

Автономная некоммерческая образовательная организация
высшего образования
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»

Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта
направление «Математическое моделирование в биомедицине и геофизике»

К ЗАЩИТЕ ДОПУСТИТЬ

Научный руководитель направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»

чл.-к. РАН, д.ф.-м.н., профессор

Ю.В. Василевский

« ____ » _____ 2024 г.

**ПОСТРОЕНИЕ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ СООТНОШЕНИЙ БИОМАТЕРИАЛОВ
ПРИ ПОМОЩИ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**

Магистерская диссертация
по направлению подготовки 01.04.02 Прикладная математика и информатика
(направленность (профиль) «Математическое моделирование в биомедицине и
нефтегазовом инжиниринге»)

Консультант по магистерской
диссертации
младший научный сотрудник
А.А. Легкий
« ____ » _____ 2024 г.

Студент гр. М01ММ-22
Д.Д. Диц
« ____ » _____ 2024 г.

Научный руководитель магистерской
диссертации
к.ф.-м.н., доцент
В.Ю. Саламатова
« ____ » _____ 2024 г.

Федеральная территория «Сириус», 2024

Автономная некоммерческая образовательная организация
высшего образования
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»

Научный центр информационных технологий и искусственного интеллекта
направление «Математическое моделирование в биомедицине и геофизике»

УТВЕРДИТЬ

Научный руководитель направления
«Математическое моделирование в
биомедицине и геофизике»

чл.-к. РАН, д.ф.-м.н., профессор

Ю.В. Василевский

« ____ » _____ 2024 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы
обучающегося по направлению подготовки
01.04.02 Прикладная математика и информатика
направленность (профиль) «Математическое моделирование в биомедицине и
нефтегазовом инжиниринге»

Диц Даниила Денисовича

1. Тема: «Построение определяющих соотношения биоматериалов при помощи нейронных сетей»
2. Цель: Построить и валидировать механическую модель биоматериала на основе экспериментальных данных при помощи нейронных сетей.
3. Задачи: Разработка архитектуры нейронной сети, на основе которой будет построена гиперупругая модель биоматериала с достаточной предсказательной способностью.
4. Рабочий график (план) выполнения выпускной квалификационной работы:

№	Перечень заданий	Сроки выполнения
1	Поиск и обработка экспериментальных данных механического испытания биоматериала.	30. 01.2024 - 15.02.2024
2	Написание архитектуры для поиска гиперупругой модели анизотропного материала.	15.02.2024 - 01.03.2024
3	Обучение нейронной сети, подбор оптимальных гиперпараметров сети.	01.03.2024 - 01.05.2024

4	Постановка численного эксперимента, валидация результатов.	01.05.2024 - 26.05.2024
---	--	-------------------------

Дата выдачи: «30» января 2024 г.

Руководитель ВКР:

В.Ю. Саламатова

Задание принял к исполнению:

Студент группы М01ММ-22

Д.Д. Диц

«30» января 2024 г.

Реферат

Выпускная квалификационная работа «Построение определяющих соотношений биоматериалов при помощи нейронных сетей» содержит: 64 страницы, 22 рисунка, 3 таблиц, 47 источников.

Ключевые слова: НЕЙРОННЫЕ СЕТИ, БИОМАТЕРИАЛЫ, МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ГИПЕРУПРУГОСТЬ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Выпускная квалификационная работа посвящена разработке методологии построения механической модели биоматериалов с использованием нейронных сетей. Основная цель исследования заключалась в создании моделей, способных точно описывать механическое поведение биоматериалов на основе экспериментальных данных, применяя методы машинного обучения.

На основе анализа существующих подходов к моделированию биоматериалов и применения современных методов машинного обучения, была разработана интерпретируемая нейронная сеть для решения обратной задачи поиска модели. Полученная функция свободной энергии деформации – модель, удовлетворяет условиям объективности, материальной симметрии и поливыпуклости, что соответствует физическим предположениям о гиперупругости и позволяет её интегрировать в современные вычислительные биомедицинские программные пакеты. Также важно отметить, что веса нейронной сети обладают физическим смыслом, что позволяет делать выводы о механике материала, анализируя построенную модель.

Экспериментально была продемонстрирована высокая точность и применимость разработанных моделей на примерах различных биоматериалов, таких как белое вещество головного мозга, латекс и GoreTex. Механические эксперименты с латексом и GoreTex были проведены в Лаборатории экспериментальной биомеханики, подтверждая эффективность предложенного под-

хода. Проведенная валидация показала, что предложенные модели способны адекватно описывать механическое поведение этих материалов.

В ходе работы также была разработана библиотека CANNTorch, предоставляющая инструменты для построения и валидации моделей на основе данных механических испытаний. Эта библиотека доступна по ссылке:

<https://github.com/23Grammer58/data-driven-constitutive-modelling>

Таким образом, работа не только подтверждает потенциал использования методов машинного обучения для моделирования биоматериалов, но и открывает новые перспективы в области биомеханики и материаловедения, предлагая конкретные рекомендации по дальнейшему развитию данного направления.

Сокращения, обозначения, термины и определения

\mathbb{R}	множество вещественных чисел,
\mathbb{R}^3	трехмерное евклидово векторное пространство,
\mathbb{S}^3	множество всех тензоров ранга 3,
$\ a\ = \langle a, a \rangle^{1/2}$	норма евклидова вектора,
H^T , где $H \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$	транспонированная 3×3 матрица,
$\det[H]$	определитель 3×3 матрицы,
Ha	матрица-векторное произведение (индексная нотация: $H_{ij}a_j$),
$\nabla = \mathbf{e}_1 \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_2 \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_3 \frac{\partial}{\partial z}$	оператор набла,
$\operatorname{div} \mathbf{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$	дивергенция (векторное поле),
$\sum_{i=1}^n a_i b_i = a_i b_i$	правило суммирования Эйнштейна.

DIC –	digital image correlation / цифровая корреляция изображений,
DVC –	digital volume correlation / цифровая корреляция объемов,
in-silico –	численный биологический эксперимент,
DD –	data-driven / подход, основанный на данных,
ML –	machine learning / машинное обучение,
CANN –	constitutive artificial neural network / аналитическое нейронное определяющее соотношение,
EUCLID –	efficient unsupervised constitutive law identification / эффективный поиск определяющего соотношения без учителя
PINN –	physical informed neural network / физически информированные нейронные сети.

Оглавление

Введение	8
1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.	11
1.1 Феноменологические модели	11
1.2 Модели, основанные на данных.	12
1.2.1 Неинтерпретируемые модели, основанные на данных	12
1.2.2 Интерпретируемые модели, основанные на данных	13
2 МЕХАНИКА МЯГКИХ ТКАНЕЙ	15
2.1 Биология мягких тканей	15
2.2 Теория нелинейной упругости.	17
2.2.1 Кинематика.	17
2.2.2 Напряжения	19
2.2.3 Определяющие соотношения	21
3 ТЕСТ НА ОДНООСНОЕ И ДВУХОСНОЕ РАСТЯЖЕНИЕ.	25
4 МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ	27
4.1 Искусственные нейронные сети.	28
4.2 Физически информированные нейронные сети.	31
4.3 Интерпретируемая нейронная сеть для построения определяющих соотношений.	34
5 РЕЗУЛЬТАТЫ	40
5.1 Белое вещество головного мозга	40
5.2 Латекс	45
5.3 GoreTex	48
Список использованных источников	61

Введение

С момента введения модуля Юнга в XIX веке [1] инженеры традиционно использовали феноменологический подход для определения механического отклика материалов на внешние воздействия. Этот подход основывается на экспериментальных наблюдениях и физических требованиях, которые сводятся к априорно выбранным аналитическим функциям, параметры которых индивидуальны для каждого материала [2]. Моделирование механики твёрдого тела, таким образом, базировалось на ограниченных данных из-за ограниченных возможностей традиционных экспериментальных установок, что позволяло проводить наблюдения лишь при одноосных, двухосных и гидростатических напряжениях. Тем не менее, определяющие соотношения ожидалось обобщить на более сложные условия благодаря развитию теорий непрерывной термодинамики и вычислительных методов.

С развитием бесконтактных методов картирования деформаций, таких как цифровая корреляция изображений (DIC) [3], рентгеновская компьютерная томография [4] и цифровая объемная корреляция (DVC) [5], парадигма моделирования механики твёрдого тела сместилась в сторону использования больших данных. Современные вычислительные многомасштабные методы позволяют проводить *in-silico* наблюдения сложного макроскопического поведения на основе простых определяющих соотношений, полученных из микромасштабных экспериментов. Однако, с увеличением объёма данных возникает задача их эффективного анализа. В этом контексте, достижения в области анализа больших данных и машинного обучения открывают уникальные возможности для улучшения моделирования механики твёрдого тела в материаловедении. Несмотря на обнадеживающие предварительные результаты, быстрое развитие этой дисциплины требует своевременного определения наиболее перспективных направлений для ускорения прогресса в

механике материалов, что может разнообразить методы решения текущих задач (рисунок 1).

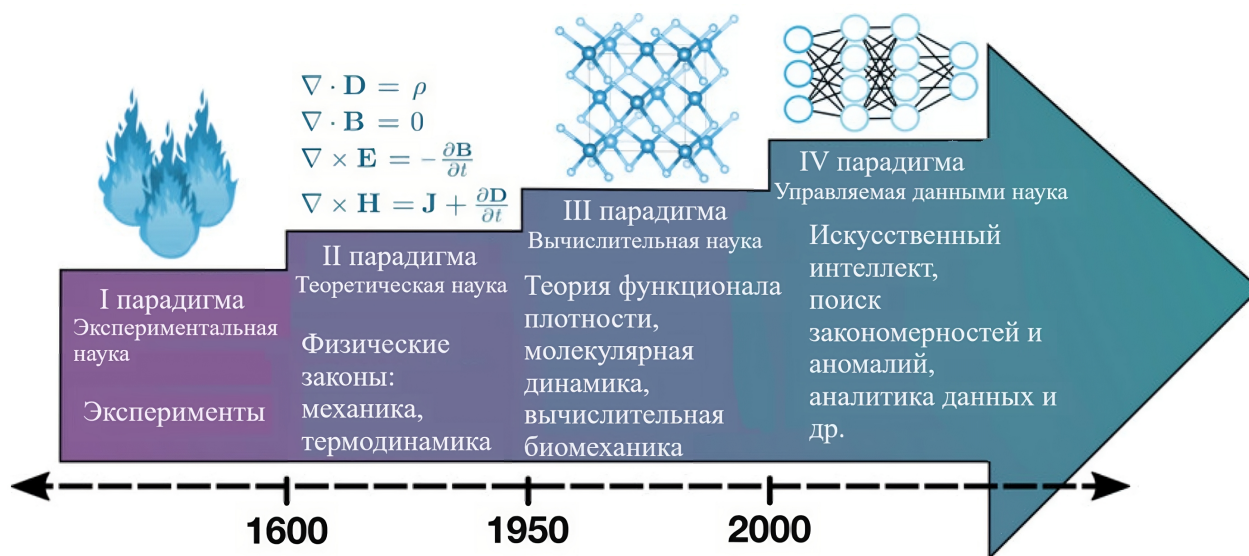


Рисунок 1 – Гипотеза эволюции естественных наук

Существует проблема неединственности определяющего соотношения для описания механического отклика материала на прикладываемые к нему нагрузки. Обычно выбор той или иной модели материала основан на эмпирических наблюдениях. Широко распространены *феноменологические* модели, в противовес *структурным* [6], которые учитывают микроскопическое состояние материала. При использовании феноменологических моделей требуется решать обратную коэффициентную задачу [7].

Феноменологические модели вносят трудноустраняемую ошибку выбора модели. Поэтому сформулируем задачу. Разработка вычислительного метода поиска определяющего соотношения ψ биоматериала, удовлетворяющего (2.10) - (2.19), на основе экспериментальных данных, используя нейросетевые подходы. Т.е. решение *обратной задачи* статического уравнения равновесия упругого тела путем поиска гиперпургой модели материала и ее параметров.

- Поставить двухосный и одноосный эксперимент на растяжение ма-

материала (натурный или численный) либо воспользоваться известными открытыми данными механических испытаний биоматериалов.

- *Обработать входные данные.* Обработать нефизичные выбросы данных. Найти инварианты тензора деформации.
- Решить соответствующую *обратную задачу* по поиску определяющего соотношения ψ .
- *Валидировать* получившиеся результаты аналитически, численно либо на натурном эксперименте.

1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Феноменологические модели

Феноменологические модели – это тип математических моделей, которые описывают поведение физических систем на основе наблюдаемых явлений без прямого учета их внутренней структуры и механизмов. Эти модели строятся на основе эмпирических данных и экспериментальных наблюдений, приводящих к функциональным зависимостям между входными и выходными параметрами системы. В рамках феноменологического подхода используются аналитические функции, параметры которых подбираются таким образом, чтобы максимально точно соответствовать экспериментальным данным для конкретного материала или процесса. Феноменологические модели широко применяются в механике материалов, термодинамике и других областях науки и техники, где они позволяют эффективно прогнозировать поведение сложных систем при различных условиях нагружения и внешних воздействиях. Данный способ построения гиперупругой модели биоматериала стал классическим и широко применялся для различных материалов. Что породило «зоопарк» подходов и функций, описывающих механический отклик материала на внешнюю нагрузку [2], [8], [9], [10].

