

CLaNN: Выпуклая нейронная сеть для основанной на данных симуляции биомембраны с использованием деформации Лапласа

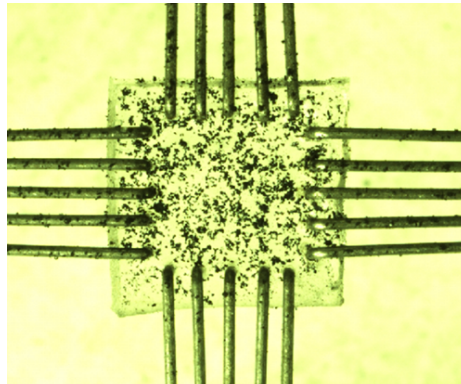
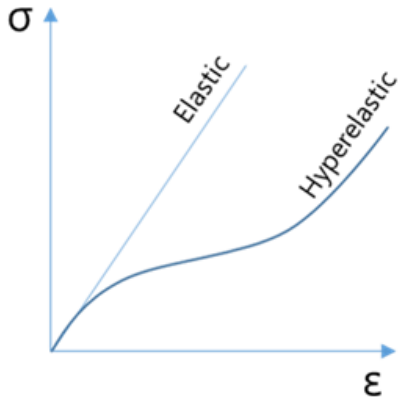
Диц Даниил Денисович¹ Легкий Алексей Андреевич^{2,3} Саламатова Виктория
Юрьевна² Овсепьян Артур^{1,2}

¹НТУ «Сириус»

²ПМГМУ

³ИВМ РАН

16 октября 2025 г.



Овсестьян А. Л. и др. РАЗРАБОТКА ИСПЫТАТЕЛЬНОЙ МАШИНЫ ДЛЯ ДВУХОСНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ МЯГКИХ ТКАНЕЙ И БИОМАТЕРИАЛОВ //Российский журнал биомеханики. – 2023. – Т. 27. – №. 4. – С. 12-24.

Математическая формулировка задачи равновесия

- Уравнение механического равновесия в дифференциальной форме:

$$\operatorname{div} \sigma + b = 0 \text{ при } x \in \Omega_t,$$

где $b = b(x)$ - плотность внешних сил, $\sigma = \sigma(x, \nabla x)$ - тензор напряжений

- Смешанные граничные условия $[\partial\Omega_t = \Gamma_u(t) \cup \Gamma_\sigma(t)]$:

$$x = \bar{x} \text{ на } \Gamma_u(t), \quad \sigma_n = 0 \text{ на } \Gamma_\sigma(t)$$

Математическая формулировка задачи равновесия

- Уравнение механического равновесия в дифференциальной форме:

$$\operatorname{div} \sigma + b = 0 \text{ при } x \in \Omega_t,$$

где $b = b(x)$ - плотность внешних сил, $\sigma = \sigma(x, \nabla x)$ - тензор напряжений

- Смешанные граничные условия $[\partial\Omega_t = \Gamma_u(t) \cup \Gamma_\sigma(t)]$:

$$x = \bar{x} \text{ на } \Gamma_u(t), \quad \sigma_n = 0 \text{ на } \Gamma_\sigma(t)$$

- Принцип виртуальной работы в случае гиперупругого материала:

найти такое $x \in \tilde{H}^1(\Omega_t) \stackrel{\text{def}}{=} \{\vec{v} \in (H^1(\Omega_t))^3 : v = \bar{x} \text{ на } \Gamma_u\}$ что

$$\delta I = \delta(W - U) = 0,$$

где

$$\delta U = \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_{\Omega_0} \psi(\nabla x) d\Omega \right) \cdot \delta x, \quad \delta W = \int_{\Omega_t} b \cdot \delta x \, d\Omega$$

