

**XVII конференция
«Математические модели и численные
методы в биологии и медицине»**

**О подходах к планированию экспериментального исследования
эластомеров и биоматериалов для построения определяющих
соотношений**

Артур Левонович Овсепьян^{1,2}
Руководитель: к.ф.-м.н. Виктория Юрьевна Саламатова¹

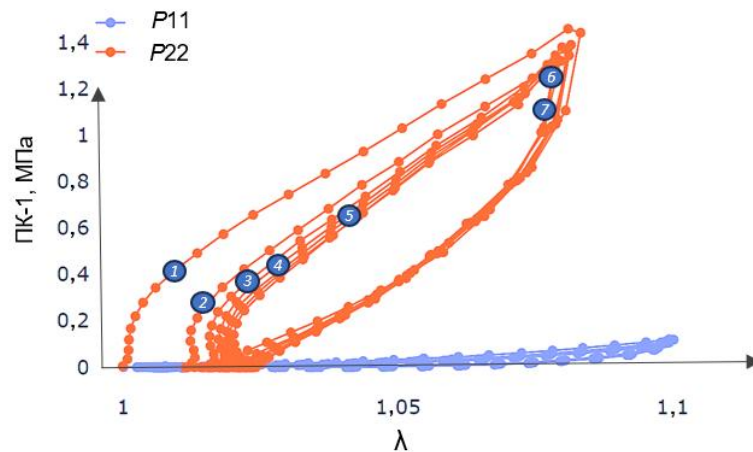
¹ ПМГМУ
² НТУ «Сириус»

2025

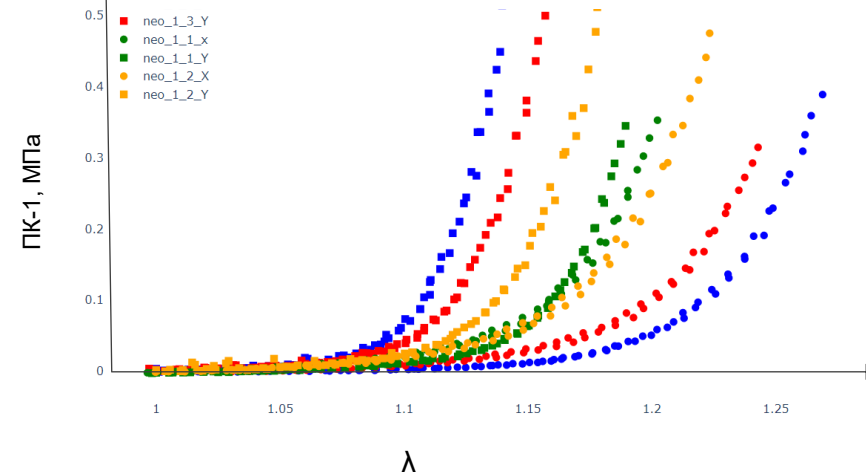
Введение

- Математические модели, способные предсказывать нелинейное механическое поведение мягких материалов при больших деформациях, требуются в инженерных отраслях – от полимерной промышленности, до робототехники и персонализированной медицины [1, 2]. Мягкие материалы, такие как эластомеры и мягкие ткани, обладают сложным, нелинейным откликом на приложенные нагрузки.

1. Кривые нагружения полимера



2. Кривые нагружения перикарда



- Теоретическая база моделирования механики эластомеров и биоматериалов – нелинейная теория упругости. Широко распространены гиперупругие модели механики (определяющие соотношения) [3].

Гиперупругий материал

- В гиперупругой постановке постулируется существование упругого потенциала $\psi(\mathbb{F})$ (далее $\mathbb{W}$), зависящего от выбранной меры деформации, который полностью описывает механическое поведение материала и тензор напряжения Коши принимает вид:

$$\sigma = \frac{1}{J} \frac{\partial \psi(\mathbb{F})}{\partial \mathbb{F}} \mathbb{F}^T, \quad J = \det \mathbb{F}$$

$\mathbb{F}$ – градиент деформации, определяемый как $\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$ (в приложении)

- Подходы к построению гиперупругого потенциала:

Феноменологический – требует выбора формы потенциала $\psi(\mathbb{F}) = f(I\mathbb{F}, a_1, \dots, a_n)$, где f – известная функция, a_i – неизвестные параметры, которые необходимо подогнать [3].

Основанный на данных – может быть задан в частных производных (функциях отклика) [4], в парах напряжение-деформация и т. д [5].

Вне зависимости от подхода требуется натурный эксперимент

4. VY Salamatova, AA Liogky // Hyperelastic membrane modelling based on data-driven constitutive relations

5. Data-driven computational mechanics

Механические испытания эластомеров и биоматериалов

И феноменологический и основанный на данных подход невозможны без натурных экспериментов. **Вопрос – каких? Какие нужны протоколы?** Требуется экспериментальная база, позволяющая воспроизводить сложные условия нагружения и для эластомеров и для биоматериалов. Инженерные ASTM F2150–19; ISO 37:2017 не подходят для исследования биоматериалов.

Протокол испытаний – это формализованный, версионизируемый документ и набор процедур, которые однозначно регламентируют подготовку образца, условия среды, схему нагружения и измерения, обработку данных и критерии качества так, чтобы результаты были сопоставимыми, воспроизводимыми и пригодными для построения определяющих соотношений.

Методы редукции обобщенных феноменологических моделей дают разные результаты на разных протоколах [6, 7].

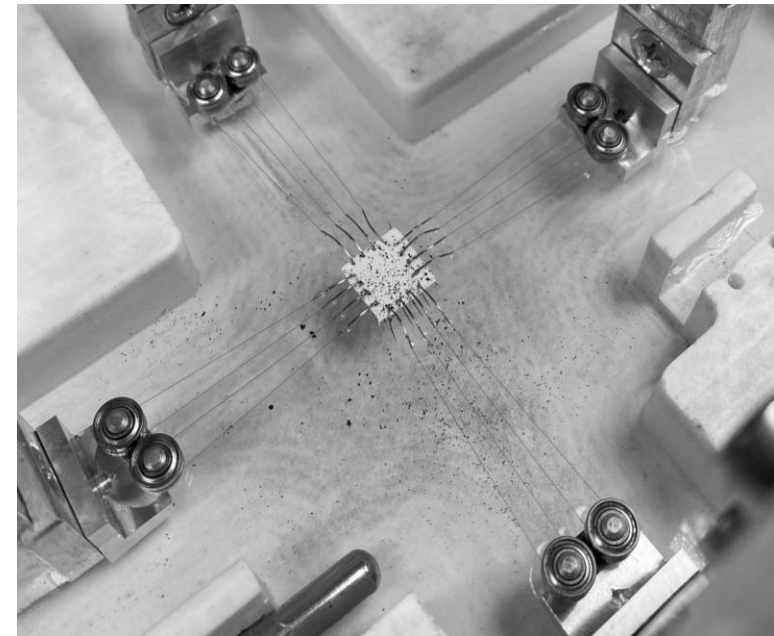
6. On the AIC-based model reduction for the general Holzapfel–Ogden myocardial constitutive law

7. Constitutive modeling of brain tissue: current perspectives

Требования к экспериментальной базе

Современное исследование механических свойств мягких материалов **с учетом их специфики** требует:

1. Полнополевых методов анализа деформаций и напряжений (DIC, VFM, inverse FE и т.д.);
2. Оценки структуры материалов на разных масштабах;
3. Вариативных сценариев нагружения и среды;
4. Сложных схем управления испытательными машинами (обратная связь по деформациям, нагрузкам);
5. Специфичных навыков обращения с образцами;
6. Численных инструментов для планирования эксперимента и т.д.