На практике в рамках данного подхода исследователи выбирают набор моделей, которые они посчитали наиболее подходящими для их задачи, решают обратную задачу по поиску параметров модели [7] для каждой модели из набора и выбирают на основании ошибок предсказания и описания наилучшую модель. Такой подход несет неустранимую ошибку предположения при выборе набора моделей и является трудоемким для исследователя. Поэтому в последнее время набирает популярность подход к построению определяющих соотношений биоматериалов основанный на данных.

1.2 Модели, основанные на данных

Современные методы, работающие с большими данными, часто называются подходами, управляемыми данными (data-driven (DD)), поскольку они сильно зависят от экспериментальных или численных наблюдений за поведением материала (рисунок 1.1). Каждый из этих методов включает в себя набор алгоритмов, предположений и процедур, направленных на анализ имеющихся данных и извлечение полезной информации для описания поведения конкретного материала или группы материалов. Недавний прорыв в области глубокого обучения вновь привлек внимание к методам машинного обучения (ML) для применения в механике и материаловедении. Большие перспективы быстрого и высокоточного прогнозирования для механического моделирования, а также снижение затрат в промышленных условиях привели к многочисленным попыткам интегрировать широкий спектр этих методов в рабочий процесс моделирования, а также способствовать инновациям в области материалов [11].

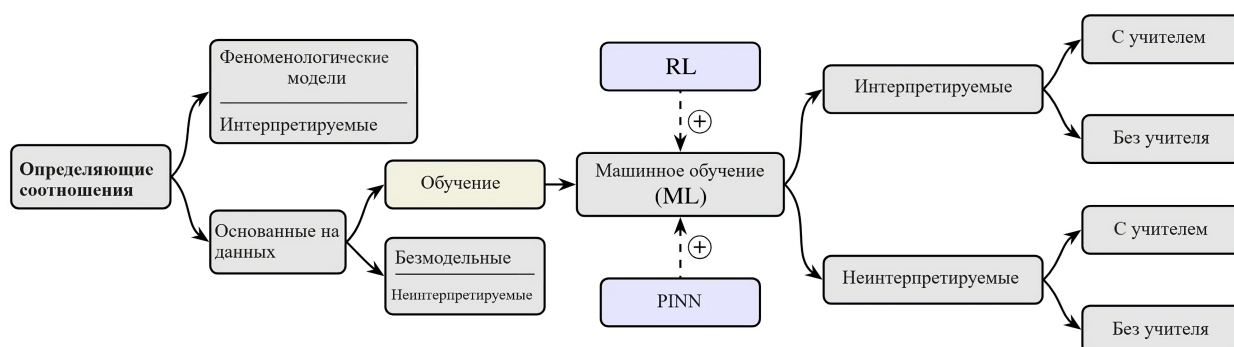


Рисунок 1.1 – Основные подходы по нахождению определяющего соотношения материала

1.2.1 Неинтерпретируемые модели, основанные на данных

В литературе отображено множество различных подходов, которые имеют относительно небольшую физическую модификацию методов машин-

ного обучения, но высокий потенциал к аппроксимации нелинейной функции свободной энергии деформации.

- Способ, требующий наименьших физических ограничений – напрямую искать пары деформация-напряжения при помощи, например, *многослойного перцептрона* [12]. В случае высокой гетерогенности и мощности обучающего набора данных может с достаточной точностью решить задачу, причем с низкими вычислительными затратами на обучении.

- Поиск производных свободной энергии деформации по инвариатам при помощи термодинамически корректного однослойного перцептрона, что позволяет конструировать гиперупругую модель через известные производные инвариантов тензора деформации по тензору деформации [13].

- *Выпуклые нейронные сети*, которые гарантируют поливыпуклость и материальную стабильность [14] используются и для обучения без учителя, т.е. без экспериментальных данных о напряжениях, модифицируя функцию потерь законом сохранения момента [15].

- *Нейронные обыкновенные дифференциальные уравнения*, в основе которых также выпуклые нейронные сети, используются для поиска сильно нелинейных функций, в том числе *анизотропных* [16].

1.2.2 Интерпретируемые модели, основанные на данных

Интерпретируемые модели, основанные на данных, требуют меньшего количества обучающих данных, чем неинтерпретируемые, но требуют более внимательного вывода и использования физических законов.

- Использование *символьных регрессий* вытекает напрямую из феноменологии [17]. Требуется подключения библиотеки гиперупругих моделей либо

использования регулярных древовидных грамматик, генерирующих определяющие соотношения [18]. Одна из распространенных разновидностей символической регрессии – генетический алгоритм [19].

- Первая работа по использованию *разряженной регрессии* – эффективная идентификация и обнаружение определяющих соотношений без учителя (EUCLID) также применяет библиотеку гиперупругих моделей [20].

- Также существует подход к построению разряженной регрессии, который исходит из *физического ограничения* многослойного перцептрона (CANN), путем изменения связности нейронов и функций активации [21].

Интерпретируемые модели позволяют использовать фундамент теории упругости, что дает с точки зрения, например, экспериментальной биомеханики больше информации для анализа о постановке наилучшего эксперимента. Также все современные комплексы программ для решения задачи упругодеформируемого тела уже имеют способность к вводу определяющих соотношений в аналитической форме. В данной работе представлена реализация физически интерпретируемой гиперупругой модели биоматериала, полученная при помощи метода CANN [22], реализованного на фреймворке PyTorch [23].

2 МЕХАНИКА МЯГКИХ ТКАНЕЙ

2.1 Биология мягких тканей

Биомеханика - это механика, описывающая живые системы. Достоверное определение нормы, патологии, предсказание последствий альтерации, персонализированное (точечное) лечение сильно затруднительно без биомеханики точно так же, как нельзя без гидродинамики спроектировать самолет с доверенным предсказанием его способности летать. Для начала введем основные понятия из биологии [24].

Клетка - это фундаментальный строительный блок биологических структур. Основные компоненты эукариотических клеток: ядро, цитоплазма, цитоскелет.

Ткань - это совокупность клеток и **внеклеточного матрикса** (ВМ). Матрикс придает ткани прочность, помогает поддерживать ее форму и служит основой для миграции клеток. Он состоит из белков, гликозаминогликанов и воды. Белки матрикса включают коллаген для прочности, эластин для эластичности и фибронектин, благодаря которому клеткам есть за что ухватиться, когда они перемещаются по ткани.

Существует четыре основных типа тканей:

- **Нервная ткань** включает головной и спинной мозг центральной нервной системы, а также ветвящиеся нервы периферической нервной системы.
- **Мышечная ткань** состоит из трех типов: скелетной мышцы, сердечной мышцы и гладкой мышцы. Гладкая мышца присутствует, например, в кровеносных сосудах, мочевом пузыре и кишечнике.
- **Соединительная ткань** соединяет ткани и органы. Она состоит,

главным образом, из матрикса с относительно небольшим количеством клеток. Примеры включают сухожилия (соединяют мышцу с костью), связки (соединяют кость с костью) и суставной хрящ (смягчает и смазывает суставы).

- **Эпителиальная ткань** покрывает поверхности органов. Она организована в виде листов клеток (эпителий), соединенных друг с другом молекулами клеточной адгезии. Эпителий защищает органы, одновременно способствуя всасыванию питательных веществ и удалению отходов. Эпидермис и внутренние слои сердца, легких и пищеварительного тракта являются эпителием.

Наконец, **органы** состоят из тканей, объединенных для выполнения определенной функции. Человеческое тело содержит десятки органов, среди которых жизненно важными являются сердце, мозг, легкие, печень и почки.

Для описания механики мягких тканей будем использовать подходы и предположения теории нелинейной упругости.

2.2 Теория нелинейной упругости

Приняв аксиоматику механики сплошных сред (гипотеза сплошности, закон сохранения массы, закон сохранения импульса и тд.) [25]. Введем основные определения из теории упругости

2.2.1 Кинематика

Пусть $\exists \mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ называемое *материальным телом*. Тогда набору координат частиц $\mathbf{X} = X^J \mathbf{E}_J$ в ортонормированном базисе $\{\mathbf{E}_J\}$, $J = 1, 2, 3$ из недеформированной или *начальной* конфигурации $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_0 \subset \mathbb{R}^3$ можно сопоставить набор координат частиц $\mathbf{x} = x^j \mathbf{e}_j$ в ортонормированном базисе $\{\mathbf{e}_j\}$, $j = 1, 2, 3$ из деформированной или *текущей* конфигурации $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_t \subset \mathbb{R}^3$ в момент времени t (рисунок 2.1). Получившееся биективное отображение $\varphi : \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathcal{B}_t$ будем называть *деформацией* [26]. Для описания изменения положения материального тела в пространстве в момент времени t относительно начальной конфигурации введем вектор перемещения: $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$.

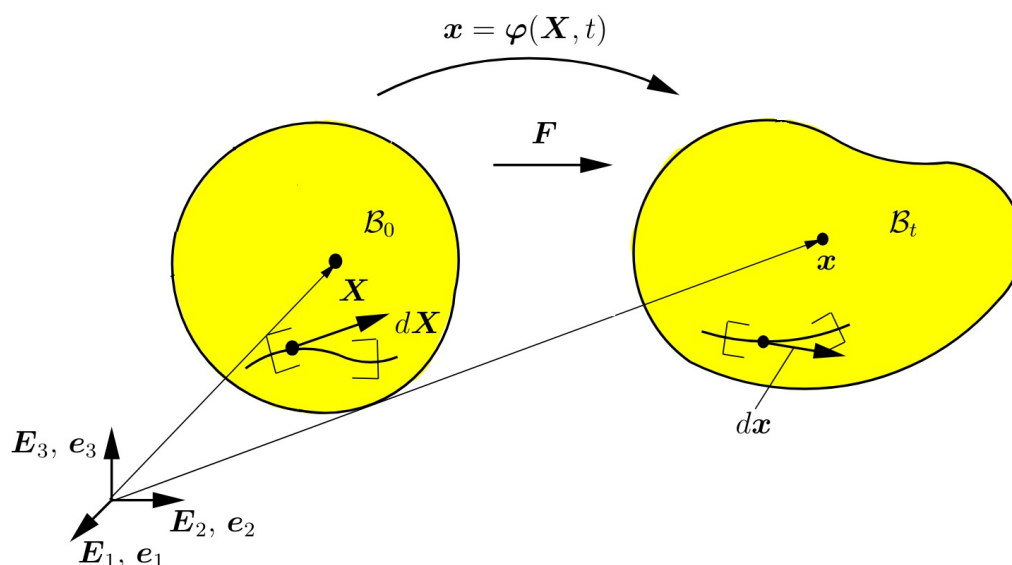


Рисунок 2.1 – Представления начальной и текущей конфигурации

Можно описывать относительные деформации внутри образца с помощью градиента деформации \mathbb{F} и якобиана J

$$\mathbb{F} := (\nabla_{\mathbf{X}}\varphi) \quad \text{и} \quad J := \det \mathbb{F} > 0. \quad (2.1)$$

Градиент деформации \mathbb{F} – это тензор, представляющая собой производную Фреше отображения φ [27].

Пусть $d\mathbf{X}$ – линейный элемент начальной конфигурации \mathcal{B}_0 , а $d\mathbf{x}$ – линейный элемент текущей конфигурации \mathcal{B}_t . Тогда

$$d\mathbf{x} = \mathbb{F}d\mathbf{X}. \quad (2.2)$$

Найдем изменение длины линейного элемента после деформации

$$d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = \mathbb{F}d\mathbf{X} \cdot \mathbb{F}d\mathbf{X} = (d\mathbf{X})^T \cdot \mathbb{F}^T \mathbb{F} d\mathbf{X}.$$

Отсюда возникает правый тензор деформации Коши-Грина \mathbb{C} или *тензор деформации Коши*

$$\mathbb{C} = \mathbb{F}^T \mathbb{F}, \quad (2.3)$$

у которого положительно определенная симметричная матрица коэффициентов.

Собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ тензора деформации Коши \mathbb{C} будем называть *главными удлинениями*.

Можно ввести и другие меры деформации, например, левый тензор деформации Коши-Грина или тензор деформации Альманси и др. [28], [29]. Выбор меры деформации зависит от особенностей исходной задачи.

Инварианты тензора деформации Коши или *главные инварианты* I_i , $i = 1, 2, 3$ и в случае анизотропного материала (свойства материала за-

висят от направления) *анизотропные инварианты* I_4, I_5 :

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \text{tr}(\mathbb{C}) = \mathbb{F} : \mathbb{F}, \\
 I_2 &= (\text{tr}(\mathbb{C})^2 - \text{tr}(\mathbb{C}^2)) = \frac{1}{2}(I_1^2 - (\mathbb{F}^T \cdot \mathbb{F}) : (\mathbb{F} \cdot \mathbb{F}^T)), \\
 I_3 &= \det(\mathbb{C}) = \det(\mathbb{F}^T \mathbb{F}), \\
 I_4 &= \mathbb{C} : \mathbb{N} = \mathbb{F}^T \mathbb{F} : \mathbb{N}, \\
 I_5 &= \mathbb{C}^2 : \mathbb{N} = (\mathbb{F}^T \mathbb{F})^2 : \mathbb{N},
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

где $\mathbb{N} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ называется структурным тензором, а \mathbf{n} – направлениями волокон материала до деформации.

Инварианты тензора - величины, которые остаются неизменными при переходе к другой системе координат.