Постановка задачи

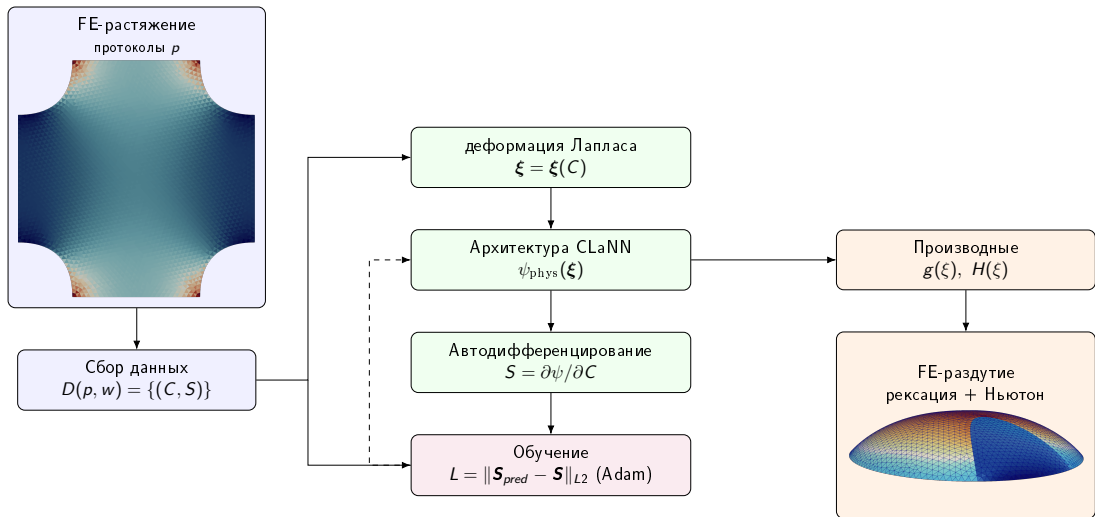
- **Цель:** основанная на данных симуляция гиперупругих материалов.
- **Требования:** выпуклость, объективность, термодинамическая корректность, материальная устойчивость, хорошая способность к экстраполяция.
- **Подход:** выпуклая по входу нейронная сеть (ICNN) + метод узловых сил для решения задачи стационарного равновесия мембраны.

Amos B., Xu L., Kolter J. Z. Input Convex Neural Networks // International Conference on Machine Learning, PMLR, 2017, pp. 146–155.

Саламатова В. Ю., Легкий А. А. Метод гиперупругих узловых сил для расчёта деформации нелинейных мембран // Дифференциальные уравнения, 2020, 56(7), 975–983.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-20075

Вычислительный контур



- $\mathbf{X} \in \Omega_0$ — начальная конфигурация, $\mathbf{x} \in \Omega_t$ — текущая конфигурация
- $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t)$ — деформация
- $\mathbb{F}$ — градиент деформации: $\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$
- $\mathbb{C} = \mathbb{F}^\top \mathbb{F} = \mathbb{U}^\top \mathbb{U}$ — правый тензор деформации Коши-Грина
- $\xi_1 = \ln(u_{11})$, $\xi_2 = \ln(u_{22})$, $\xi_3 = \frac{u_{12}}{u_{11}}$, $\mathbb{U} = u_{\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\beta$. — деформация Лапласа.

Freed, A.D., Zamani, S., Szabó, L. and Clayton, J.D., 2020. Laplace stretch: Eulerian and Lagrangian formulations. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 71(5), p.157.

Второй тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа:

$$\mathbb{S} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{C}} = 2 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}} = 2 \mathbf{r}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbb{C}}, \quad \mathbf{r} := \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (1)$$

Явная связь второго тензора напряжений Пиолы-Кирхгофа $\mathbb{S}$ и деформации Лапласа $\boldsymbol{\xi}$ при помощи функций отклика $\mathbf{r}$

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

"Хорошие" свойства такого построения

- Объективность: $\psi(\mathbb{C}) = \psi(Q^T \mathbb{C} Q)$ для любой ортогональной Q , а значит и $\mathbb{S}$ инвариантен к поворотам.
- Симметрия напряжений: $\mathbb{S} = \mathbb{S}^T$ вследствие симметрии $\mathbb{C}$ и корректного применения цепного правила.

Ball J. M. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity // Archive for rational mechanics and Analysis. – 1976. – Т. 63. – №. 4. – С. 337-403.