Определяющее соотношение, основанное на данных. Мера деформаций Лапласа

Задание частных производных потенциала.
Зависит от меры деформации:

$$W(\mathbf{F}) = W(\xi_1(\mathbf{F}), \dots, \xi_n(\mathbf{F})) \longrightarrow \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial W}{\partial \xi_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial \mathbf{F}},$$

где $\xi_i(\mathbf{F})$ – заданные (известные) меры деформации,

$\frac{\partial W}{\partial \xi_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial \xi_n}$ – функции отклика.

ξ_i – мера деформации Лапласа,
предложенная **Srinivasa Int. J. Eng. Sci. 2012.**
Основана на QR-разложении градиента деформации.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{F}}$$

$\tilde{\mathbf{F}}$ может быть получена факторизацией Холецкого
ПТД Коши-Грина.

$$\tilde{F}_{11} = \sqrt{C_{11}}, \quad \tilde{F}_{12} = C_{12}/\tilde{F}_{11}, \quad \tilde{F}_{22} = \sqrt{C_{22} - \tilde{F}_{12}^2}. \text{ и т.д.}$$

$$\xi_1 = \ln(\tilde{F}_{11}), \quad \xi_2 = \ln(\tilde{F}_{22}), \quad \xi_3 = \ln(\tilde{F}_{33}),$$

$$\xi_4 = \frac{\tilde{F}_{12}}{\tilde{F}_{11}}, \quad \xi_5 = \frac{\tilde{F}_{23}}{\tilde{F}_{22}}, \quad \xi_6 = \frac{\tilde{F}_{13}}{\tilde{F}_{11}}.$$

Гиперупругий материал:

$$\tilde{\sigma} = \mathbf{Q}^T \sigma \mathbf{Q},$$

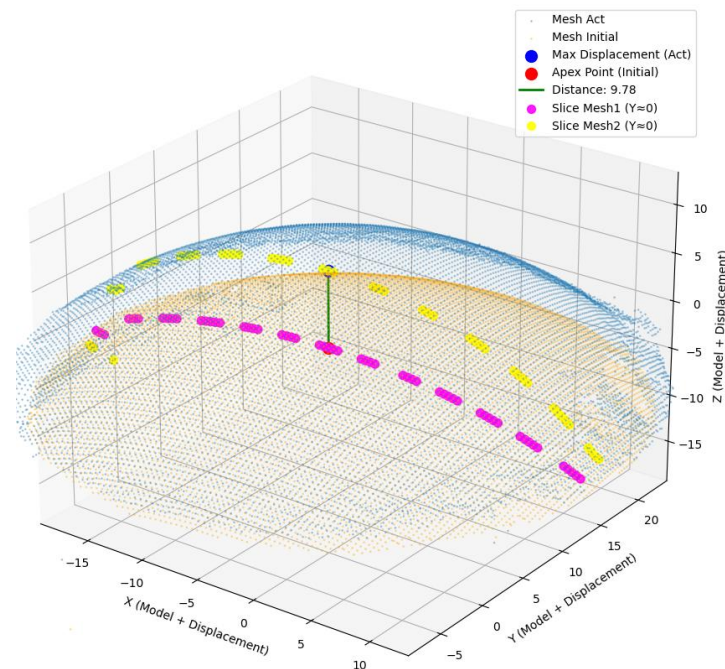
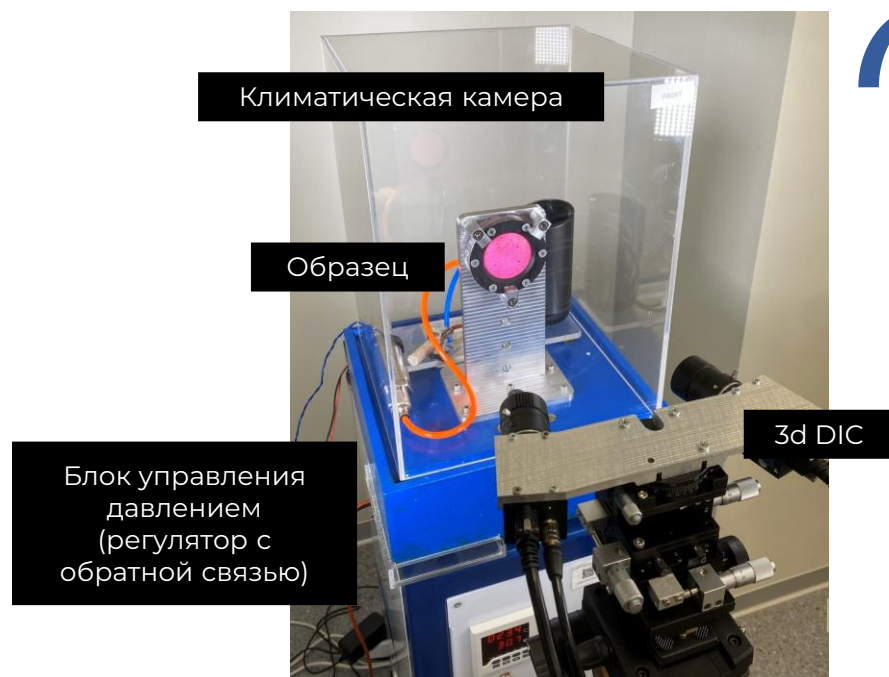
$$\tilde{\sigma}_{ii} = \frac{1}{J} \frac{\partial W}{\partial \xi_i}, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$\tilde{\sigma}_{12} = \frac{1}{J} \frac{\partial W}{\partial \xi_4} + \frac{\tilde{F}_{23}}{\tilde{F}_{33}} \frac{\partial W}{\partial \xi_5},$$

$$\tilde{\sigma}_{13} = \frac{\tilde{F}_{22}}{J \tilde{F}_{11}} \frac{\partial W}{\partial \xi_4}, \quad \tilde{\sigma}_{23} = \frac{\tilde{F}_{33}}{J \tilde{F}_{22}} \frac{\partial W}{\partial \xi_6}.$$

