Article

Математическое описание CLANN (Convex Laplace Artificial Neural Network)

Автор

[1] Аффилиация; e-mail@e-mail.com
* Correspondence: e-mail@e-mail.com

Abstract

В данной работе представлено математическое описание CLANN (Convex Laplace Artificial Neural Network) - нейросетевой модели для описания гиперупругого поведения материалов в рамках нелинейной механики сплошных сред. Модель основана на принципах гиперупругости, выпуклости и инвариантности относительно поворотов. Использование выпуклых нейронных сетей и логарифмической параметризации обеспечивает гарантированную сходимость численных методов, физическую корректность предсказаний и эффективную интеграцию в FE-код. Особое внимание уделено термодинамической корректности модели через прямое вычисление напряжений из дифференцирования функции энергии.

Keywords: гиперупругость; нейронные сети; механика сплошных сред; термодинамика; численные методы

Received:
Revised:
Accepted:
Published:

Citation: Автор. Математическое описание CLANN. *Journal Not Specified* **2025**, *1*, 0. https://doi.org/

1. Введение и физические основы

CLANN представляет собой нейросетевую модель для описания гиперупругого поведения материалов в рамках нелинейной механики сплошных сред. Модель основана на принципах:

- **Гиперупругость**: материал описывается через функцию плотности энергии деформации ψ
- **Выпуклость**: гарантирует физическую корректность и стабильность решения
- **Инвариантность**: модель инвариантна относительно поворотов

2. Кинематические соотношения

2.1. Тензоры деформации

В CLANN используются следующие тензоры:

- **Тензор градиента деформации** F: описывает локальную деформацию
- **Тензор правого Коши-Грина** $C = F^T F$: мера деформации, инвариантная к поворотам
- **Верхнетреугольный фактор Холецкого** U: $C = U^T U$

2.2. Параметризация через ξ

Ключевая идея CLANN - параметризация через логарифмические координаты:

$$\xi_1 = \ln(u_{11}), \quad \xi_2 = \ln(u_{22}), \quad \xi_3 = \frac{u_{12}}{u_{11}} \tag{1}$$

где u_{ij} - компоненты матрицы U.

Преимущества такой параметризации:

- Обеспечивает выпуклость функции энергии

- Упрощает вычисление производных
- Позволяет корректно обрабатывать большие деформации

3. Архитектура нейронной сети

3.1. ICNN (Input Convex Neural Network)

CLANN использует строго выпуклую нейронную сеть:

$$\begin{aligned} z &= \frac{\mathrm{softplus}(\beta W_1 \xi)}{\beta} \\ \psi &= W_2^T z + b_2 \end{aligned} \tag{2}$$

где:

- $W_1 \in \mathbb{R}^{H\times 3}$ - матрица весов первого слоя
- $W_2 \in \mathbb{R}_+^H$ - неотрицательные веса второго слоя (обеспечивают выпуклость)
- β - параметр сглаживания (при $\beta \to \infty$ получаем ReLU)

3.2. Математическое обоснование выпуклости

Функция $\psi(\xi)$ строго выпукла, поскольку:

1. $\mathrm{softplus}(\beta x)/\beta$ - выпуклая функция
2. Композиция выпуклой функции с линейным отображением выпукла
3. Линейная комбинация с неотрицательными весами сохраняет выпуклость

4. Вычисление напряжений

4.1. Основное соотношение

Напряжения вычисляются как производные энергии по деформации:

$$S = \frac{\partial \psi}{\partial C} \tag{3}$$

4.2. Цепное правило дифференцирования

Поскольку $\psi = \psi(\xi(C))$, применяем цепное правило:

$$\frac{\partial \psi}{\partial C} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial C} \tag{4}$$

4.3. Явные формулы для компонент

В коде реализованы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} S_{11} &= e^{-2\xi_1}(g_1 - 2\xi_3 g_3) + e^{-2\xi_2} g_2 \xi_3^2 \\ S_{22} &= e^{-2\xi_2} g_2 \\ S_{12} &= -e^{-2\xi_2} g_2 \xi_3 + e^{-2\xi_1} g_3 \end{aligned} \tag{5}$$

где $g_i = \frac{\partial \psi}{\partial \xi_i}$.

5. Вычисление гессиана

5.1. Матрица жёсткости

Для решения методом Ньютона требуется гессиан:

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \tag{6}$$

5.2. Аналитическое вычисление

В `HessianWrapper1L` реализовано аналитическое вычисление:

$$\begin{aligned} s &= W_1\xi + b_1 \\ \sigma &= \text{sigmoid}(\beta s) \\ \sigma' &= \beta\sigma(1-\sigma) \\ H_{ij} &= \sum_h \sigma'_h w_{2,h} W_{h,i} W_{h,j} \end{aligned} \tag{7}$$

6. Функция потерь и обучение

6.1. Основная функция потерь

$$L = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \|S_{pred}^{(i)} - S_{exp}^{(i)}\|^2 \tag{8}$$

где S_{pred} и S_{exp} - предсказанные и экспериментальные напряжения.