"Хорошие" свойства такого построения

- Объективность: $\psi(\mathbb{C}) = \psi(Q^T \mathbb{C} Q)$ для любой ортогональной Q , а значит и $\mathbb{S}$ инвариантен к поворотам.
- Симметрия напряжений: $\mathbb{S} = \mathbb{S}^T$ вследствие симметрии $\mathbb{C}$ и корректного применения цепного правила.
- **Термодинамическая корректность**: равенство (1) является следствием неравенства Клаузиуса–Дюгема $\mathcal{D} = \mathbb{S} : \dot{\mathbb{C}} - \dot{\psi}(\mathbb{C}) \geq 0$, выражающее второе начало термодинамики для механических процессов.
- Хотелось бы **выпуклость** $\psi(\xi)$, которая дает возможность использования градиентных методов решения уравнений, численную устойчивость.

Ball J. M. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity // Archive for rational mechanics and Analysis. – 1976. – Т. 63. – №. 4. – С. 337-403.

Ограничения на гиперупругую модель

Неотрицательность исключает отрицательную энергию деформации

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

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

$$\psi(0) = 0, \quad \mathbf{S}(\mathbf{I}) = 0, \quad (4)$$

Бесконечный рост (коэрцитивность).

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) \rightarrow \infty \text{ при } \|\boldsymbol{\xi}\| \rightarrow \infty, \quad \mathbf{S} \rightarrow \infty \text{ при } J \rightarrow \infty \text{ или } J \rightarrow 0^+, \quad J = \det \mathbf{F}, \quad (5)$$

1. Феноменологический подход

- Требуется выбора феноменологической модели и подгонки параметров к данным.
- $\psi(F) = f(F, a_1, \dots, a_n)$, где f — известная функция, a_i — неизвестные параметры.
- Достоинства: удобство численной реализации; элегантные формулировки.
- Недостатки: мало независимых данных; много параметров; десятки видов потенциалов.

2. Микроструктурный подход

- Суммируется вклад основных структурных компонентов.

- $$\psi(F) = \sum_{i=1}^N f_i \psi_i, \quad \psi_i = \int_{\theta_0}^{\theta_1} \mathcal{R}_i(\theta) w_i(e) d\theta.$$

- f_i — объёмная доля; θ — ориентация волокна; $\mathcal{R}_i(\theta)$ — функция распределения; $w_i(e)$ — энергия деформации волокна; e — его деформация.
- Достоинства: учёт микроструктуры.
- Недостатки: сложность численных реализаций; необходимость данных о микроструктуре; часто нет взаимодействия волокон.

3. Data-driven подход

- Обобщённая форма: $\psi(F) = f(\xi_1(F), \dots, \xi_n(F))$, где f — неизвестная функция, ξ_i — заданные меры; тогда $\frac{\partial \psi}{\partial F} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial F}$.
- Меры: на основе полярного разложения F ; на основе верхнетреугольного разложения F (Laplace stretch).
- Достоинства: full-field measurements; не требуется априорный выбор вида ψ .
Недостатки: экстраполяция данных.

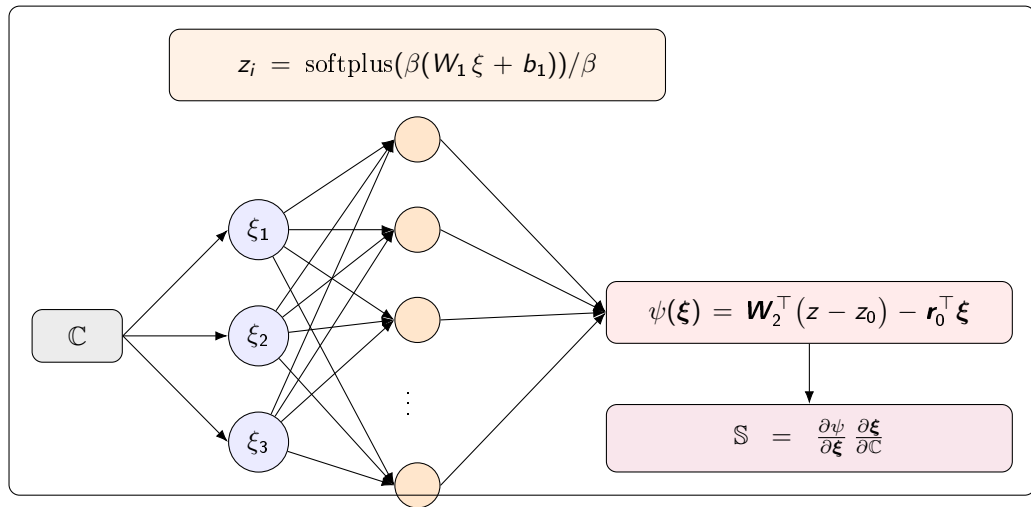
kNN и взвешивание расстояния (IDW) для (ξ, r)