Случай 1. Обогащение эксперимента с изотропной мембраной

Тест на раздувание (инфляция) мембраны



Профили образца в начале эксперимента (фиолетовый) и при давлении 10 кПа (желтый)

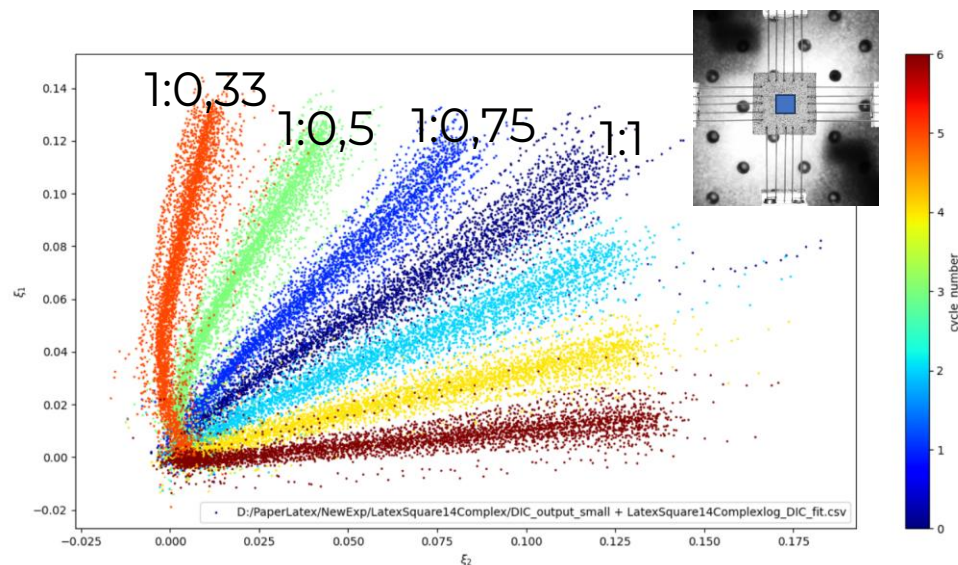
Проблема недостатка данных для основанных на данных определяющих соотношений

Классическое предположение об однородности напряжений и деформаций

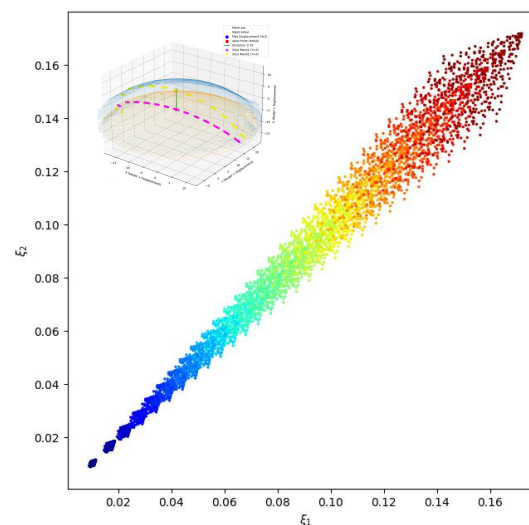
В работе [9] решалась задача нахождения напряжённо-деформированного состояния гиперупругого тела в случае таблично заданных функций отклика (data-driven) и без предположений относительно формы потенциала. Функции отклика задавались мерами деформации Лапласа.

Мотивация – уход от выбора гиперупругого определяющего соотношения. Было показано, что инфляционный эксперимент дает недостаточно данных для достижения сходимости решателя.

Когда как сложный двухосный эксперимент дает «богатые данные» (рис. Слева), позволяя варьировать режимами двухосного нагружения, инфляционный эксперимент изотропной мембраны ограничен равнодвухосными деформациями в полюсе (рис. Справа)

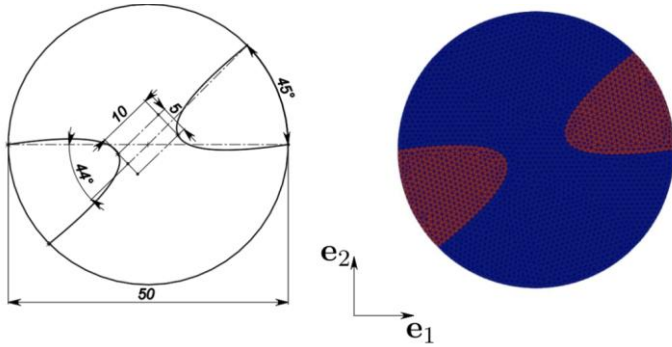


Результаты неравнодвухосного экспериментального протокола в мерах деформации Лапласа

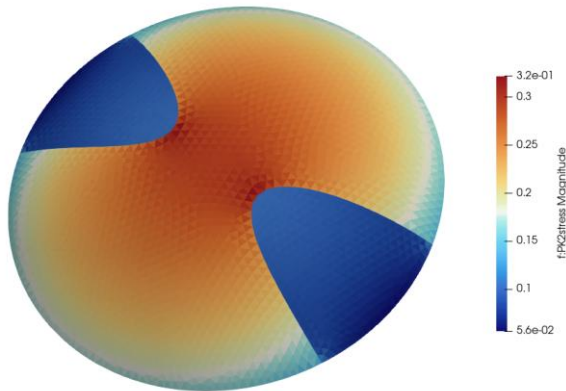


Результаты инфляционного теста в мерах деформации Лапласа. Данные собирались в полюсе образца

