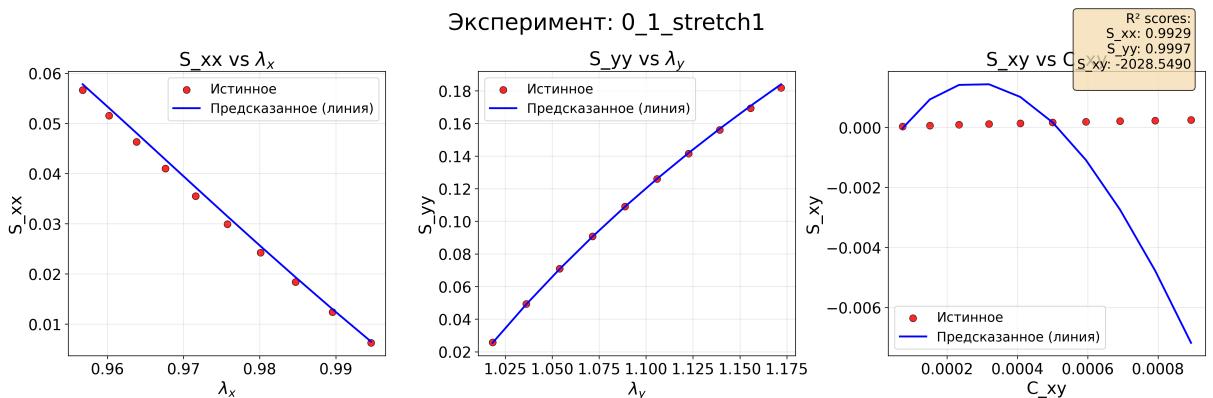


Рис. 1.7. Кривая нагружения для неравнодвухосного растяжения

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 S_{xy} , что может быть связано с тем, что данные для сдвиговых компонент не достаточно большие.

1.5.2 Раздутие мембранны

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 1.8).

В качестве метрики ошибки мы использовали относительную ошибку между предсказанными и эталонными значениями напряжений:

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

где \mathbf{S} — предсказанные значения напряжений, \mathbf{S}_{ref} — эталонные значения напряжений.

А также для сравнения сдвиговых компонент напряжений использовали Р1 относительную ошибку [15], которая является комбинацией относительной и абсолютной ошибок и более чувствительна к значениям близким к нулю:

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

где \mathbf{S} — предсказанные значения напряжений, \mathbf{S}_{ref} — эталонные значения напряжений, $s_0 = \max(\mathbf{S}_{\text{pred}})$ — масштаб абсолютной толерантности (в единицах напряжения).

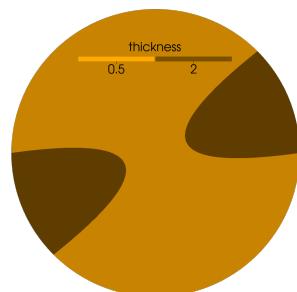


Рис. 1.8. Гетерогенное поле толщин элементов T круглой мембранны.