- **k ближайших соседей (kNN).** Для заданной точки деформации Лапласа ξ_* ищутся k ближайших образцов $\{(\xi^{(i)}, r^{(i)})\}_{i=1}^k$ по метрике в пространстве ξ (обычно евклидова норма).
- **Интерполяция отклика.** Отклик в точке оценивается как взвешенная комбинация соседей:

$$\hat{r}(\xi_*) = \sum_{i=1}^k w_i(\xi_*) r^{(i)}, \quad \sum_i w_i = 1, \quad w_i \geq 0.$$

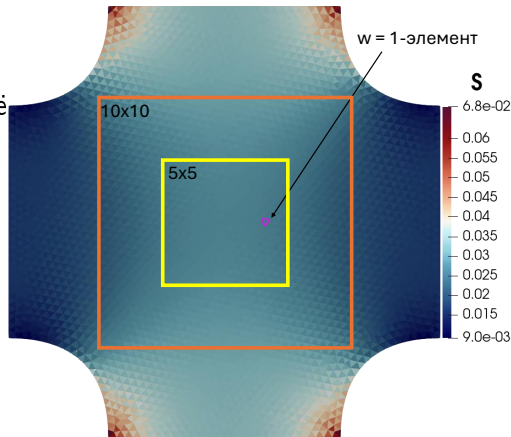
- **IDW-веса (inverse distance weighting).** Принимается $w_i = \frac{d_i^{-p}}{\sum_{j=1}^k d_j^{-p}}$, где $d_i = \|\xi_* - \xi^{(i)}\|$, параметр $p > 0$ (обычно $p \in [1, 4]$) регулирует локальность.

Архитектура CLaNN: однослойная ICNN

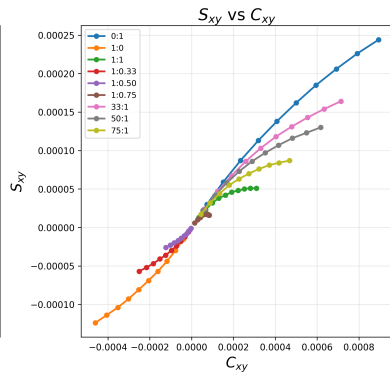
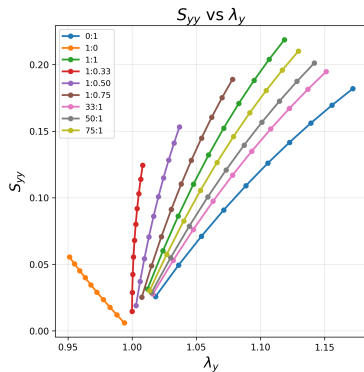
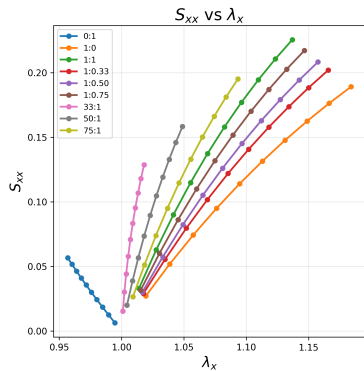


Отбор данных для обучения

- Центральное окно w в исходной конфигурации Ω_0 .
- Варианты: 1-элемент; 5×5 мм; 10×10 мм; всё поле.
- Наблюдения: все треугольники с барицентрами $\mathbf{X}_T \in \mathcal{W}_w \subset \Omega_0$.
- Данные: пары $(\mathbb{C}_T^{(n)}, \mathbb{S}_T^{(n)})$ на шагах $n = 1, \dots, N$.