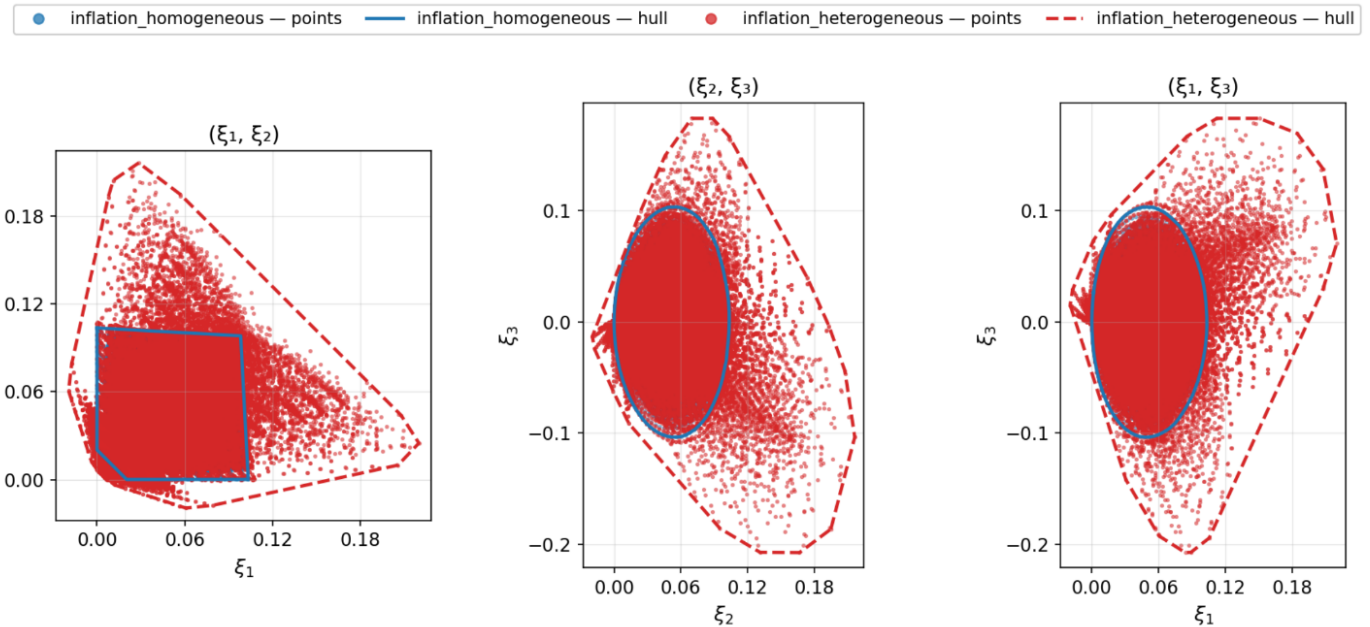
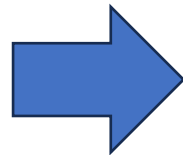
Концентраторы напряжений. Переменная толщина



Геометрия мембраны неоднородной толщины



Генерация синтетических данных



Выпуклые оболочки синтетических данных, собранных при виртуальном надувании мембран однородной и неоднородной толщины

Оценка напряжений

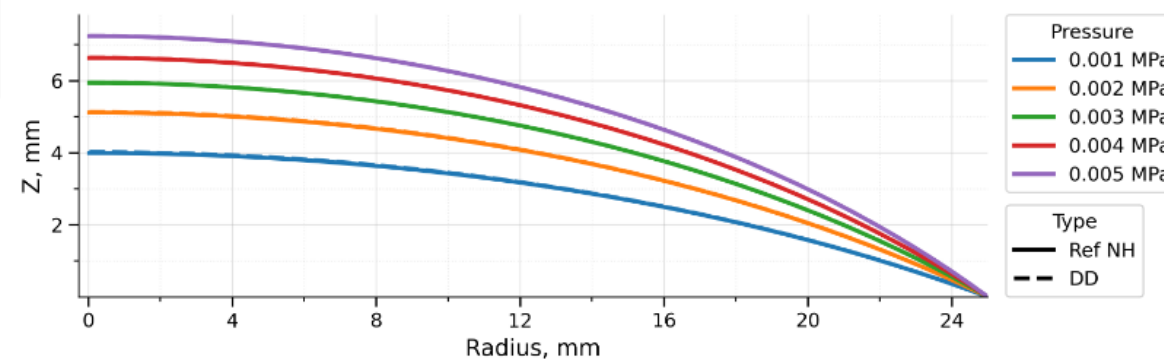
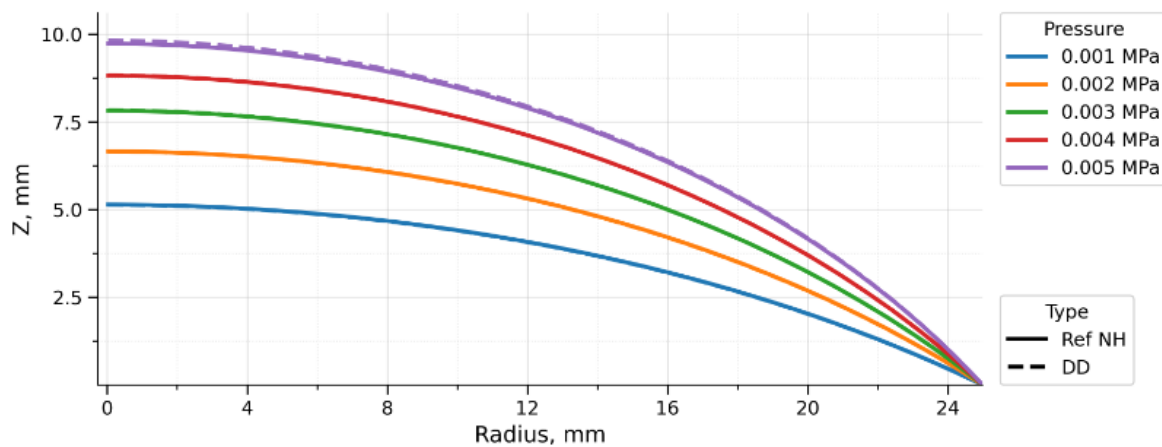
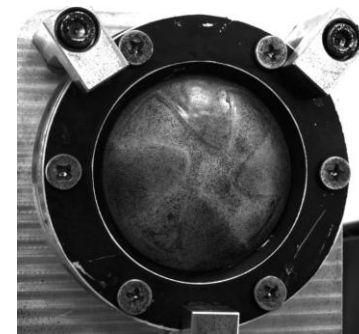
В работе [10] оценивался метод оценки напряжений из экспериментальных данных инфляционного теста. Идея метода SMM (Stiff-Material Method) в «подмене» реального материала сверхжестким, чтобы напрямую искать напряжения на изотропном образце, используя только (!) экспериментальные данные (давления и соответствующие деформации):

1. Берем геометрию деформированной конфигурации Ω_t при давлении P , и объявляем ее «ненапряженной». В случае экспериментальных данных это сетка из 3D DIC (стереокорреляция изображений) и показания датчика давления.
2. Заменяем материал сверхжестким Неогуком с толщиной H_s $W_{\text{SMM}} = \frac{\mu_s H_s}{2} \left(I_1^{(3d)} - 3 \right)$ модулем сдвига $\mu_s \gg \mu_{\text{реал}}$
3. Решаем статическое равновесие с тем же давлением P $\text{div } \mathbf{T} + \mathbf{b} = 0$ в Ω_t $\mathbf{b}$ – поверхностная плотность массовых сил, $\mathbf{T}$ – тензор напряжений Коши, рассматривая равновесие мембраны под нормальным давлением $\kappa_1 T_1 + \kappa_2 T_2 = P$, где κ_1, κ_2 – главные кривизны Ω_t .
4. В результате численных экспериментов для изотропной мембраны с однородной толщиной MAPE по тензору напряжений Коши $\mathbf{T}$ 0.5-3%.