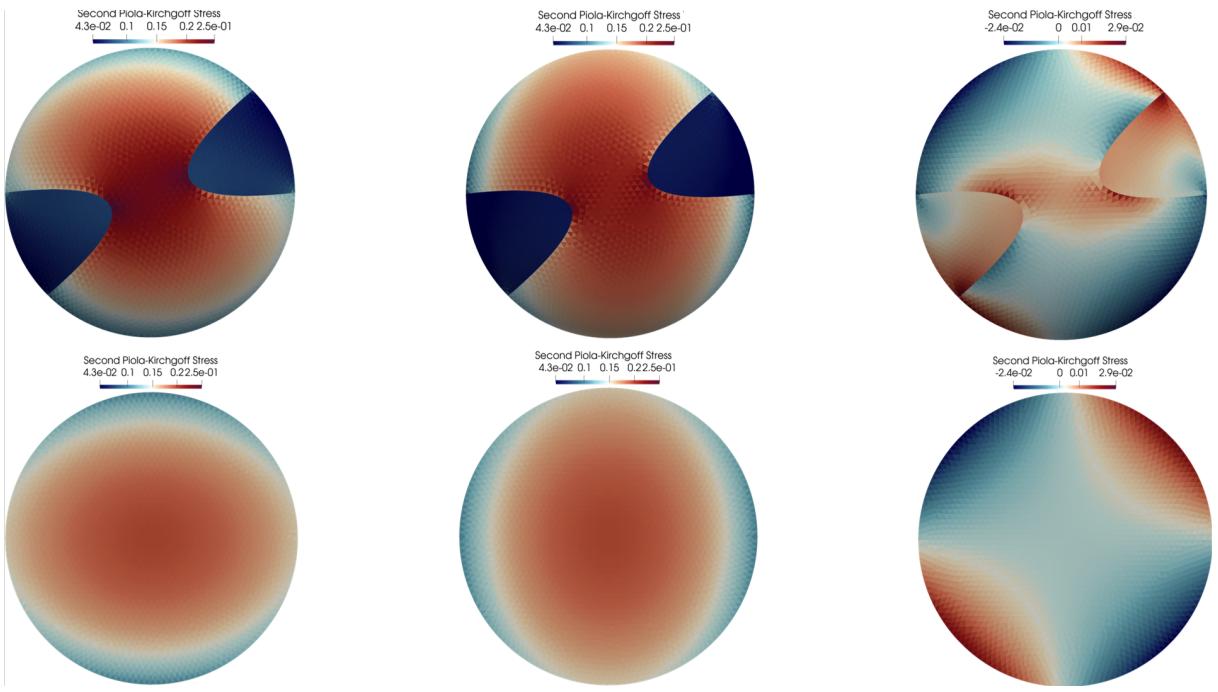


Рис. 1.9. Поле напряжений \mathbf{S} круглой мембраны с гетерогенным и гомогенным полем толщин элементов T .

В результате численного эксперимента на раздутие мембраны 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 \mathbf{S} для гомогенной и гетерогенной мембраны по толщине и сравнили его с референсными значениями (Рисунок 1.9) и построили поле ошибок ϵ и ϵ_{P1} (Рисунок 1.10). Сдвиговая компонента напряжений 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 получили более точные результаты (Рисунок 1.10).

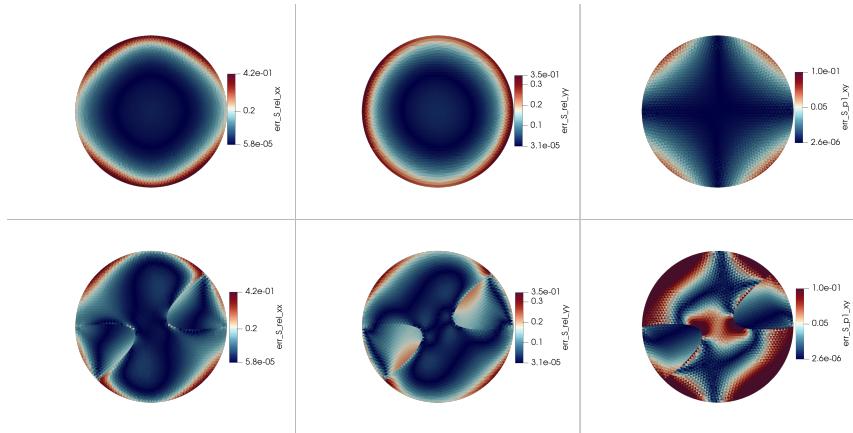


Рис. 1.10. Поле ошибок между предсказанными и эталонными значениями напряжений.

Таблица 1.2. Сводка проведенных экспериментов по обучению и валидации модели CLANN

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

1.6 Заключение

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: $\mathbf{C} = \mathbf{U}^\top \mathbf{U}$, где \mathbf{U} — верхнетреугольная и $\text{diag}(\mathbf{U}) > 0$,
- 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 $\mathbf{U} = \text{chol}(\mathbf{C})$ на $\mathbf{U} = \mathbf{R}$ 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 \mathbf{U} и \mathbf{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 $\mathbf{U} = \text{chol}(\mathbf{C})$, можно эквивалентно вычислять из $\mathbf{U} = \mathbf{R}$ в $\text{QR}(\mathbf{F})$, при условии $\text{diag}(\mathbf{R}) > 0$.

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

Для $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} \\ 0 & u_{22} \end{bmatrix}$, $\text{diag}(\mathbf{U}) > 0$,

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

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

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] Diederik P Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, 2014.
- [13] R.W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications, 1997. ISBN 978-0486696481.
- [14] Alexey Liogky and Victoria Salamatova. Data-driven anisotropic biomembrane simulation based on the laplace stretch. *Computation*, 12(3):39, 2024. doi: 10.3390/computation12030039.
- [15] Peichen Xie. P1 error: A combination of absolute and relative errors. *CoRR*, 2024.