6.2. Дополнительные слагаемые

6.2.1. Якорь при единичной деформации

$$L_{SI} = \|S(I)\|^2 \tag{9}$$

Гарантирует, что при отсутствии деформации ($C = I$) напряжения равны нулю.

6.2.2. Якорь производных при нулевой деформации

$$L_{d\psi} = \|\nabla_\xi \psi(0)\|^2 \tag{10}$$

6.2.3. Нормировка энергии

$$L_\psi = \|\psi(0)\|^2 \tag{11}$$

6.3. Полная функция потерь

$$L_{total} = L + \lambda_{SI}L_{SI} + \lambda_{d\psi}L_{d\psi} + \lambda_\psi L_\psi \tag{12}$$

7. Математические свойства

7.1. Физическая корректность

1. **Объективность**: модель инвариантна относительно поворотов
2. **Выпуклость**: гарантирует единственность решения
3. **Положительность энергии**: $\psi \geq 0$ для всех допустимых деформаций

7.2. Стабильность

- Строгая выпуклость обеспечивает стабильность численного решения
- Гессиан положительно определён, что гарантирует сходимость метода Ньютона

7.3. Асимптотическое поведение

При малых деформациях модель воспроизводит линейную упругость:

- $S \approx 2\mu\varepsilon$ для малых ε
- $H \approx \text{const}$ в окрестности $C = I$

8. Термодинамическая корректность

8.1. Основные принципы термодинамики

CLANN обеспечивает термодинамическую корректность через **прямое вычисление напряжений из дифференцирования функции энергии** - это фундаментальный принцип гиперупругой механики.

8.1.1. Первый закон термодинамики (сохранение энергии)

Модель основана на концепции потенциальной энергии деформации ψ, что автоматически обеспечивает:

- Сохранение энергии в замкнутых системах
- Обратимость деформаций (гиперупругость)
- Отсутствие диссипации энергии

Ключевой механизм: все напряжения вычисляются как производные энергии:

$$S = \frac{\partial \psi}{\partial C} \tag{13}$$

Это гарантирует, что работа напряжений при любом замкнутом цикле деформации равна нулю, что является прямым следствием первого закона термодинамики.

8.1.2. Второй закон термодинамики (рост энтропии)

В рамках гиперупругой модели второй закон выполняется автоматически, поскольку:

- Процесс деформации квазистатический
- Отсутствуют необратимые процессы
- Энергия полностью определяется текущим состоянием деформации

8.2. Механизмы обеспечения термодинамической корректности

8.2.1. Прямое вычисление напряжений из энергии

Фундаментальный принцип: термодинамическая корректность достигается через строгое соблюдение соотношений гиперупругой механики:

1. **Определение напряжений через энергию**:

$$S = \frac{\partial \psi}{\partial C} \tag{14}$$

   Это соотношение является прямым следствием первого закона термодинамики и гарантирует, что:

   - Напряжения являются консервативными силами
   - Работа напряжений не зависит от пути деформации
   - Энергия полностью восстанавливается при разгрузке

2. **Цепное правило дифференцирования**: Поскольку $\psi = \psi(\xi(C))$, применяем:

$$\frac{\partial \psi}{\partial C} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial C} \tag{15}$$

   где $\frac{\partial \psi}{\partial \xi}$ вычисляется через нейронную сеть, а $\frac{\partial \xi}{\partial C}$ - аналитически.

3. **Симметрия напряжений**:

$$S_{ij} = S_{ji} \tag{16}$$

   Автоматически обеспечивается симметрией тензора C и соответствующими производными.

8.2.2. Выпуклость функции энергии

Дополнительный механизм: строгая выпуклость $\psi(\xi)$ обеспечивает:

1. **Положительность модулей упругости**:

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi_i \partial \xi_j} > 0 \tag{17}$$

Это гарантирует, что при увеличении деформации энергия растёт быстрее линейной функции.

2. **Стабильность равновесия**:
   - Любое локальное равновесие является глобальным минимумом
   - Отсутствие бифуркаций и катастроф
   - Устойчивость к малым возмущениям
3. **Монотонность напряжений**:

$$\frac{\partial S}{\partial C} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial C^2} > 0 \tag{18}$$

Обеспечивает физически корректное поведение: увеличение деформации приводит к увеличению напряжений.