Результат

Был предложен следующий подход к инфляционному эксперименту. Подход состоит из четырёх этапов:

1. Раздуть круглую мембрану с неоднородной толщиной и получить поле перемещений из корреляции цифрового изображения;
2. Оценить поле напряжений методом жёсткого материала на основе статической определимости;
3. Сформировать облако точек в пространстве растяжения Лапласа ξ с данными $\partial\psi/\partial\xi$;
4. Использовать интерполяцию по k -ближайшему/ICNN элементу в облаке точек для получения определяющего соотношения на основе данных.



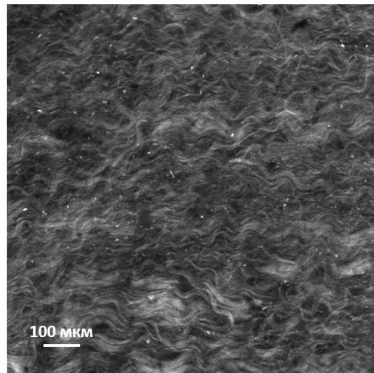
Профили раздутых мембран, полученные с помощью метода конечных элементов с потенциалом Неогуковским потенциалом (Ref NH) и с помощью метода конечных элементов с заданным на основе данных соотношением.

Случай 2. Перикард.

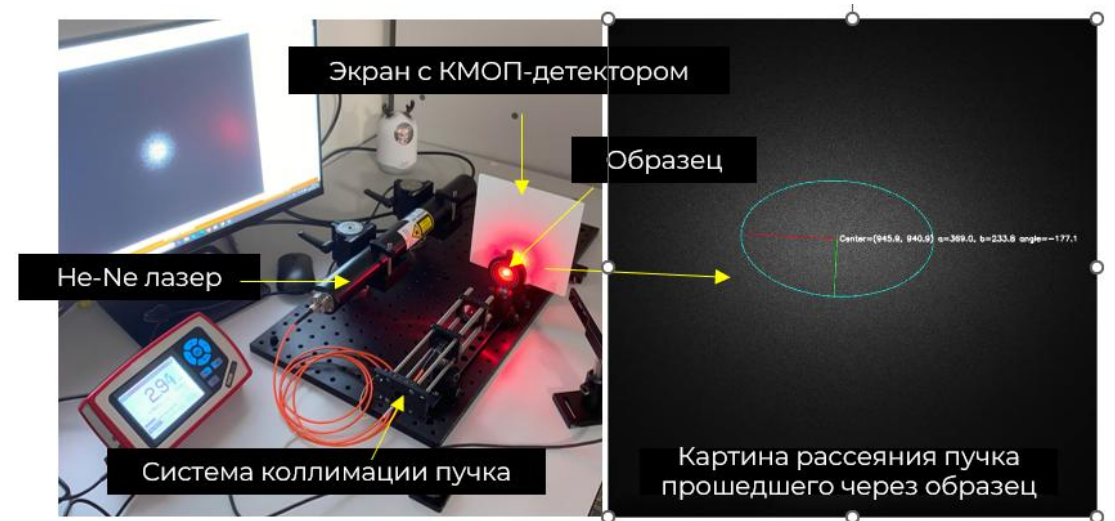
Анализ микроструктуры биоматериалов

Биоматериалы имеют сложную иерархическую микроструктуру, которая во многом определяет их механическое поведение (рис. 1). Для построения математических моделей механики биоматериалов критически важно понимание микроструктурной организации биоматериала. Стандартный спектр микроскопических исследований сложно сочетаем с механическим тестированием.

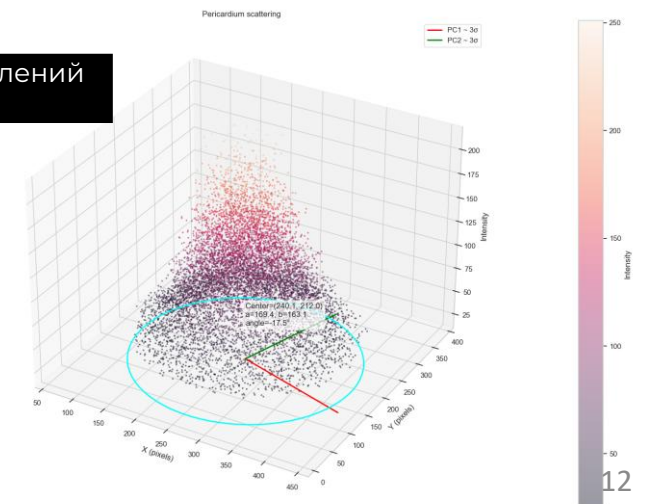
Для оценки микроструктуры образца во время механических испытаний мы применяем **метод малоуглового светорассеяния SALS**, позволяющий локально оценивать характеристики волокон биоматериала – выделенные направления анизотропии, волнистость и др.



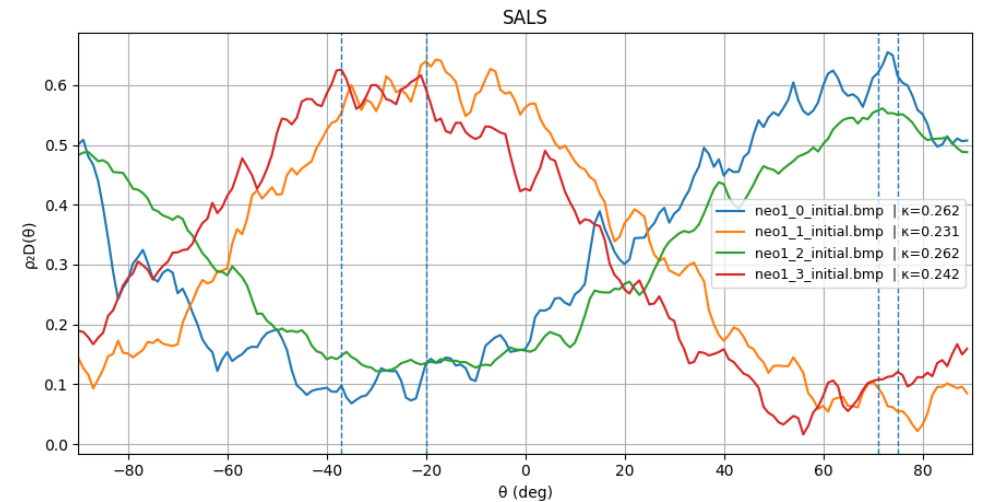
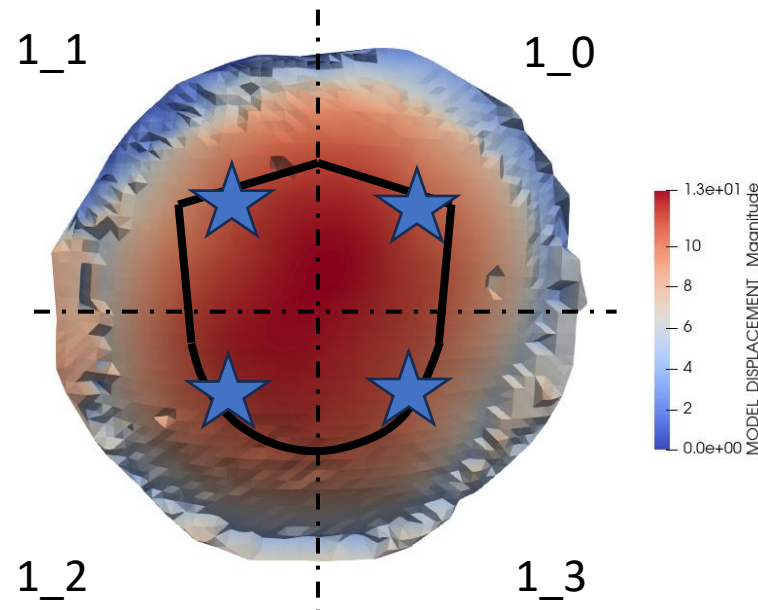
Конфокальная микроскопия перикарда.
Слева – фиброзный, справа – париетальный слой перикарда