2.2.2 Напряжения

Из принципа напряжений Эйлера-Коши, баланса сил и баланса моментов следует, что существуют элементарные поверхностные силы, возникаемые из-за действия внешних сил называемые *вектором напряжений Коши* $\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$, где \mathbf{n} – единичный вектор внешней нормали к площадке Δa на границе тела, действующие на границах всех подобластей деформированной конфигурации (рисунок 2.2), такие, что

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) := \lim_{\Delta a \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{f}}{\Delta a} = \frac{d\mathbf{f}}{da}$$

Теорема Коши утверждает, что вектор напряжений Коши в точке $\mathbf{x} \in \partial \mathcal{B}_t$ может быть выражен как линейная функция единичной внешней нормали \mathbf{n} элемента площади da в \mathbf{x}

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})\mathbf{n} \tag{2.5}$$

σ называется *тензором напряжений Коши*, причем симметричный $\sigma = \sigma^T$ (следствие закона сохранения момента).

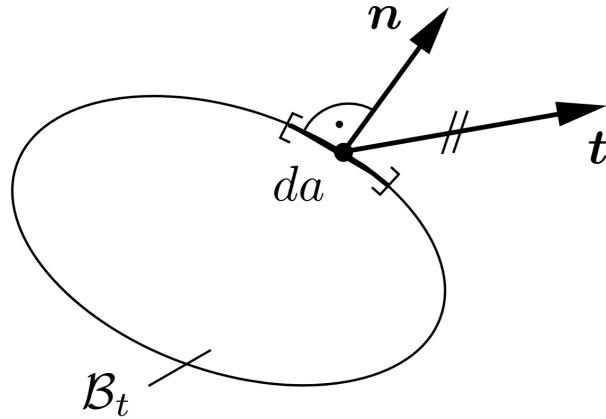


Рисунок 2.2 – Вектор напряжений Коши t

Таким образом $\sigma : \mathcal{B}_t \rightarrow \mathbb{S}^3$ – тензорное поле, которое является решением некоторой краевой задачи, которая пока является неполной,

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \operatorname{div}_x \sigma + \mathbf{f} & \text{в области } \mathcal{B}, \\ \sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}, & \text{на границе } \partial \mathcal{B}_\sigma, \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_0, & \text{на границе } \partial \mathcal{B}_u, \end{cases} \quad (2.6)$$

где \mathbf{f} – это вектор объемных сил, действующих на тело \mathcal{B} ,

$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}$ – это условие для напряжений на границе $\partial \mathcal{B}_\sigma$,

$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$ – это граничное условие для перемещений на границе $\partial \mathcal{B}_u$.

На практике часто используют уравнение *статического равновесия*, т.е. $\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = 0$.

Как и в случае с деформациями, можно вводить различные меры напряжений, например, тензор Биота или тензор напряжения Кирхгофа [30].

На практике обычно сложно точно установить размеры площадки деформированной конфигурации, поэтому введем также 1-й тензор напряжений Пиолы – Кирхгофа \mathbb{P} . Он определяет семейство тензоров, которые опи-

сывают конфигурацию тела в текущем или начальном состоянии

$$\mathbb{P} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbb{F}^{-T}. \quad (2.7)$$

В натуральных экспериментах сложно измерить силу действующую на конкретную площадку и измеряют некоторую интегральную силу, т.е. действующую на весь образец. Поэтому используют так называемый тензор номинальных напряжений

$$\mathbb{P} = \frac{\mathbf{f}_{int}}{\Delta A},$$

где \mathbf{f}_{int} - интегральная сила,

ΔA - площадка начальной конфигурации.

2.2.3 Определяющие соотношения

Для решения системы (2.6) потребуется замыкающее уравнение ψ , которое поставит соответствие между напряжениями \mathbb{P} , возникающими у тела, вследствие действия внешних сил \mathbf{f} , \mathbf{g} , и деформацией, описываемой градиентом деформации \mathbb{F} .

Закон сохранения массы, импульса и углового момента

$$\begin{cases} \rho_0 = \rho J, \\ \rho_0 \frac{dv}{dt} = \text{DIV} \mathbb{P} + \rho_0 \mathbf{b}, \\ \mathbb{P} \mathbb{F}^T = \mathbb{F} \mathbb{P}^T, \end{cases} \quad (2.8)$$

где ρ – плотность материального тела,

\mathbf{v} – скорость тела,

\mathbf{b} – массовая сила.

Будем называть уравнение ψ *функцией свободной энергии деформации* гиперупругого материала, если оно удовлетворяет законам материальной

объективности и симметрии

$$\psi(\mathbb{F}) = \psi(\mathbb{F}\mathbb{Q}), \quad \psi = \psi(\mathbf{X}, \mathbb{F}) = \psi(\mathbb{F}), \quad \mathbb{P} = \mathbb{P}(\mathbf{X}, \mathbb{F}) = \mathbb{P}(\mathbb{F}), \quad (2.9)$$

где \mathbb{Q} - ортогональный тензор.

Функция энергии деформации является *термодинамически состоятельной*, если она также не противоречит законам сохранения и второму закону термодинамики [2], [31]

$$\mathbb{P} = \frac{\partial \psi(\mathbb{F})}{\partial \mathbb{F}}. \quad (2.10)$$

Совокупность законов сохранения (2.8), уравнения статического равновесия (2.6) и функции свободной энергии деформации (2.10) будет исходной системой. А уравнение (2.10) называется **определяющим соотношением**. В случае изотропного материала $\psi = \psi(I_1, I_2, I_3)$, в случае трансверсально изотропного материала $\psi = \psi(I_1, \dots, I_n)$.

Будем считать тело *несжимаемым* $I_3 = J^2 = 1$. Тогда из (2.10) по цепному правилу в случае изотропного материала

$$\mathbb{P} = \frac{\partial \psi(I_1, I_2, I_3)}{\partial \mathbb{F}} = \frac{\partial \psi}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_2} \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_3} \frac{\partial I_3}{\partial \mathbb{F}} - p\mathbb{F}, \quad (2.11)$$

в случае анизотропного материала

$$\mathbb{P} = \frac{\partial \psi(I_1, I_2, I_3, I_4, I_5)}{\partial \mathbb{F}} = \frac{\partial \psi}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_2} \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_3} \frac{\partial I_3}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbb{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial I_5} \frac{\partial I_5}{\partial \mathbb{F}} - p\mathbb{F}, \quad (2.12)$$

где $p = \frac{1}{3}\mathbb{P} : \mathbb{F}$ – некоторый поправочный коэффициент, который зависит от граничных условий задачи и вычисляется из условия $\mathbf{P}_{33} = 0$:

- одноосное растяжение $\frac{2}{\lambda} \frac{\partial \psi}{\partial I_1} + 2 \left(\lambda + \frac{1}{\lambda^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial I_2}$,

- двухосное растяжение $\frac{2}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} \frac{\partial \psi}{\partial I_1} + \left(\frac{2}{\lambda_1^2} + \frac{2}{\lambda_2^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial I_2}$.

Причем

$$\frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} = 2\mathbb{F}, \quad \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} = 2(I_1 \mathbb{F} - \mathbb{F} \cdot \mathbb{F}^T \cdot \mathbb{F}) \quad (2.13)$$

и

$$\frac{\partial I_4}{\partial \mathbb{F}} = 2\mathbb{F} \cdot \mathbb{N}, \quad \frac{\partial I_5}{\partial \mathbb{F}} = \mathbb{F} \cdot (\mathbb{N} \cdot (\mathbb{F}^T \cdot \mathbb{F}) + (\mathbb{F}^T \cdot \mathbb{F}) \cdot \mathbb{N}). \quad (2.14)$$

Например, *трансверсально изотропный* материал характеризуется выраженным направлением \mathbf{n}_0 единичной длины $\|\mathbf{n}_0\| = 1$ в исходной конфигурации, выраженным направлением $\mathbf{n} = \mathbb{F} \cdot \mathbf{n}_0$ в деформированной конфигурации и ассоциированным структурным тензором $\mathbb{N} = \mathbf{n}_0 \otimes \mathbf{n}_0$ [32].

Используя принцип виртуальной работы, можно переписать (2.6) в интегральной форме. Это позволяет решать систему (2.6), минимизируя полную энергию системы W

$$\delta W = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_{\Omega} \mathbf{P} : \delta \mathbf{F} dV \rightarrow 0. \quad (2.15)$$

В работе Джона Болла [33] показано, что для существования решения обобщения краевой задачи (2.6) необходима **поливывуклость** функции ψ . Из общей теоремы представления известно, что в наиболее общем виде свободная энергия изотропного ψ материала может быть выражена в виде бесконечного ряда произведений степеней инвариантов [34], $\psi(I_1, I_2, I_3) = \sum_{j,k,l=0}^{\infty} a_{jkl} [I_1 - 3]^j [I_2 - 3]^k [I_3 - 1]^l$, где a_{jkl} - являются вещественными константами. Важно отметить, что смешанные произведения выпуклых функций, как правило, не являются выпуклыми, и проще показать, что сумма отдельных выпуклых подфункций обычно является таковой [35]. Это сподвигает выделить специальный подкласс функций свободной энергии, в котором свободная энергия является, в изотропном случае, суммой трех отдельных поливыпуклых подфункций ψ_1, ψ_2, ψ_3 , так что $\psi(\mathbb{F}) = \psi_1(I_1) + \psi_2(I_2) + \psi_3(I_3)$

или, в анизотропном случае,

$$\psi(\mathbb{F}) = \psi_1(I_1) + \psi_2(I_2) + \psi_3(I_3) + \psi_4(I_4) + \psi_5(I_5) \quad (2.16)$$

Также для более физического поведения функции ψ должны быть приняты некоторые допущения [36].

- Экстремальная деформация соответствует бесконечно большому напряжению

$$\psi(\mathbb{F}) \rightarrow \infty \text{ для } J \rightarrow 0 \text{ или } J \rightarrow \infty. \quad (2.17)$$

- Свободная энергии деформации ψ равна нулю в начальной конфигурации

$$\psi(\mathbb{F}) = 0, \quad \mathbb{P}(\mathbb{F}) = 0 \text{ в } \mathbb{F} = \mathbf{1}. \quad (2.18)$$

- Неотрицательность ψ для всех деформированных конфигураций

$$\psi(\mathbb{F}) \geq 0 \quad \forall \mathbb{F}. \quad (2.19)$$

3 ТЕСТ НА ОДНООСНОЕ И ДВУХОСНОЕ РАСТЯЖЕНИЕ

В НТУ “Сириус” был разработан прототип двухосного испытательного стенда для биомеханического исследования биоматериалов (рисунок 3.1) [37]. Данная установка учитывает следующие особенности работы с биоматериалами:

- маленький размер образца (порядка 1-10 см);
- необходимость поддержания определенных условий окружающей среды для сохранения образца;
- использование различных видов закреплений образца для минимизации краевых эффектов и отсутствия проскальзывания;
- бесконтактные методы оценки полей перемещений и деформаций при помощи цифровой корреляции изображений.

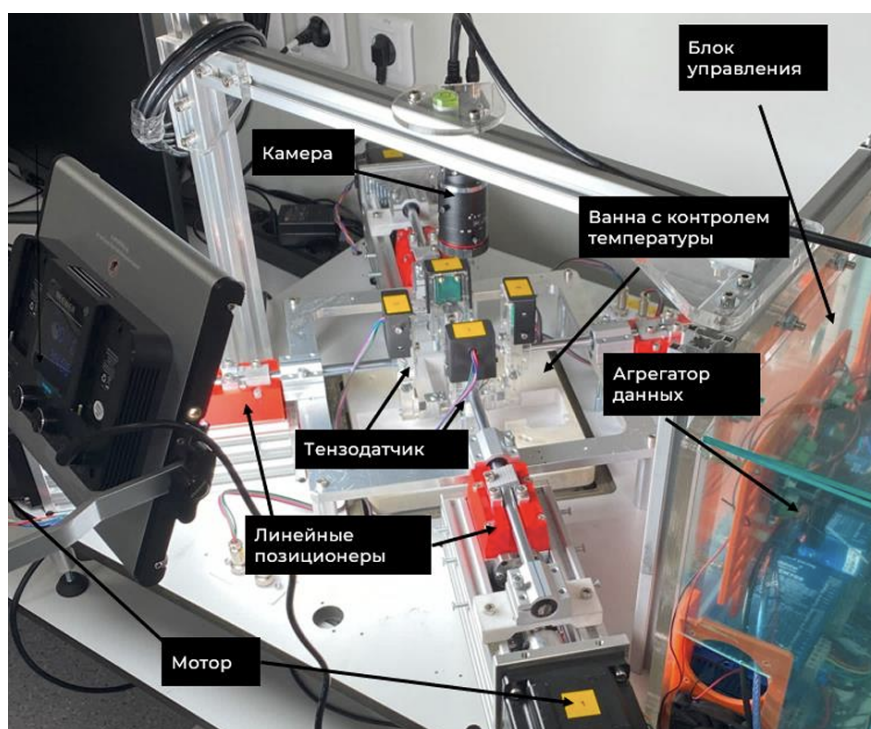


Рисунок 3.1 – Двухосная испытательная машина

Для двухосного испытательного стенда входными данными являются описания протокола эксперимента, который определяет проведение механических испытаний, управляя перемещениями зажимов. С частотой 1 Гц записываются данные с тензодатчиков и делаются снимки деформированного образца. На основе полученных данных о перемещениях строится поле деформации при помощи DIC, что позволяет определить экспериментальную зависимость между деформацией и напряжением (кривая деформирования) для исследуемого образца.

Протокол испытания включает в себя следующие этапы:

Подготовка образцов: Образцы вырезаются из листового материала и подшатавливаются к испытанию. Образцы имеют стандартные размеры и форму, чтобы обеспечить воспроизводимость результатов.