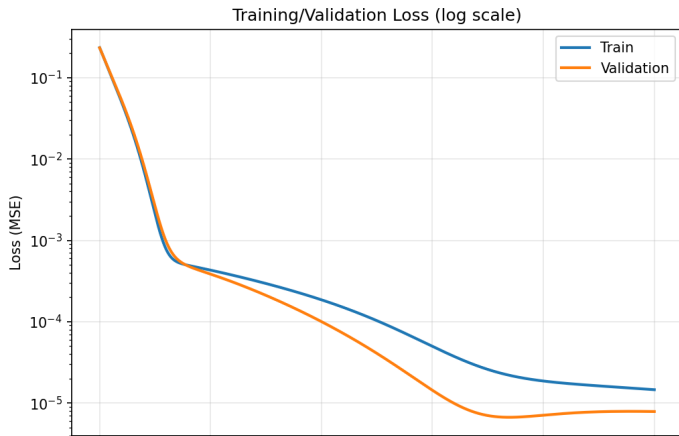


Кривые нагружения



Обучение и гиперпараметры

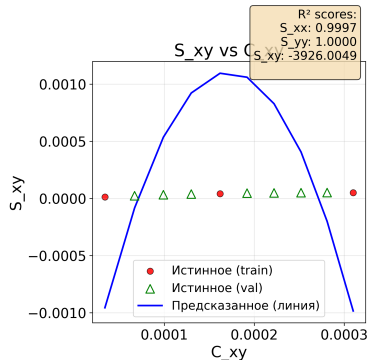
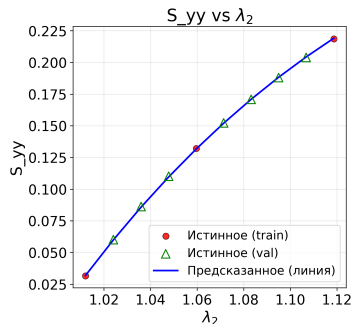
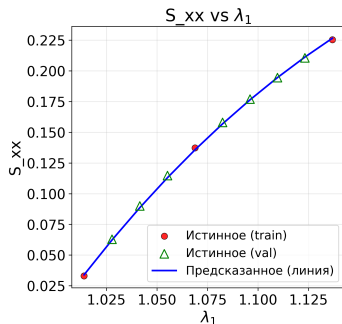
- Потери: $L = \|\mathbb{S}_{pred} - \mathbb{S}\|_2$, оптимизатор Adam.
- Пример: 16 нейронов в скрытом слое, softplus с параметром $\beta = 10$.
- Быстрая сходимость за < 5000 эпох благодаря выпуклости.



Интерполяция кривых нагружения

- Датасет: равнодвухосное растяжение, окно наблюдения 1 элемент.
- Точность: $R_{xx}^2 = 0.999$, $R_{yy}^2 = 0.999$; R_{xy}^2 низкий из-за малых сдвигов.

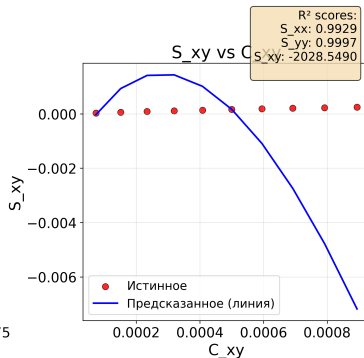
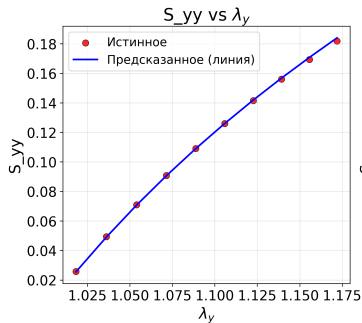
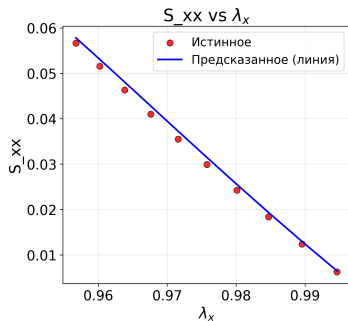
Эксперимент: 1_1_stretch1