Анализ выделенных направлений анизотропии образца



Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения для задачи [] диастолического состояния реконструированного клапана аорты

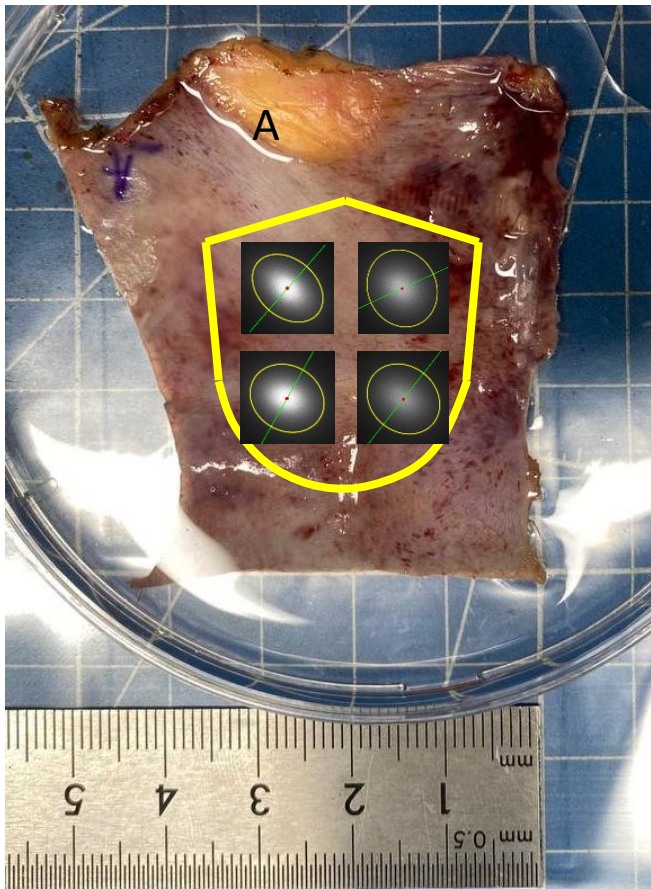


Малоугловое рассеяние в «звездах»

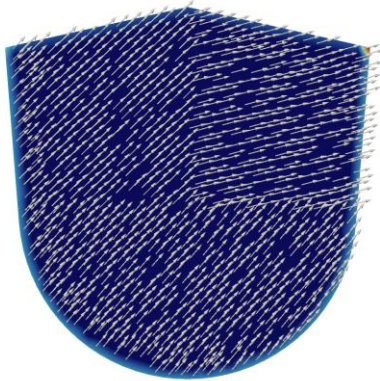
1. Тест на инфляцию ксеноперикарда

Протокол инфляции – 7 циклов
прекондиционирования
8-ой рабочий. Давление – 17 кПа. После
испытания нарезаем и фиксируем
начальное «главное» направление.

Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения?



Оценка локальной анизотропии SALS



FE-сетка с анизотропией из SALS

Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения?

Далее исполняем двухосный протокол по Sommer и подгоняем потенциал

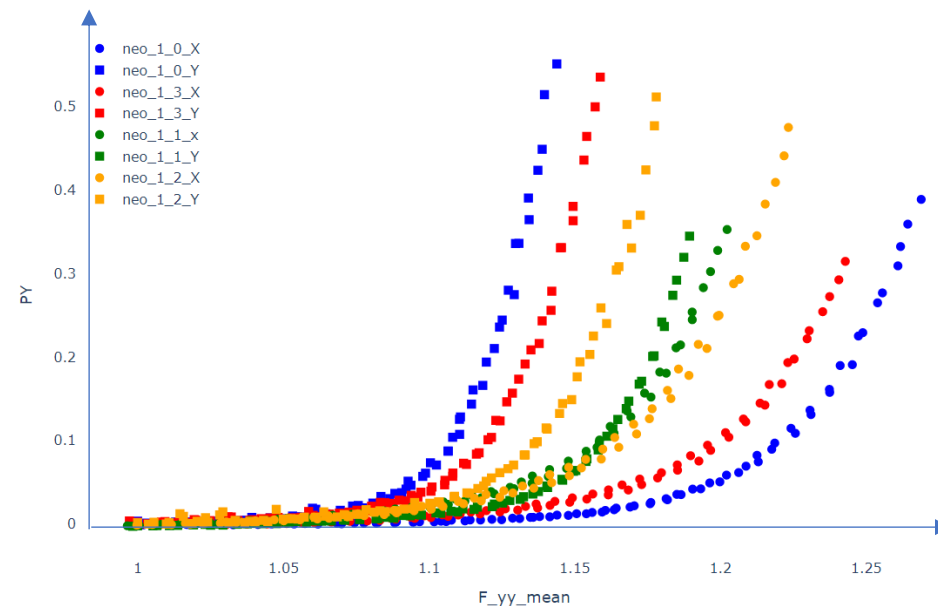
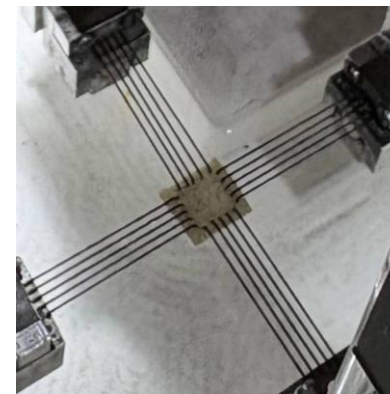
- κ -модель Gasser-Ogden-Holzapfel
- $W_{GOH} = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) + \frac{c_3}{2c_4}(\exp(c_4[\kappa I_1 + (1 - 3\kappa)I_4 - 1]^2) - 1)$, $\mu > 0, c_3 > 0, c_4 > 0, \kappa \in [0; \frac{1}{3}]$, (1)