Прекондиционирование: Перед основными испытаниями образцы подвергаются циклическому нагружению для стабилизации механических свойств. Это включает несколько циклов растяжения и разгрузки до определенной деформации.

Растяжение: Образцы растягиваются при постоянной скорости деформации. Регистрация данных включает измерение силы и удлинения, что позволяло определить зависимость напряжения от деформации.

Таким образом при помощи предложенной испытательной машины можно получать однородные поля деформации, как для двухосного эксперимента на растяжение, так и для одноосного.

4 МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ

Методы машинного обучения (ML) используются для повышения эффективности обработки данных компьютерами. В некоторых случаях данные могут быть трудными для понимания и извлечения информации без применения ML. С увеличением объема доступных данных возрастает потребность в методах машинного обучения. Активно проводятся исследования по разработке методов, позволяющих машинам обучаться самостоятельно, без явного программирования правил принятия решения.

Общие подходы к машинному обучению можно разделить на три категории (рисунок 4.1):

- *обучение с учителем* – это подход, сопоставляющий входные и выходные данные с метками в процессе обучения,
- *обучение без учителя* – это методы, ориентированные на непомеченные данные, для поиска новых закономерностей в данном наборе данных,
- *обучение с подкреплением* существенно отличается от обучения с учителем и обучения без учителя, которые можно отличить по наличию меток. Обучение с подкреплением фокусируется на взаимодействии между агентами, такими как игрок в го, и окружающей средой, например, шахматной доской.

Существует еще одна категория подходов машинного обучения, называемая *обучением с псевдоучителем*. Как следует из названия, она находится между обучением с учителем и без, поскольку в процессе обучения используются как помеченные, так и непомеченные данные (как правило, в основном непомеченные).

В современной области проектирования материалов наиболее широко используются подходы, основанные на обучении с учителем, так как являют-

ся более точными и зрелыми в реализации по сравнению с инструментами других категорий.

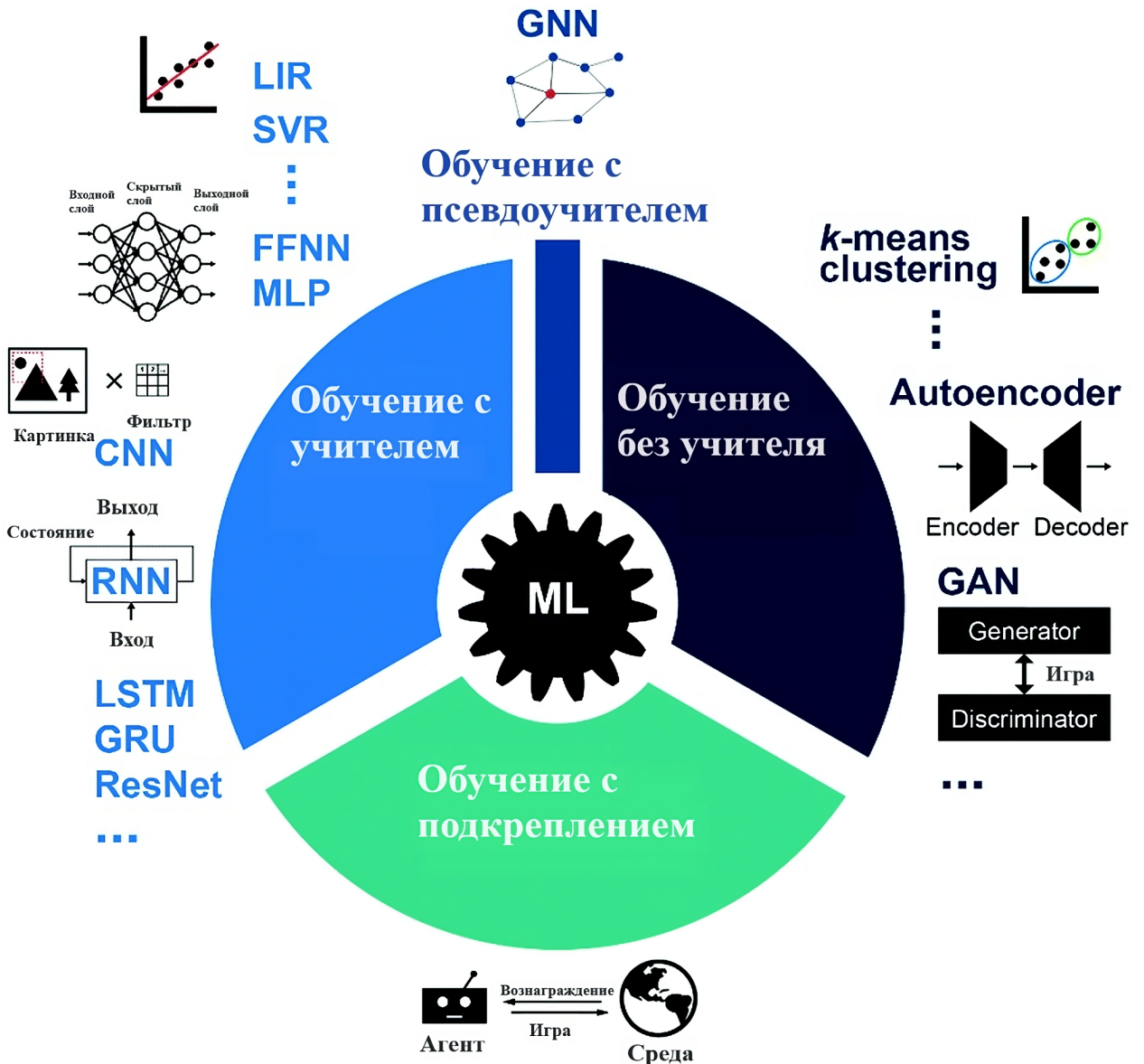


Рисунок 4.1 – Задачи машинного обучения

4.1 Искусственные нейронные сети

Полносвязная нейронная сеть (NN), или *многослойный перцептрон* (MLP), представляет собой последовательность узлов (нейронов), соединенных линейными операциями [38].

В нейронной сети, обозначаемой как \mathcal{N} , есть \mathcal{D} слоев, из которых $\mathcal{D} - 2$

являются скрытыми слоями. В k -м слое содержится n_k нейронов. Каждый нейрон получает на вход вектор x_{k-1} из предыдущего слоя, который преобразуется линейно [39]:

$$\ell(x_{k-1}) \equiv w_k x_{k-1} + b_k; \quad k = 1, 2, \dots, \mathcal{D} \quad (4.1)$$

Весовые коэффициенты ($w_k \in \mathbb{R}^{n_k \times n_{k-1}}$) и смещения ($b_k \in \mathbb{R}^{n_k}$) являются обучаемыми параметрами (рисунок 4.2). Выход каждого нейрона проходит через *функцию активации* $\sigma(\cdot)$ и передается на следующий слой:

$$\ell(x_{k-1}) = \sigma(w_k x_{k-1} + b_k); \quad k = 1, 2, \dots, \mathcal{D} \quad (4.2)$$

Окончательный выход нейронной сети вычисляется следующим образом:

$$\mathcal{N}(x; \theta) = \sigma(w_{\mathcal{D}} \sigma(\dots \sigma(w_2 \sigma(w_1 x + b_1) + b_2) \dots) + b_{\mathcal{D}}) \quad (4.3)$$

где $\theta = \{w_k, b_k\}$ – набор обучаемых параметров сети. Общее количество параметров в наборе θ обозначается как N_{θ} . Альтернативное математическое представление:

$$\mathcal{N}(x; \theta) = (\ell_{\mathcal{D}} \circ \ell_{\mathcal{D}-1} \circ \dots \circ \ell_1)(x), \quad (4.4)$$

где \circ обозначает композицию функций, например, для функций $f(x)$ и $g(x)$ это записывается как:

$$(f \circ g)(x) = f(g(x)) \quad (4.5)$$

Рисунок 4.2 иллюстрирует графическое представление полносвязной нейронной сети. При обучении нейронной сети на наборе данных $\{x, y\}$ це-

лью является найти набор параметров θ^* , минимизирующий заданную *функцию потерь*:

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathcal{L}(y_j, \mathcal{N}(x_j; \theta)), \quad (4.6)$$

где N – количество точек данных,
 \mathcal{L} – функция потерь.

В данном случае \mathcal{L} представляет собой среднеквадратичную ошибку (MSE) между истинными и предсказанными значениями:

$$\mathcal{L}(y_i, \mathcal{N}(x_i; \theta)) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \mathcal{N}(x_i; \theta))^2. \quad (4.7)$$

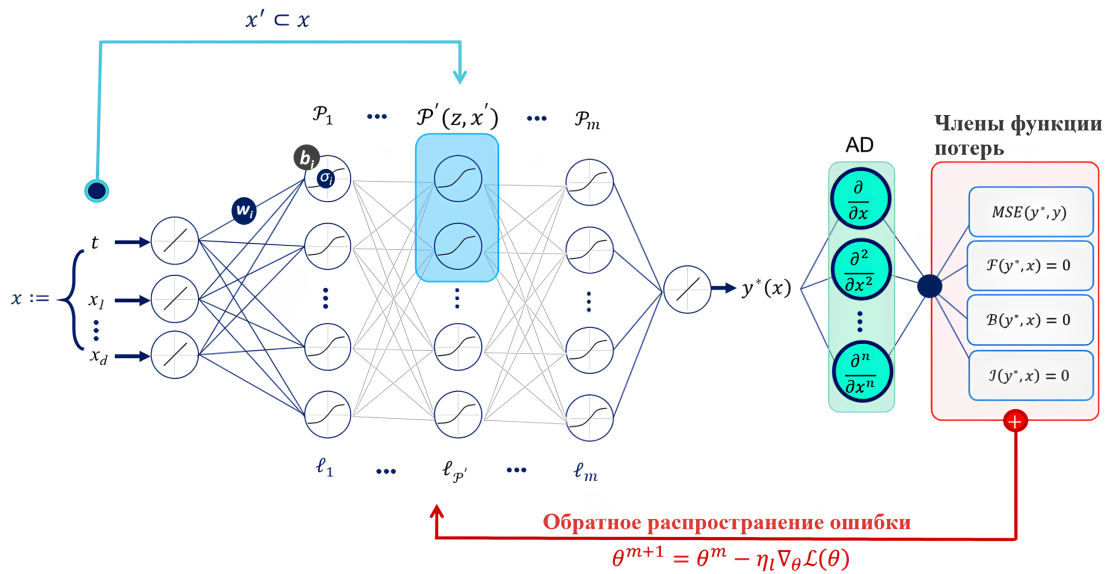


Рисунок 4.2 – Упрощенная архитектура физически информированной нейронной сети (PINN)

Обучаемые параметры (θ) оптимизируются для минимизации функции потерь итеративно. В каждой итерации (*эпохе*) набор θ обновляется следующим образом:

$$\theta_{m+1} = \theta_m - \eta \nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta), \quad (4.8)$$

где m – номер эпохи,

η – скорость обучения оптимизатора.

Обучение проводится на тренировочных данных, а чтобы избежать недообучения или переобучения, модель проверяется на отдельном валидационном наборе данных. Процесс обучения прекращается, когда ошибка на валидационных данных начинает увеличиваться.

У MLP существует два основных недостатка: невозможность *интерпретации* полученной модели, потому что на практике для аппроксимации нелинейных функций требуется большое количество скрытых слоев и нейронов на них, и недостоверная *экстраполяция* значений на данных, не входящих в обучающую выборку. Для решения этой проблемы в контексте дифференциального исчисления предложена парадигма построения архитектуры нейронных сетей с учетом особенностей решаемой задачи.

4.2 Физически информированные нейронные сети

Введем наиболее общую архитектуру *физически информированной нейронной сети* (PINN), которая использует экспериментальные данные и физически обоснованные функции потерь. Согласно универсальной теореме аппроксимации нейронных сетей [40], для любой достаточно гладкой неизвестной функции y существует достаточно большая нейронная сеть \mathcal{N} с обучаемыми параметрами θ такая, что

$$y(x) \approx y^*(x) = \mathcal{N}(x; \theta^*), \quad x \in \Omega, \quad (4.9)$$

где $y^*(x)$ является выходом нейронной сети.

Учитывая известное управляющее уравнение в частных производных (PDE), например, (2.8):

$$\mathcal{F}(y^*; v) \approx 0 \quad x \in \Omega, \quad (4.10)$$

$$\mathcal{Z}(y^*; v) \approx 0 \quad x \in \partial\Omega, \quad (4.11)$$

$$\mathcal{I}(y^*; v) \approx 0 \quad x \in \Omega, t = 0. \quad (4.12)$$

Уравнения (4.10) - (4.12) предполагают, что любое уравнение в частных производных (PDE) может быть решено путем замены неизвестного $y(x)$ на нейронную сеть $y^*(x) = \mathcal{N}(x; \theta)$ в составном уравнении PDE и нахождения оптимальных обучаемых параметров θ^* , таких что $\mathcal{F}(\mathcal{N}, v) \approx 0$, $\mathcal{Z}(\mathcal{N}; v) \approx 0$ и $\mathcal{I}(\mathcal{N}; v) \approx 0$ (Рисунок (4.2)). Производные в точке \mathcal{N} по входным параметрам вычисляются с использованием инструментов *автоматического дифференцирования* (AD), доступных во всех современных библиотеках глубокого обучения, таких как TensorFlow и PyTorch [41]. Формально, нам необходимо оценить корректность \mathcal{N} в выполнении условий в уравнении (4.10) - (4.12). Таким образом, функция потерь, называемая *физически обоснованной функцией потерь* (\mathcal{L}_p), определяется в области Ω :

$$\mathcal{L}_p(\theta, x) = \int_{\Omega} |\mathcal{F}(\mathcal{N}, v)|^2 dx + \int_{\partial\Omega} |\mathcal{Z}(\mathcal{N}, v)|^2 dx + \int_{\Omega} |\mathcal{I}(\mathcal{N}, v)|^2 dx. \quad (4.13)$$

Мы стремимся найти θ^* , которое минимизирует $\mathcal{L}_p(\theta, x)$. Этот член функции потерь заставляет нейронную сеть изучать физику задачи. Если $y(x) \approx \mathcal{N}(x; \theta^*)$ и $\mathcal{L}_p(\theta^*, x) \approx 0$, то, по определению, нейронная сеть является решением дифференциального уравнения или нейронным заместителем аналитической модели [42]. Такая нейронная сеть называется *физически информированной нейронной сетью* (PINN). В PINN функция потерь может

быть определена как комбинация нескольких потерь:

$$\mathcal{L}(\theta^*, x) = (\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \dots, \mathcal{L}_n) \quad (4.14)$$

Каждый член функции потерь представляет разные характеристики системы, такие как отклонение предсказания нейронной сети от набора данных или отклонения от математического представления физики и связанных с ней граничных/начальных условий.