8.2.3. Логарифмическая параметризация

Параметризация $\xi = \ln(U)$ обеспечивает:

1. **Корректное поведение при больших деформациях**:
   - Логарифм естественным образом ограничивает рост энергии
   - Предотвращает нефизичные значения при экстремальных деформациях
2. **Инвариантность относительно масштабирования**:

$$\psi(\xi + c) = \psi(\xi) + \text{const} \tag{19}$$

Энергия определена с точностью до аддитивной константы.

3. **Симметрия относительно сжатия/растяжения**: Логарифмическая параметризация обеспечивает симметричное поведение при сжатии и растяжении.

8.2.4. Якорные условия

Дополнительные слагаемые в функции потерь обеспечивают:

1. **Нормировка энергии**:

$$L_\psi = \|\psi(0)\|^2 \Rightarrow \psi(0) = 0 \tag{20}$$

Энергия в недеформированном состоянии равна нулю.

2. **Нулевые напряжения в равновесии**:

$$L_{SI} = \|S(I)\|^2 \Rightarrow S(I) = 0 \tag{21}$$

При отсутствии деформации напряжения равны нулю.

3. **Стабильность в равновесии**:

$$L_{d\psi} = \|\nabla_\xi \psi(0)\|^2 \Rightarrow \nabla_\xi \psi(0) = 0 \tag{22}$$

Недеформированное состояние является критической точкой энергии.

8.2.5. Развёрнутый вывод через цепное правило и соответствие коду

Пусть полная потенциальная энергия деформации задаётся композиционно

$$\Psi(C) = \psi(\xi(C)), \quad C = F^\top F, \quad C = U^\top U, \; \xi = (\ln u_{11}, \ln u_{22}, u_{12}/u_{11}). \tag{23}$$

Тензор ПК2 определяется как

$$S = \frac{\partial \Psi}{\partial C}. \tag{24}$$

Применяя цепное правило к $\Psi(C)$, получаем эквивалентную запись

$$\frac{\partial \Psi}{\partial C} = \frac{\partial \psi}{\partial \xi} : \frac{\partial \xi}{\partial C} \equiv g(\xi) : J(C), \tag{25}$$

где $g(\xi) = \partial\psi/\partial\xi \in \mathbb{R}^3$ и $J(C) = \partial\xi/\partial C$ — тензор Якоби.

В размерности 2D при выбранной параметризации ξ и разложении Холецкого $C = U^\top U$ аналитическая подстановка даёт явные формулы для компонент S:

$$\begin{aligned} S_{11} &= e^{-2\xi_1}\big(g_1 - 2\xi_3 g_3\big) + e^{-2\xi_2}\, g_2\, \xi_3^2, \\ S_{22} &= e^{-2\xi_2}\, g_2, \\ S_{12} &= -e^{-2\xi_2}\, g_2\, \xi_3 + e^{-2\xi_1}\, g_3. \end{aligned} \tag{26}$$

Тем самым, вычисление S через $g\,J$ полностью эквивалентно «прямому» $\partial\Psi/\partial C$ и обеспечивает гиперупругость (консервативность) поля напряжений: $\exists\,\Psi : S = \partial\Psi/\partial C \Rightarrow \oint S : dC = 0$.

Практическое соответствие коду: сначала вычисляется $g = \partial\psi/\partial\xi$ автодифференцированием по ξ, затем применяется аналитическая формула выше (функция `S_from_xi`), что реализует умножение на $J = \partial\xi/\partial C$.

Альтернативный, эквивалентный путь — сначала получить $\Sigma = \partial\psi/\partial U$ и восстановить S из уравнения Сильвестра $SU^\top + US = 2\,\Sigma$ (см. `sylv_symm_upper`), что также следует из цепного правила через связку $C = U^\top U$.

Предпосылки корректности: C — SPD (корректность U и логарифмов), ψ — скалярный потенциал (g — истинный градиент), зависимость только от C (объективность).

8.3. Термодинамические ограничения

8.3.1. Положительность энергии

$$\psi(\xi) \geq 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^3 \tag{27}$$

Обеспечивается через:

- Неотрицательные веса $W_2 \geq 0$
- Положительность функции активации $\mathrm{softplus}(x) \geq 0$

8.3.2. Рост энергии при деформации

$$\psi(\xi) \to \infty \quad \text{при} \quad \|\xi\| \to \infty \tag{28}$$

Гарантируется выпуклостью и логарифмической параметризацией.

8.3.3. Симметрия напряжений

$$S_{ij} = S_{ji} \tag{29}$$

Обеспечивается симметрией тензора C и соответствующими производными.