где μ – модуль сдвига, c_3, c_4 – материальные параметры, $\kappa = \frac{1}{4} \int_0^\pi \rho(\theta) \sin^3 \theta d\theta$ – параметр распределения волокон, где $\rho(\theta)$ – бета-распределение;

При двухосном эксперименте образец растягивается в двух ортогональных направлениях x_1 и x_2 , при этом удлинения возникают в трех направлениях $x_1 = \lambda_1 X_1, x_2 = \lambda_2 X_2, x_3 = \lambda_3 X_3$, тогда матрица градиента деформаций будет диагональной:

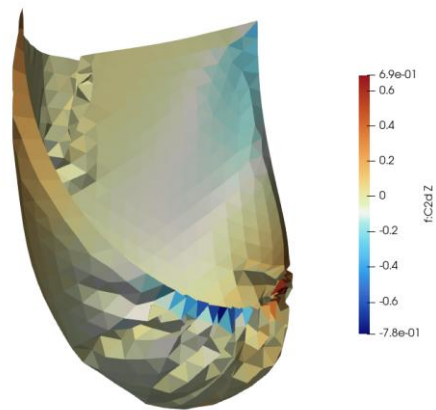
$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

В предположении несжимаемости $I_3 = \det(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) = \lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3^2 = 1$, поэтому λ_3 явно определяется через λ_1 и λ_2 . Тогда $I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + (\lambda_1 \lambda_2)^{-2}$, $I_2 = (\lambda_1 \lambda_2)^2 + \lambda_1^{-2} + \lambda_2^{-2}$, $I_4 = \lambda_1^2 \cos^2 \alpha + \lambda_2^2 \sin^2 \alpha$. Предполагаем, что образец растягивается однородно, с пренебрежительно малым сдвигом, с нулевыми напряжениями по толщине. Тогда градиент деформации $\mathbf{F}$ и первый тензор Пиолы-Кирхгофа $\mathbf{P}$ остаются диагональными $\mathbf{P} = \text{diag}[P_{11}, P_{22}, 0]$.

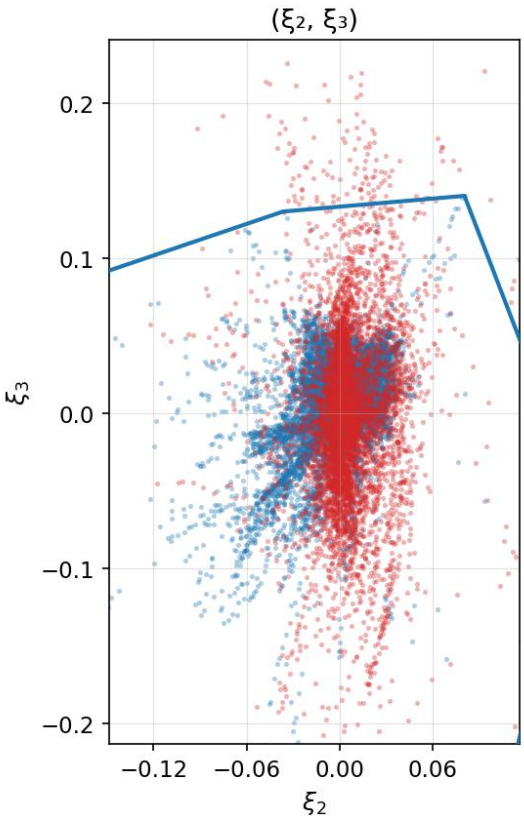
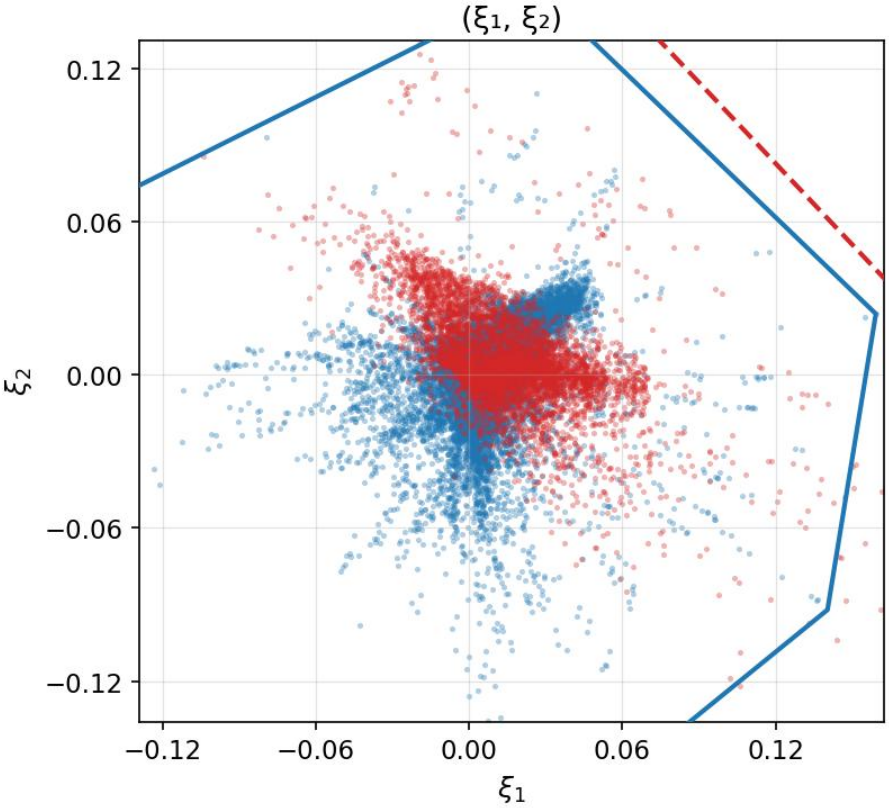


Ориентируем образец, поворачиваем образец, пока главные оси эллипса не попадут в ноль. Размечаем для резки. В машине, по X – мягкая ось. Пре кондиционирование 7 циклов, -> Sommer.

Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения?