Экстраполяция кривых нагружения

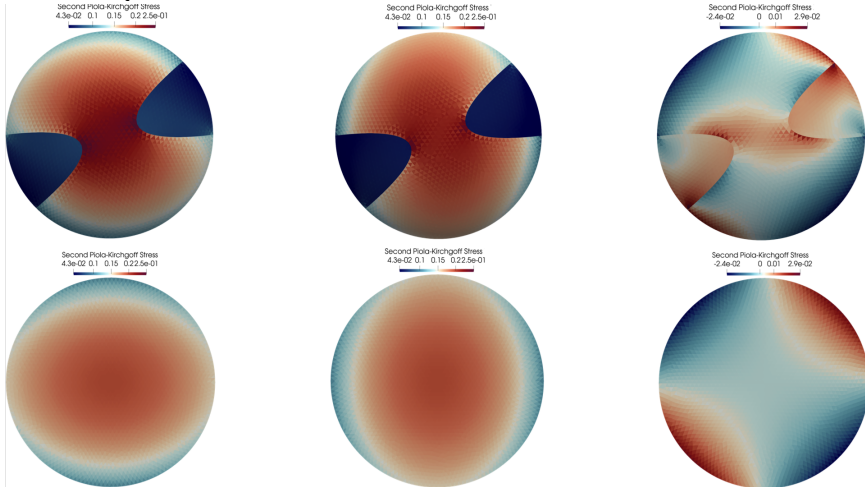
- Обучение на равнодвухосном, проверка на неравнодвухосном.
- Точность: $R_{xx}^2 = 0.993$, $R_{yy}^2 = 1.0$; R_{xy}^2 низкий без сдвиговых данных.

Эксперимент: 0_1_stretch1

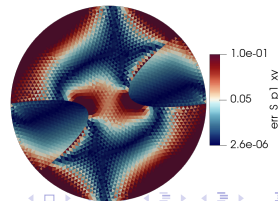
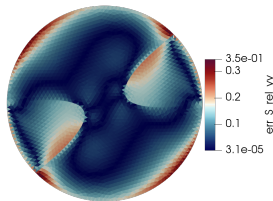
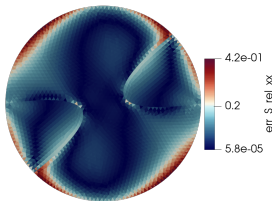
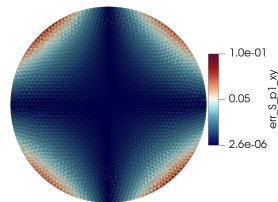
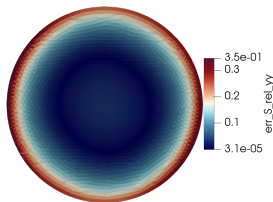
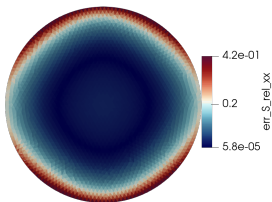


Раздутие мембраны

- Геометрия: круглая мембрана, гомо/гетерогенная толщина.
- Материал: НеоГук



Относительная ошибка напряжения при раздутии мембраны методом CLaNN



Интегральные ошибки и влияние окна

Абсолютная интегральная ошибка (L2 по сетке) для напряжений (Фробениус-норма). где $|K|$ — мера ячейки (объём/площадь/длина). Для ячейечных данных усреднение по ячейке не требуется:

$$\|e\|_{L^2} = \left(\sum_K \|S_{\text{ref},K} - S_{\text{pred},K}\|_F^2 |K| \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6)$$

- Увеличение окна наблюдения снижает $\|e\|_{L^2}$ за счёт включения сдвиговых режимов.

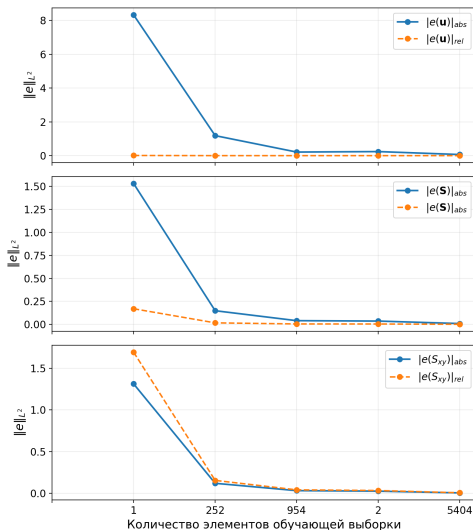


Таблица: Время расчёта (сек) на задаче раздувания: гомогенная vs гетерогенная толщина

Метод	Гомогенная	Гетерогенная
CLaNN	512	329
Neo-Hooke	13	16
kNN	993	–