8.3.4. Консервативность напряжений

Ключевое свойство: напряжения являются консервативными силами, поскольку они получены как градиент скалярной функции энергии:

$$\oint S : dC = 0 \tag{30}$$

для любого замкнутого цикла деформации. Это прямое следствие того, что $S = \frac{\partial \psi}{\partial C}$.

8.4. Связь с классическими моделями

8.4.1. Линейная упругость

При малых деформациях CLANN воспроизводит закон Гука:

$$S \approx 2\mu\varepsilon + \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon) I \tag{31}$$

где μ, λ - коэффициенты Ламе.

8.4.2. Нелинейные модели

CLANN обобщает классические гиперупругие модели:

- **Модель Нео-Гука**: $\psi = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3)$
- **Модель Муни-Ривлина**: $\psi = C_1(I_1 - 3) + C_2(I_2 - 3)$
- **Модель Огдена**: $\psi = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mu_i}{\alpha_i}(\lambda_1^{\alpha_i} + \lambda_2^{\alpha_i} + \lambda_3^{\alpha_i} - 3)$

Важно: все эти классические модели также основаны на принципе $S = \frac{\partial \psi}{\partial C}$, что подтверждает термодинамическую корректность подхода CLANN.

8.5. Численная стабильность

Термодинамическая корректность обеспечивает:

1. **Сходимость метода Ньютона**:
   - Положительная определённость гессиана
   - Отсутствие сингулярностей
2. **Устойчивость временной интеграции**:
   - Сохранение энергии в консервативных схемах
   - Отсутствие численных неустойчивостей
3. **Корректность граничных условий**:
   - Автоматическое удовлетворение принципа виртуальной работы
   - Корректная передача напряжений через границы элементов
4. **Консервативность численной схемы**:
   - Работа напряжений при замкнутых циклах деформации равна нулю
   - Сохранение полной энергии системы

9. Численные аспекты

9.1. Разложение Холецкого

Используется для параметризации:

$$U = \text{cholesky\_upper}(C) \tag{32}$$

9.2. Автоматическое дифференцирование

PyTorch autograd используется для вычисления:

- $\nabla_\xi \psi$

- $\nabla_C \psi$ через цепное правило

9.3. ONNX экспорт

Для интеграции в FE-код используются специальные обёртки:

- `DerivWrapper1L`: вычисляет градиент без autograd
- `HessianWrapper1L`: вычисляет гессиан аналитически

10. Применение в биомеханике

10.1. Преимущества для мягких тканей

1. **Нелинейность**: корректно описывает нелинейное поведение биологических тканей
2. **Несжимаемость**: может быть учтена через ограничения
3. **Анизотропия**: может быть расширена для описания анизотропных материалов

10.2. Ограничения

1. **Изотропность**: базовая модель предполагает изотропный материал
2. **Гиперупругость**: не учитывает вязкоупругие эффекты
3. **Пластичность**: не моделирует необратимые деформации

11. Заключение

CLANN представляет собой математически строгую и физически корректную модель для описания гиперупругого поведения материалов. Использование выпуклых нейронных сетей и логарифмической параметризации обеспечивает:

- Гарантированную сходимость численных методов
- Физическую корректность предсказаний
- Эффективную интеграцию в FE-код
- **Термодинамическую корректность** через прямое вычисление напряжений из дифференцирования функции энергии

Ключевой принцип: термодинамическая корректность достигается не через дополнительные ограничения, а через строгое соблюдение фундаментального соотношения гиперупругой механики $S = \frac{\partial \psi}{\partial C}$. Это обеспечивает:

- Консервативность напряжений (работа при замкнутых циклах равна нулю)
- Независимость работы от пути деформации
- Полное восстановление энергии при разгрузке
- Автоматическое соблюдение законов термодинамики

Модель особенно подходит для моделирования мягких биологических тканей, где важны нелинейные эффекты и стабильность численного решения. Термодинамическая корректность делает CLANN особенно привлекательной для долгосрочных симуляций и критических приложений в биомеханике.

Author Contributions: Автор внёс полный вклад в разработку математического описания и анализ модели CLANN.

Funding: Данное исследование не получило внешнего финансирования.

Institutional Review Board Statement: Не применимо.

Informed Consent Statement: Не применимо.

Data Availability Statement: Не применимо.

Acknowledgments: Автор выражает благодарность за поддержку в разработке математического описания модели CLANN.

Conflicts of Interest: Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Сокращения

CLANN	Convex Laplace Artificial Neural Network
ICNN	Input Convex Neural Network
FE	Finite Element
SPD	Symmetric Positive Definite

Литература

. Author 1, T. The title of the cited article. *Journal Abbreviation* **2024**, *10*, 142–149.