Рисунок (4.2) показывает, как члены функции потерь используются для обучения PINN с помощью алгоритма *обратного распространения ошибки* [43]. Эти члены функции потерь оптимизируются вместе с взвешенной линеаризацией:

$$(\theta) = \sum_{j=1}^n j_j(\theta), \quad (4.15)$$

где j обозначает весовой коэффициент каждой функции потерь.

В контексте задачи нахождения замыкания уравнения статического равновесия упругого тела (2.8) используем обозначения Главы 2. Необходимо найти функцию $y(x) = \psi(\mathbb{F})$ свободной энергии деформации с параметрами ω_{cl} для тела $\Omega = \mathcal{B}_t$, которая удовлетворяет уравнению (2.16).

Использование PINN со специальными функциями активации, которые отвечают физическим ограничениям задачи (PAF) [38], вместо MLP, позволяет решить проблему экстраполяции значений на данные, которые не входят в обучающую выборку (рисунок 4.3). Однако сохраняется проблема интерпретируемости, которая влияет на практическую применимость моделей в реальных условиях. Недостаток интерпретируемости может затруднить понимание того, как именно модель принимает решения, что затрудняет использование классических методов анализа уравнений с точки зрения природы,

протекающих процессов.

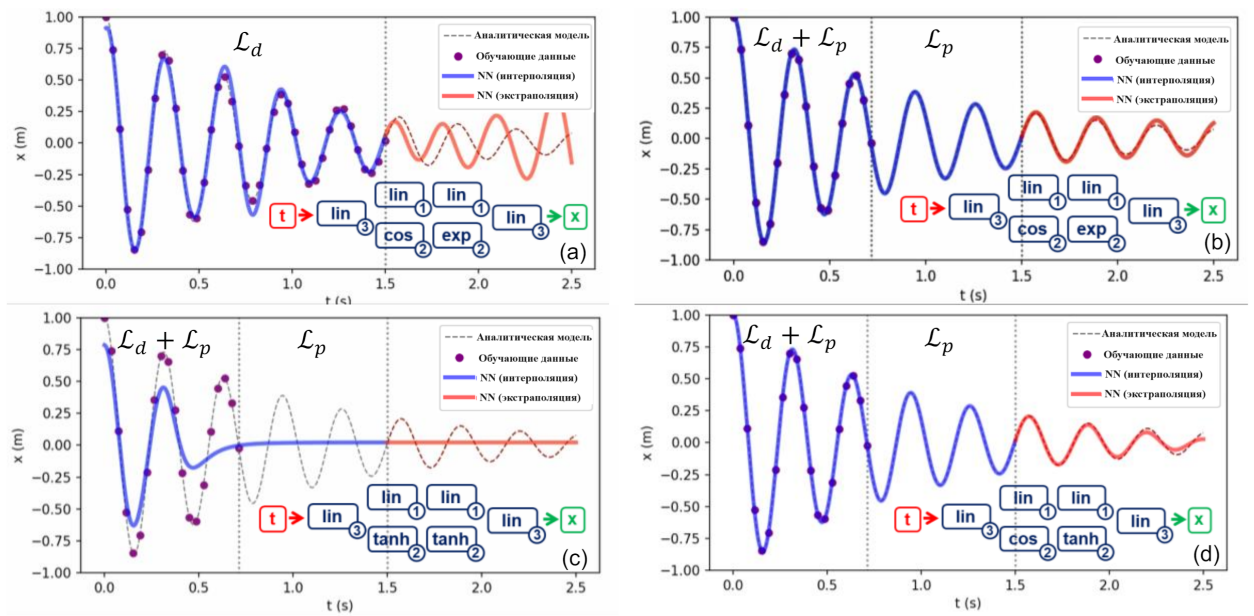


Рисунок 4.3 – Влияние PAF на предсказания NN в различных сценариях. а) NNs с PAF и без физической функции потерь; б) PINN с PAF и с физической функцией потерь; в) PINN без PAF и неглубоких скрытых слоев; д) PINN с PAF и с физической функцией потерь [38].

4.3 Интерпретируемая нейронная сеть для построения определяющих соотношений

В работе [22] была представлена архитектура MLP, имеющая встроенные физические ограничения для решения обратной задачи поиска наилучшей функции свободной энергии деформации ψ и ее параметров по экспериментальным данным.

Для обеспечения термодинамической согласованности, вместо того чтобы напрямую аппроксимировать напряжение \mathbb{P} как функцию градиента деформации \mathbb{F} , используется аналитическое нейронное определяющее соотношение (CANN) в качестве универсального аппроксиматора для отображения скалярных инвариантов I_1, I_2, I_3, I_4, I_5 на скалярную функцию свободной энергии ψ . Номинальное напряжение \mathbb{P} затем естественным образом выводится из второго закона термодинамики как производная свободной энергии

ψ по градиенту деформации \mathbb{F} согласно формуле (2.10).

В соответствии с уравнением (2.16), узлы индивидуальных инвариантов не связаны, чтобы функция свободной энергии не содержала смешанных членов в инвариантах, что гарантирует **поливывпуклость** у получившейся модели.

Чтобы обеспечить выполнение базовых физически обоснованных конститутивных ограничений, используем собственные функции активации вместо выбора популярных функций активации, используемых по умолчанию. В частности, выбираем из линейных, квадратичных, кубических и высших степеней для первого слоя сети, и из линейных, экспоненциальных или логарифмических функций (рисунок 4.4) для второго слоя таким образом, чтобы выполнялись физические предположения (2.17) - (2.19) на функцию свободной энергии деформации ψ , что делает модель **физически состоятельной** (рисунок 4.5).

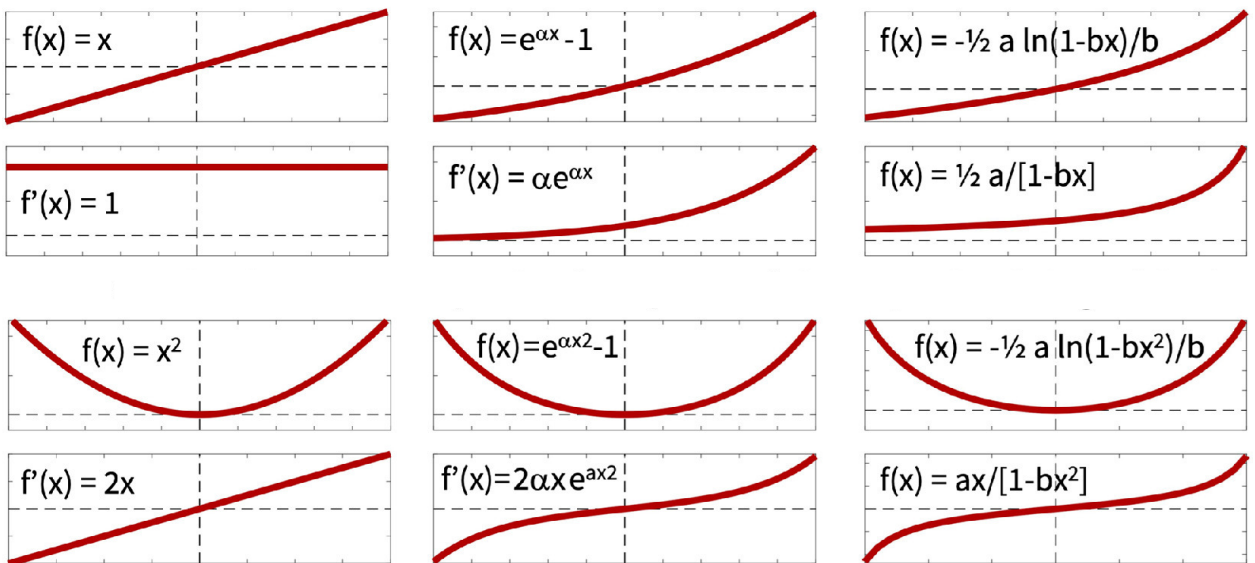


Рисунок 4.4 – Механически обоснованные функции активации

На рисунке (4.5) показан пример изотропной несжимаемой конститутивной искусственной нейронной сети с двумя скрытыми слоями и четырьмя и восемью узлами. Первый слой генерирует степени (\circ) и $(\circ)^2$ входа сети, а

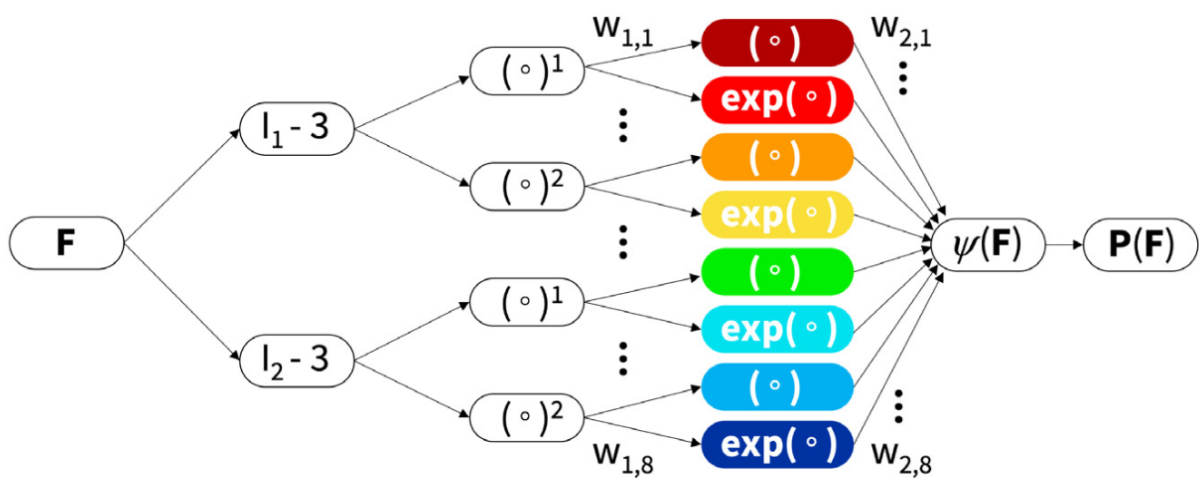


Рисунок 4.5 – Пример изотропной идеально несжимаемой аналитического определяющего соотношения, полученного при помощи искусственной нейронной сети с двумя скрытыми слоями

второй слой применяет идентичную функцию (\circ) и экспоненциальную функцию $(\exp(\alpha(\circ)) - 1)$ к этим степеням. Набор уравнений для этой сети имеет следующий явный вид

$$\begin{aligned}
 \psi(I_1, I_2) = & w_{2,1}w_{1,1}[I_1 - 3] + w_{2,2}[\exp(w_{1,2}[I_1 - 3]) - 1] \\
 & + w_{2,3}w_{1,3}[I_1 - 3]^2 + w_{2,4}[\exp(w_{1,4}[I_1 - 3]^2) - 1] \\
 & + w_{2,5}w_{1,5}[I_2 - 3] + w_{2,6}[\exp(w_{1,6}[I_2 - 3]) - 1] \\
 & + w_{2,7}w_{1,7}[I_2 - 3]^2 + w_{2,8}[\exp(w_{1,8}[I_2 - 3]^2) - 1].
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Для этой конкретной формулы один из первых двух весов каждой строки становится избыточным, и мы можем уменьшить набор параметров сети до двенадцати: $w = [(w_{1,1}w_{2,1}), w_{1,2}, w_{2,2}, (w_{1,3}w_{2,3}), w_{1,4}, w_{2,4}, (w_{1,5}w_{2,5}), w_{1,6}, w_{2,6}, (w_{1,7}w_{2,7}), w_{1,8}, w_{2,8}]$. Используя второй закон термодинамики, мы можем вывести явное выражение для напряжения Пиолы из уравнения (2.10) или, более конкретно, для

случая изотропной идеальной несжимаемости из уравнения

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P} = & \left[w_{2,1}w_{1,1} + w_{2,2}w_{1,2} \exp(w_{1,2}[I_1 - 3]) \right. \\
 & \left. + 2[I_1 - 3](w_{2,3}w_{1,3} + w_{2,4}w_{1,4} \exp(w_{1,4}[I_1 - 3]^2)) \right] \frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} \\
 & + \left[w_{2,5}w_{1,5} + w_{2,6}w_{1,6} \exp(w_{1,6}[I_2 - 3]) \right. \\
 & \left. + 2[I_2 - 3](w_{2,7}w_{1,7} + w_{2,8}w_{1,8} \exp(w_{1,8}[I_2 - 3]^2)) \right] \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} - p\mathbb{F}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

По сравнению с соотношением напряжение-деформация $\mathbb{P}(\mathbb{F})$, получаемым из MLP и PINN, соотношение напряжение-деформация CANN (4.17) довольно простое по своей структуре. Более важно то, что конкретная форма (4.17) представляет собой обобщение многих популярных гиперупругих моделей для несжимаемых гиперупругих материалов. Естественно задаться вопросом, как параметры нашей сети w соотносятся с известными параметрами изотропных материалов (таблица 4.1).