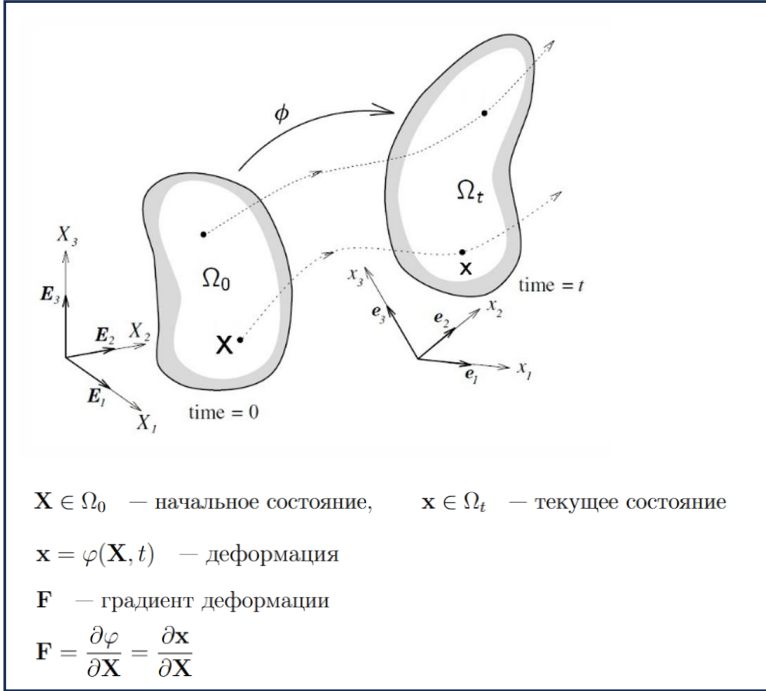
Из синтетических данных закрытия клапана [11] и натурной инфляции извлекаем данные о деформациях в мерах Лапласа. Оцениваем пересечение полученных облаков



Красные точки – синтетическое закрытие клапана, синие – натурное раздутие

10. Liogky A. Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspidization

Спасибо за внимание!



Постановка задачи. Рассматриваем деформацию тонкой *гиперупругой* мембраны под нагрузкой. Пусть компактное множество параметров $\Theta \subset \mathbb{R}^2$, а гладкие отображения

$$\mathbf{X}: \Theta \rightarrow \Omega_0 \subset \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{x}: \Theta \rightarrow \Omega_t \subset \mathbb{R}^3$$

задают среднюю поверхность мембраны в *начальной* и *текущей* конфигурациях соответственно.

Координатные базисы. Конвективные базисные векторы

$$\mathbf{G}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{X}(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_\alpha}, \quad \mathbf{g}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{x}(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Градиент деформации.

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{\alpha=1}^2 \mathbf{g}_\alpha \otimes \mathbf{G}^\alpha,$$

где $\otimes$ — тензорное произведение, а контравариантные векторы $\mathbf{G}^\alpha = \sum_{\beta=1}^2 (G^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{G}_\beta$ получены через метрический тензор $G_{\alpha\beta} = \mathbf{G}_\alpha \cdot \mathbf{G}_\beta$.

Правый тензор Коши – Грина поверхности.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}.$$

Двумерные инварианты.

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{C}, \quad I_2 = J^2 = \frac{1}{2}((\text{tr } \mathbf{C})^2 - \text{tr } \mathbf{C}^2)$$

где J — поверхностный якобиан.

Связь с 3-D инвариантами (несжимаемость).

$$I_1^{(3d)} = I_1 + I_1^{-1}, \quad I_2^{(3d)} = I_2 + I_1 I_2^{-1}, \quad I_3^{(3d)} = 1.$$

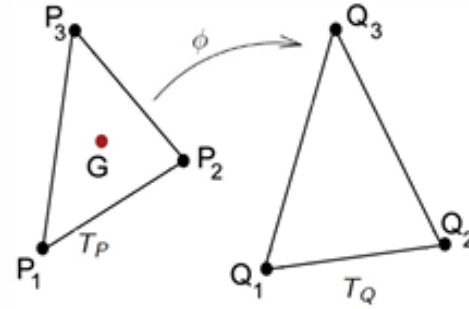
1.2 Конститутивные соотношения

Полагая существование потенциальной энергии $W(\mathbf{F})$ (определённой на единичу необжатой площади), *двумерный тензор напряжений Коши* (аналог 3-D тензора Коши) задаётся

$$\mathbf{T} = \frac{2}{J} \mathbf{F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{F}^T.$$

Полная упругая энергия.

$$U = \int_{\Omega_0} W(\mathbf{F}) dX.$$



Конформная согласованная треугольная/тетраэдральная сетка в исходной области Ω_0

P_1 конечные элементы

Ассемблирование (S_i это множество элементов, содержащих i -ый узел):

$$\sum_{T_P \in S_i} (F_i(T_P) + F_{i,\text{ext}}(T_P)) = 0, \text{ где}$$

$$\text{сила упругости } F_i(T_P) = -\frac{\partial U}{\partial Q_i} \stackrel{P_1}{=} -A_P \frac{\partial \psi(G)}{\partial Q_i},$$

$$\text{внешние силы } F_{i,\text{ext}}(T_P) = \int_{T_Q} b \lambda_i d\Omega.$$

Для произвольного гиперупругого материала $\psi(\xi_1, \dots, \xi_m)$ с мерами деформации $\xi_1, \dots, \xi_m$

- узловая упругая сила

$$F_i(T_P) = -\frac{\partial U(T_P)}{\partial Q_i} = -A_P \sum_{s=1}^m \frac{\partial \psi}{\partial \xi_s} \frac{\partial \xi_s}{\partial Q_i};$$

- $\partial \xi_s / \partial Q_i$ задаются явными формулами
- $\partial \psi / \partial \xi_s$ (функция отклика) отражает механические свойства материала, полученные экспериментальным путём

Решать полученную нелинейную систему можно любым безъякобианным методом, например, безъякобинным методом Ньютона-Крылова или даже методом релаксации.

Метод ближайшего соседа: $\partial\psi/\partial\xi_i(\vec{\xi}) = \partial\psi/\partial\xi_i(\arg \min_{\vec{\xi}_t} \|\vec{\xi}_t - \vec{\xi}\|)$

Метод K -ближайших соседей взвешанных обратными расстояниями:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\xi_i}(\vec{\xi}) = \sum_{j=1}^K w_j^p \cdot \frac{\partial\psi}{\partial\xi_i}(\vec{\xi}_j^p),$$

где $\{\vec{\xi}_j^p\}_{j=1}^K$ - ближ. соседи по $\|\cdot\|_p$, $w_j^p = \left(1 + \sum_{l=1, l \neq j}^K \frac{\|\vec{\xi}_j^p - \vec{\xi}\|_p}{\|\vec{\xi}_l^p - \vec{\xi}\|_p}\right)^{-1}$

Метод ближайшего соседа с линейной интерполяцией в окрестности 0:

$$T_{ij}(\nabla \mathbf{x}) = \begin{cases} S_{ijkl} E_{kl}, & \|\vec{\xi}\| < a \\ T_{ij} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\xi_l}(\vec{\xi}) \right), & \text{иначе} \end{cases},$$

где $\vec{\xi} = \vec{\xi}(\nabla \mathbf{x})$, $\mathbb{E} = (\mathbb{F}^T \mathbb{F} - \mathbb{I})/2$