Таблица 4.1 – Сопоставление коэффициентов CANN различным гиперупругим моделям.

Название	Модель	Соответствие коэффициентов
нео-Гук	$\frac{1}{2}\mu[I_1 - 3]$	$\mu = 2w_{1,1}w_{2,1}$
Блатца-Ко	$\frac{1}{2}\mu[I_2 - 3]$	$\mu = 2w_{1,5}w_{2,5}$
Муни-Ривлин	$\frac{1}{2}\mu_1[I_1 - 3] + \frac{1}{2}\mu_2[I_2 - 3]$	$\mu_1 = 2w_{1,1}w_{2,1}, \mu_2 = 2w_{1,5}w_{2,5}$
Йо	$\sum_{n=1}^3 a_n[I_1 - 3]^n$	$a_1 = 2w_{1,1}w_{2,1}, a_2 = 2w_{1,3}w_{2,3}, a_3 = 0$
Демирай	$\frac{1}{2}\frac{a}{b} [\exp(b[I_1 - 3]) - 1]$	$a = 2w_{1,2}w_{2,2}, b = w_{1,2}$
Трелоар	$\frac{1}{2}\kappa[J - 3]^2$	$\kappa = 2w_{1,13}w_{2,13}$
Хольцапфель	$\frac{1}{2}\frac{a}{b} [\exp(b[I_4 - 1]^2) - 1]$	$a = 2w_{1,22}w_{2,22}, b = w_{1,22}$

Видно, что CANN может восстанавливать известные гиперупругие модели [10], для которых веса сети приобретают вполне определенный физический смысл.

Обучение CANN происходит путем минимизации L_2 нормы ошибки

разности между экспериментальными значениями \mathbb{P}_i^{exp} и $\mathbb{P}(\mathbb{F}_i)$ по формуле (4.6) для поиска параметров $\theta = \{\mathbf{w}\}$ при помощи оптимизатора ADAM [44] – надежного адаптивного алгоритма для градиентной оптимизации первого порядка, широко применяемого при обучении нейронных сетей. Архитектура сети обеспечивает выполнение необходимых гиперупругих ограничений модели без дополнительной модификации функции потерь при помощи физических членов, как это делается в классических PINN (4.13).

В случае *трансверсально изотропного* (анизотропного материала, свойства которого одинаковы во всех направлениях в плоскости, перпендикулярной определенной оси симметрии, которая задается углом α , однако вдоль этой оси свойства материала отличаются от свойств в плоскости) несжимаемого материала, описываемого нейропотенциалом $\psi = \psi(I_1, I_2, I_3, I_4, I_5)$ с двумя скрытыми слоями и с линейными, квадратичными и экспоненциальными функциями активации, функция свободной энергии деформации CANN примет вид

$$\begin{aligned}
\psi(I_1, I_2, I_4, I_5) = & w_{2,1}w_{1,1}[I_1 - 3] + w_{2,2}[\exp(w_{1,2}[I_1 - 3]) - 1] \\
& + w_{2,3}w_{1,3}[I_1 - 3]^2 + w_{2,4}[\exp(w_{1,4}[I_1 - 3]^2) - 1] \\
& + w_{2,5}w_{1,5}[I_2 - 3] + w_{2,6}[\exp(w_{1,6}[I_2 - 3]) - 1] \\
& + w_{2,7}w_{1,7}[I_2 - 3]^2 + w_{2,8}[\exp(w_{1,8}[I_2 - 3]^2) - 1] \\
& + w_{2,9}w_{1,9}[I_4 - 3] + w_{2,10}[\exp(w_{1,10}[I_4 - 3]) - 1] \\
& + w_{2,11}w_{1,11}[I_4 - 3]^2 + w_{2,12}[\exp(w_{1,12}[I_4 - 3]^2) - 1] \\
& + w_{2,13}w_{1,13}[I_5 - 3] + w_{2,14}[\exp(w_{1,14}[I_5 - 3]) - 1] \\
& + w_{2,15}w_{1,15}[I_5 - 3]^2 + w_{2,16}[\exp(w_{1,16}[I_5 - 3]^2) - 1]
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Тогда термодинамически корректное номинальное напряжение \mathbb{P} будет вычисляться при помощи стандартного уравнения (2.10) методом AD так

$$\begin{aligned}
\mathbb{P} = & [w_{2,1}w_{1,1} + w_{2,2}w_{1,2} \exp(w_{1,2}[I_1 - 3])] \\
& + 2[I_1 - 3] [w_{2,3}w_{1,3} + w_{2,4}w_{1,4} \exp(w_{1,4}[I_1 - 3]^2)] \cdot \frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} \\
& + [w_{2,5}w_{1,5} + w_{2,6}w_{1,6} \exp(w_{1,6}[I_2 - 3])] \\
& + 2[I_2 - 3] [w_{2,7}w_{1,7} + w_{2,8}w_{1,8} \exp(w_{1,8}[I_2 - 3]^2)] \cdot \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} \\
& + [w_{2,9}w_{1,9} + w_{2,10}w_{1,10} \exp(w_{1,10}[I_4 - 3])] \\
& + 2[I_4 - 3] [w_{2,11}w_{1,11} + w_{2,12}w_{1,12} \exp(w_{1,12}[I_4 - 3]^2)] \cdot \frac{\partial I_4}{\partial \mathbb{F}} \\
& + [w_{2,13}w_{1,13} + w_{2,14}w_{1,14} \exp(w_{1,14}[I_5 - 3])] \\
& + 2[I_5 - 3] [w_{2,15}w_{1,15} + w_{2,16}w_{1,16} \exp(w_{1,16}[I_5 - 3]^2)] \cdot \frac{\partial I_5}{\partial \mathbb{F}} - p\mathbb{F}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

При небольшом количестве обучающих данных CANN могут хорошо интерполировать, и экстраполировать, и делать обоснованные прогнозы в пределах допустимого диапазона термодинамических предположений (2.17) - (2.19). Поскольку у них ограниченное число степеней свободы, они менее склонны к перестройке, особенно если имеющиеся данные невелики. По своей конструкции конститутивные искусственные нейронные сети соответствуют термодинамическим ограничениям (2.16). Что особенно важно для практических приложений, они не работают как «черный ящик»; скорее, они являются обобщением существующих гиперупругих моделей, а их параметры имеют четкую физическую интерпретацию (таблица 4.1).

5 РЕЗУЛЬТАТЫ

Протестируем архитектуру CANN на белом веществе головного мозга, латексе и GoreTex.

5.1 Белое вещество головного мозга

Часть белого вещества головного мозга – *corona radiata* представляет собой пучок нервных волокон, расположенных в мозге и соединяющих кору головного мозга с более глубокими структурами, такими как ствол мозга и спинной мозг. С точки зрения механики материала, *corona radiata* может быть рассмотрена как биологический композитный материал, обладающий уникальными механическими свойствами, обусловленными его структурной организацией и составом. Но, как покажем далее, изотропное несжимаемое гиперупругое описание механического поведения, может также послужить хорошей моделью *corona radiata*.

Основные составляющие *corona radiata* — это аксоны, окруженные миелиновыми оболочками, которые обеспечивают электрическую изоляцию и способствуют быстрому проведению нервных импульсов. Аксоны, представляющие собой удлинённые цилиндрические структуры, обладают высокой прочностью на растяжение и гибкостью благодаря своей белковой составляющей. Миелиновая оболочка, в свою очередь, играет роль амортизатора, защищая аксоны от механических повреждений и обеспечивая дополнительную структурную стабильность.

При исследовании механики головного мозга важно учитывать его контринтуитивное свойство – сопротивляемость при сжатии существеннее, чем при растяжении.

Воспользуемся экспериментальными данными (пары λ , \mathbb{P}) теста *corona radiata* на сжатие, растяжение и сдвиг из оригинальной статьи [21].

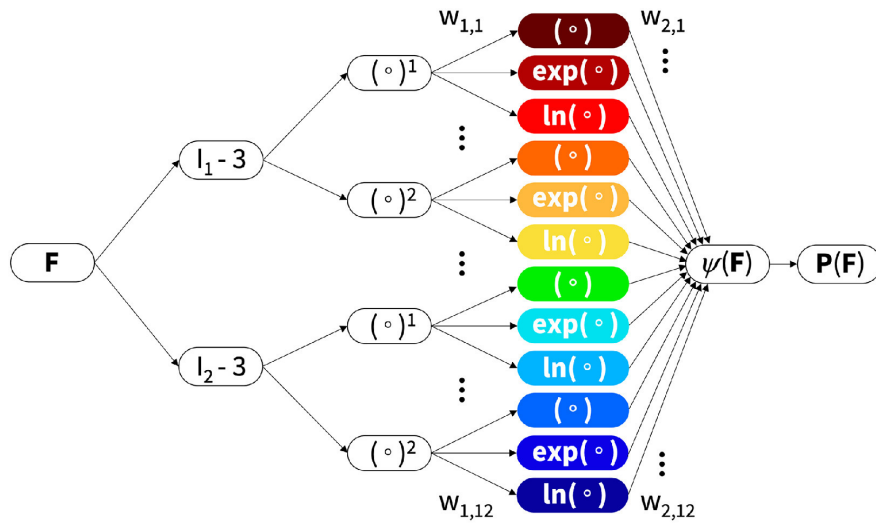


Рисунок 5.1 – Архитектура сети для поиска гиперупругой модели головного мозга

Используем архитектуру CANN (рисунок 5.1) с функцией свободной энергии деформации, полученной при помощи линейных, квадратичных, экспоненциальных и логарифмических функций активации. Причем получившаяся нейронная сеть по дизайну будет удовлетворять условиям термодинамической согласованности (2.10), изотропности, материальной объективности, материальной симметрии, идеальной несжимаемости, поливыпуклости (2.16) и физическим ограничениям (2.17) - (2.19). Первый слой представляет собой полиномы (\circ) и $(\circ)^2$, а второй слой применяет тождество (\circ) , экспоненциальную функцию $(\exp(\circ))$ и логарифмическую функцию $(\ln(\circ))$ к полиномам из первого слоя. Тогда можно выписать *явное выражение* функции свободной энергии деформации $\psi(I_1, I_2)$

$$\begin{aligned}
& w_{2,1}w_{1,1}[I_1 - 3] + w_{2,2}[\exp(w_{1,2}[I_1 - 3]) - 1] - \\
& - w_{2,3}[\log(1 - w_{1,3}[I_1 - 3])] + \\
& + w_{2,4}w_{1,4}[I_1 - 3]^2 + w_{2,5}[\exp(w_{1,5}[I_1 - 3]^2) - 1] - \\
& - w_{2,6}[\log(1 - w_{1,6}[I_1 - 3])] + \\
& + w_{2,7}w_{1,7}[I_2 - 3] + w_{2,8}[\exp(w_{1,8}[I_2 - 3]) - 1] - \\
& - w_{2,9}[\log(1 - w_{1,9}[I_2 - 3])] + \\
& + w_{2,10}w_{1,10}[I_2 - 3]^2 + w_{2,11}[\exp(w_{1,11}[I_2 - 3]^2) - 1] - \\
& - w_{2,12}[\log(1 - w_{1,12}[I_2 - 3])].
\end{aligned} \tag{5.1}$$

Используя второй закон термодинамики (2.10), можно выписать *явное* выражение для тензора номинальных напряжений \mathbb{P}

$$\begin{aligned}
\mathbb{P} = & \\
& \frac{\partial I_1}{\partial \mathbb{F}} \left[w_{2,1}w_{1,1} + w_{2,2}w_{1,2} \exp(w_{1,2}[I_1 - 3]) \right. \\
& \left. + w_{2,3}w_{1,3}/[1 - w_{1,3}[I_1 - 3]] \right] \\
& + 2[I_1 - 3] \left[w_{2,4}w_{1,4} + w_{2,5}w_{1,5} \exp(w_{1,5}[I_1 - 3]^2) \right. \\
& \left. + w_{2,6}w_{1,6}/[1 - w_{1,6}[I_1 - 3]^2] \right] \\
& + \frac{\partial I_2}{\partial \mathbb{F}} \left[w_{2,7}w_{1,7} + w_{2,8}w_{1,8} \exp(w_{1,8}[I_2 - 3]) \right. \\
& \left. + w_{2,9}w_{1,9}/[1 - w_{1,9}[I_2 - 3]] \right] \\
& + 2[I_2 - 3] \left[w_{2,10}w_{1,10} + w_{2,11}w_{1,11} \exp(w_{1,11}[I_2 - 3]^2) \right. \\
& \left. + w_{2,12}w_{1,12}/[1 - w_{1,12}[I_2 - 3]^2] \right] - p\mathbb{F},
\end{aligned} \tag{5.2}$$

где в случае теста на одноосное растяжение и сжатие $p = \left[\frac{2}{\lambda} \right] \frac{\partial \psi}{\partial I_1} + \left[\frac{2\lambda+2}{\lambda^2} \right] \frac{\partial \psi}{\partial I_2}$.

Тогда общее количество весов будет равно 24 минус 4 избыточных веса при полиномах, т.е. 20 вполне интерпретируемых весов модели, значительная

часть которых в процессе обучения будет обращена в ноль.

Процедуру обучения запустим сразу на трех наборах данных, то есть функция потерь будет

$$\mathcal{L}(\theta; \mathbb{F}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\| \mathbb{P}(\mathbb{F}_i)^{ut} - \hat{\mathbb{P}}_i^{ut} \right\|^2 + \left\| \mathbb{P}(\mathbb{F}_i)^{ss} - \hat{\mathbb{P}}_i^{ss} \right\|^2 + \alpha_1 \|W\|_1 + \frac{1}{2} \alpha_2 \|W\|_2^2 \rightarrow \min, \quad (5.3)$$

где \mathbb{P}^{ut} , \mathbb{P}_{ss} - напряжение при сжатии/растяжении и сдвиге соответственно, $\hat{\mathbb{P}}$ - экспериментальные данные. Для предотвращения переобучения изменим функцию потерь, добавив взвешенную $L1$ норму, $\|W\|_1 = \sum_i \sum_j |w_{ij}|$, или взвешенную евклидову (или $L2$) норму, $\|W\|_2^2 = \sum_i \sum_j w_{ij}^2$, где α_1 и α_2 — это весовые коэффициенты. Обучение сети проводится путем минимизации функции потерь (5.3), а параметры сети $\theta = \{w_{ij}\}$ обучаются с использованием оптимизатора ADAM, который является устойчивым адаптивным алгоритмом для оптимизации на основе градиента первого порядка. При этом веса ограничиваются так, чтобы они всегда оставались неотрицательными, $w_{ij} \geq 0$.

Параметры обучения: максимальное количество эпох – 10000, $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.001$. Также используется взвешивание функции потерь (5.3) в зависимости от типа эксперимента формула (4.15). $k_t = 0.5$ для сжатия, $k_u = 1.5$ для растяжения $k_{ss} = 1.0$ для сдвига. Функция потерь падает на 4 порядка менее чем за 10000 эпох (рисунок 5.2), получившаяся функция свободной энергии деформации $\psi(I_1, I_2)$

$$\begin{aligned} & - 0.011079 \ln(1 - 2.182927(I_2 - 3)) \\ & + 8.307529(I_2 - 3)^2 \\ & + 1.417893(e^{4.562754(I_2 - 3)^2} - 1) \\ & - 0.257239 \ln(1 - 4.471317(I_2 - 3)^2). \end{aligned} \quad (5.4)$$

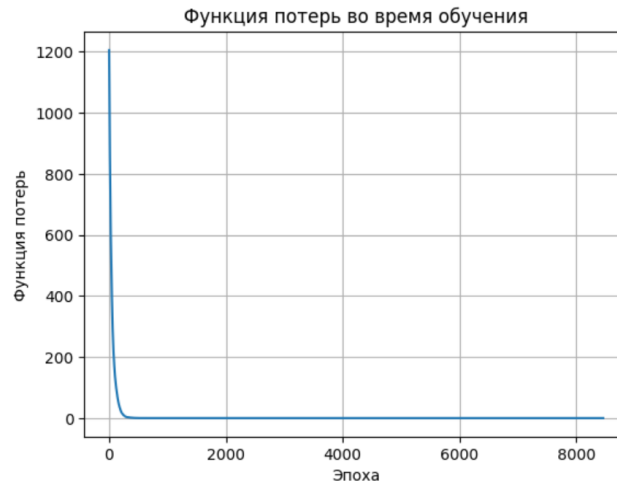


Рисунок 5.2 – График функции потерь при обучении CANN на трех механических тестах головного мозга.

Результаты экспериментальных и модельных номинальных напряжений показаны на рисунке 5.3. Коэффициент корреляции R^2 – стандартная оценка схожести двух выборок [45]. В случае сжатия и сдвига получился высокое значение коэффициента корреляции 0.90 и 0.98 соответственно. Для растяжения коэффициент корреляции равен 0.42, что является одним из лучших результатов для данного семейства гиперупругих моделей (рисунок 5.4). Для предотвращения переобучения модели на экспериментальных данных тестов на сжатие и сдвиге были использованы взвешивания функции потерь. Более точный подбор весов – является перспективой для будущих исследований.

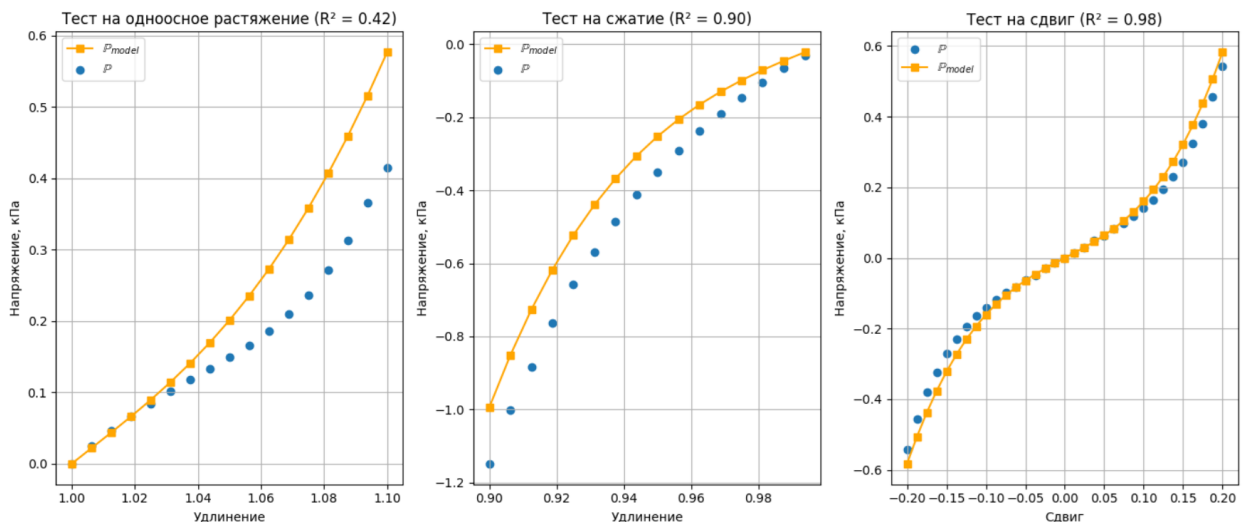


Рисунок 5.3 – Результаты обучения модели на трех механических тестах головного мозга

В оригинальной работе [21] получились такие же результаты, только для другой части головного мозга - cortex.

Получившаяся гиперупругая модель corona radiata дает результат лучше, чем все классические феноменологические модели этого класса (рисунок 5.4) [22].

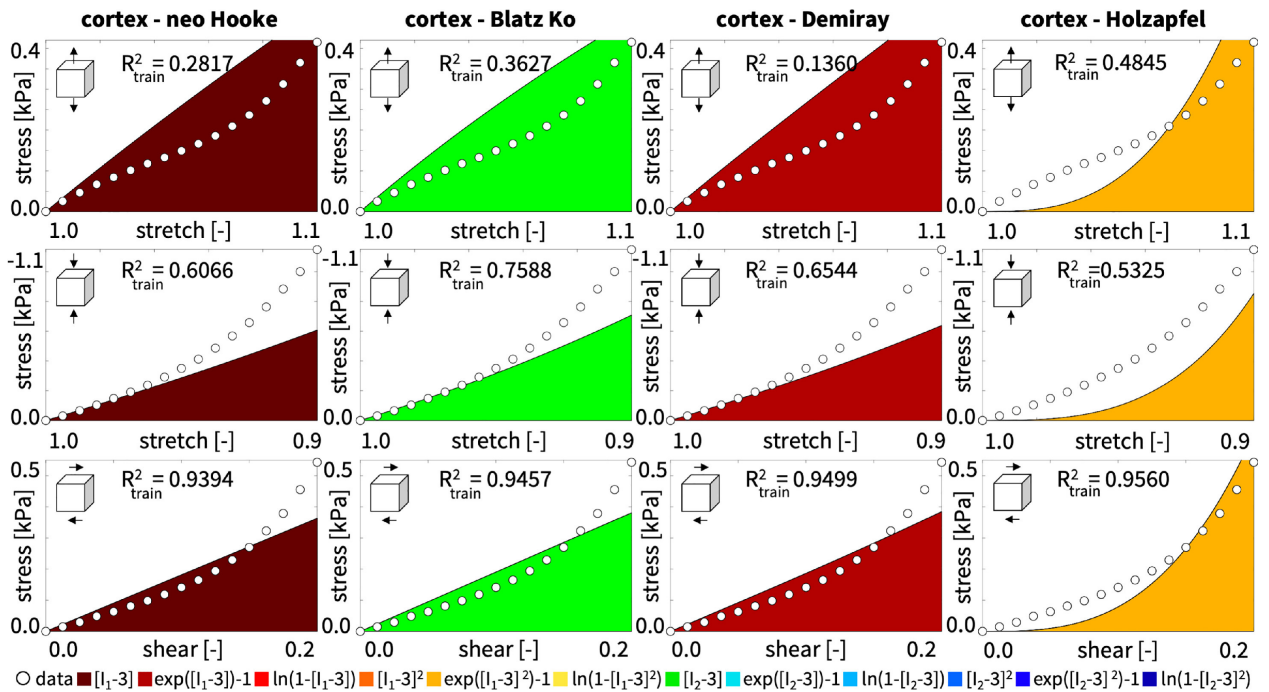


Рисунок 5.4 – Предсказание экспериментальных данных классическими феноменологическими моделями

Это можно объяснить тем, что для получения наилучшей модели процедура поиска должна *одновременно* искать как модель, так и ее коэффициенты.

Будем считать результат воспроизведенным, что делает реализованный алгоритм верифицированным. Перейдем к получению гиперупругих моделей на основе данных полученных в лаборатории НТУ "Сириус".

5.2 Латекс

Латекс, изготовленный в лаборатории экспериментальной биомеханики, представляет собой изотропный материал, широко используемый в раз-

личных биомедицинских и инженерных приложениях благодаря своим *изотропным гиперупругим* свойствам. Будем считать латекс *несжимаемым*.

Для проведения одноосного и двухосного растяжения латексные образцы были протестированы в испытательной машине.

Используем архитектуру CANN (рисунок 5.1) с функцией энергии деформации, полученной при помощи линейных, квадратичных и экспоненциальных функций активации. Причем получившаяся нейронная сеть по дизайну будет удовлетворять условиям термодинамической согласованности (2.10), изотропности, материальной объективности, материальной симметрии, идеальной несжимаемости, поливыпуклости (2.16) и физическим ограничениям (2.17) - (2.19). Первый слой представляет собой полиномы (\circ) и $(\circ)^2$, а второй слой применяет тождество (\circ) , экспоненциальную функцию $(\exp(\circ))$ и логарифмическую $(\log(\circ))$ к полиномам из первого слоя. Тогда *явное выражение* функции свободной энергии деформации будет такое же как в (5.1)

Используя второй закон термодинамики (2.10), можно выписать *явное выражение* для тензора номинальных напряжений \mathbb{P} , который будет такой же как в формуле (5.2). Обучение сети проводится путем минимизации функции потерь (5.6), а параметры сети $\theta = \{w_{ij}\}$ обучаются с использованием оптимизатора ADAM, который является устойчивым адаптивным алгоритмом для оптимизации на основе градиента первого порядка. При этом веса ограничиваются так, чтобы они всегда оставались неотрицательными, $w_{ij} \geq 0$.

Параметры обучения: максимальное количество эпох – 10000, $\alpha_1 = 0.0001$. Функция потерь падает на 4 порядка менее чем за 10000 эпох (рисунок 5.13)

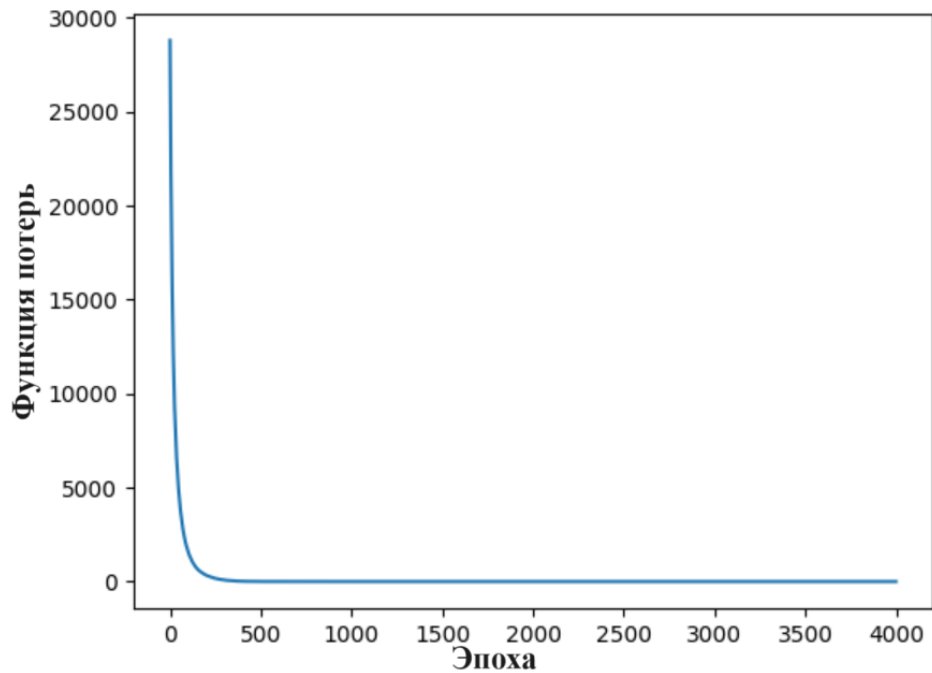


Рисунок 5.5 – График функции потерь при обучении CANN на равнодвухосном механических тестах материала латекса

Получившаяся функция свободной энергии деформации при обучении на одноосном и равнодвухосном механическом тесте на растяжение латекса

$$\psi(I_1, I_2) = 0.218209(I_1 - 3) \tag{5.5}$$

является классической гиперупругой моделью Неогука.

Результаты экспериментальных и модельных номинальных напряжений латекса при двухосном тесте показаны на рисунке 5.6.

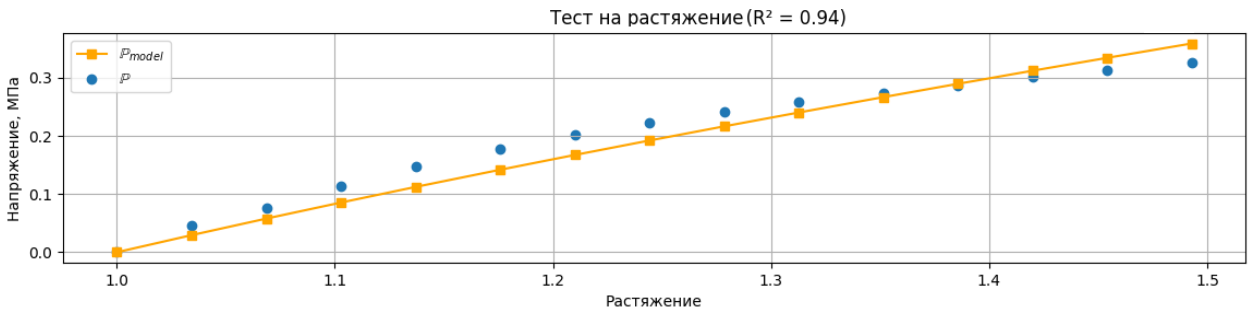


Рисунок 5.6 – Результаты обучения CANN на равнодвухосном тесте латекса

Результаты экспериментальных и модельных номинальных напряже-

ний латекса при одноосном тесте показаны на рисунке 5.7.

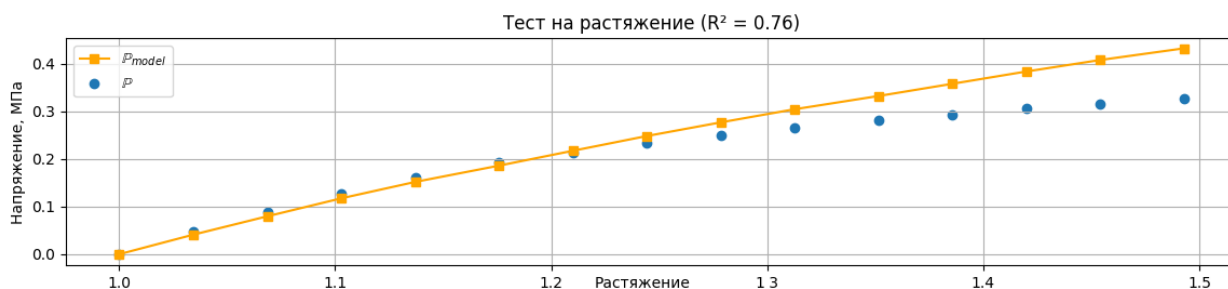


Рисунок 5.7 – Результаты обучения CANN на одноосном тесте латекса

Латекс, протестированный в Лаборатории экспериментальной биомеханики, демонстрирует отличные гиперупругие свойства, что делает его подходящим для использования в различных инженерных и биомедицинских приложениях. А полученная модель хорошо описывает и предсказывает механическое поведение материала.

5.3 GoreTex

GoreTex (W. L. Gore and Associates, США) [46] известный своими применениями в производстве водонепроницаемой и дышащей одежды, также широко используется в медицинских приложениях, включая кардиохирургию. В этом контексте материал демонстрирует уникальные механические и биологические свойства, которые делают его незаменимым для различных хирургических вмешательств, таких как сосудистые протезы и заплаты для реконструкции сердца.

Gore-Tex состоит из микропористого политетрафторэтилена (ePTFE), который формирует основу мембраны. Эти микропоры настолько малы, что вода в жидкой форме не может через них проникнуть, но достаточно большие для прохода молекул водяного пара, обеспечивая дышащие свойства материала.

С точки зрения гиперупругости, рассмотрение GoreTex в кардиохирур-

гии включает несколько ключевых аспектов:

- *Эластичность и восстановление формы:* GoreTex обладает гиперупругими свойствами, что означает способность материала выдерживать значительные деформации и возвращаться к своей исходной форме после снятия нагрузки. В кардиохирургии это свойство важно для адаптации материала к динамическим движениям и пульсациям сердца и кровеносных сосудов. Например, при использовании GoreTex в качестве сосудистого протеза, материал должен постоянно расширяться и сжиматься в ответ на сердечные пульсации, не теряя своей структурной целостности.

- *Механическая прочность* GoreTex демонстрирует высокую прочность на растяжение и разрыв, что критично для его применения в кардиохирургии. Сосудистые протезы и заплаты должны выдерживать значительное внутреннее давление крови без риска разрыва или износа.

- *Совместимость с биологическими тканями* Gore-Tex характеризуется отличной биосовместимостью, что минимизирует риск отторжения и воспаления при имплантации. Микропористая структура материала способствует интеграции с окружающими тканями, позволяя клеткам и кровеносным сосудам прорасти в поры, что улучшает фиксацию и функциональность имплантата.

- *Гиперупругое поведение в условиях циклических нагрузок.* В кардиохирургии материалы подвергаются циклическим нагрузкам из-за постоянных сердечных сокращений. GoreTex демонстрирует высокую усталостную прочность, сохраняя свои механические свойства даже после многочисленных циклов растяжения и сжатия, что критически важно для предотвращения износа и разрушения протезов.

GoreTex можно считать *трансверсально изотропным* материалом из-за

его микроструктуры и поведения под механическими нагрузками. Трансверсально изотропный материал обладает одинаковыми механическими свойствами во всех направлениях, перпендикулярных к выделенному направлению (оси симметрии), и другими свойствами вдоль этой оси. Трансверсальная изотропность материала GoreTex достигается за счет микропористой структуры из политетрафторэтилена (ePTFE), которая формируется в процессе его изготовления. Эти поры, будучи распределены равномерно в плоскости мембраны, обеспечивают однородные механические свойства в этой плоскости.

Образец расположен так, чтобы выделенное направление, вдоль которого жестко образца выше, было вдоль оси Oy (рисунок 5.8).

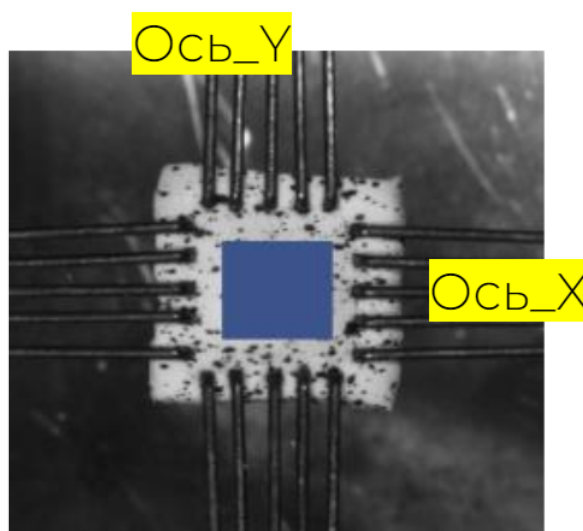


Рисунок 5.8 – Ориентация образца во время тестирования, с наложенным в центре полем деформации, рассчитанной при помощи методов цифровой корреляции изображений

Проведен двухосный механический тест материала GoreTex (Глава 3) с протоколом на перемещение, прекондиционировав образец 7-ю повторяющимися циклами нагрузки-разгрузки для приведения образца в повторяемое состояние. Управление экспериментом осуществлялось при помощи варьирования максимального перемещения зажимов, в которых находится образец, при достижении максимального значения начинается цикл разгрузки, т.е.

зажимы с образцом возвращаются в исходное положение. Соотношения перемещений для каждой из осей $X:Y = \{1:1; 1:0.75; 0.75:1; 1:0.5; 0.5:1, 1:1/3, 1/3:1\}$ (рисунок 5.9).

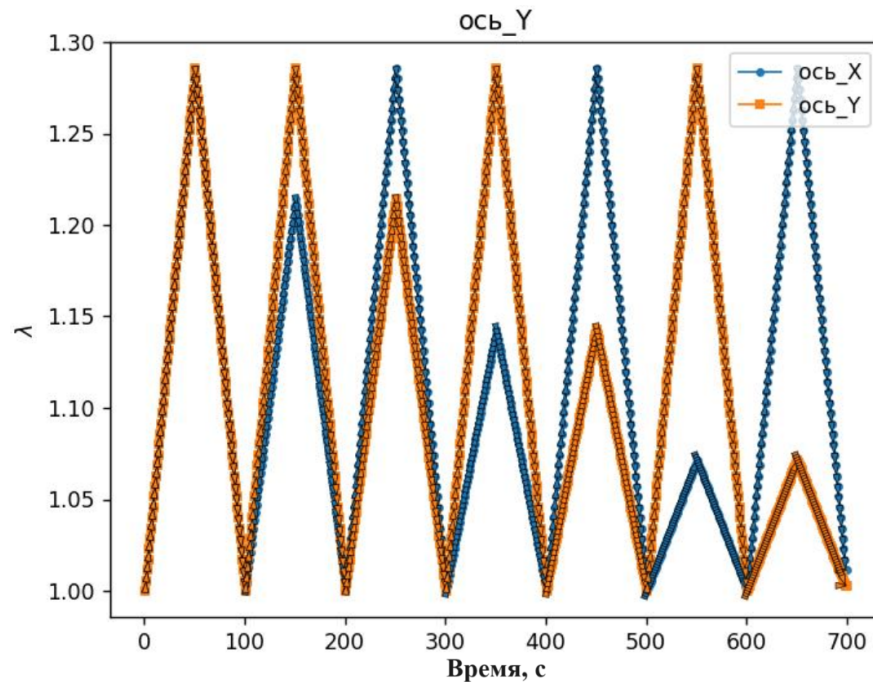


Рисунок 5.9 – Протокол нагружения двухосного испытания на растяжение GogeTex

В результате получим пары главных удлинений вдоль оси x и оси y и пары номинальных напряжений для соответствующих площадок (λ_x, λ_y) , (P_{11}, P_{22}) для каждого фрейма.

Используем архитектуру CANN (рисунок 5.10) с функцией энергии деформации, полученной при помощи линейных, квадратичных и экспоненциальных функций активации. Причем получившаяся нейронная сеть по дизайну будет удовлетворять условиям термодинамической согласованности (2.10), изотропности, материальной объективности, материальной симметрии, идеальной несжимаемости, поливыпуклости (2.16) и физическим ограничениям (2.17) - (2.19). Первый слой представляет собой полиномы (\circ) и $(\circ)^2$, а второй слой применяет тождество (\circ) и экспоненциальную функцию $(\exp(\circ))$ к полиномам из первого слоя. Тогда явное выражение функции свободной энергии деформации будет такое же как в (4.18)

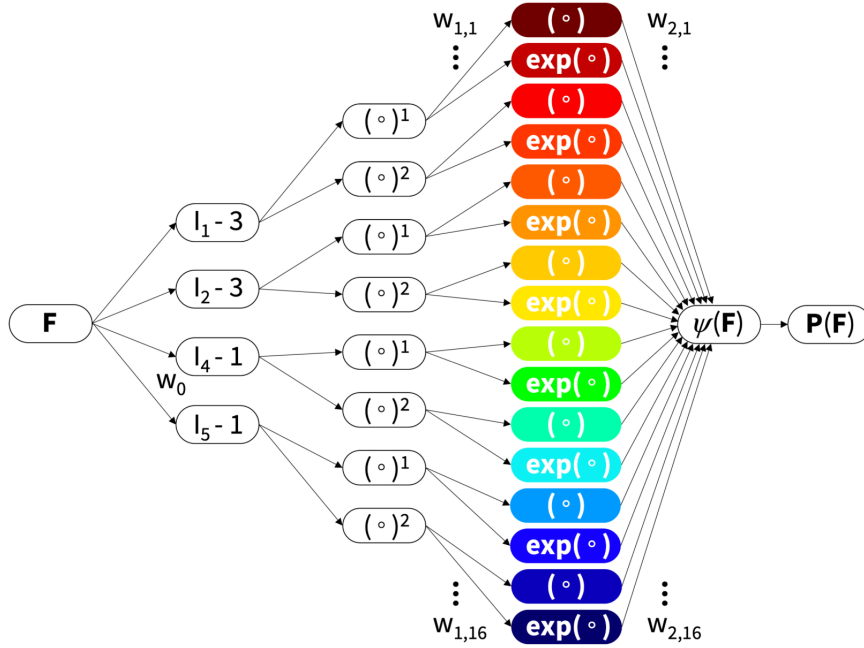


Рисунок 5.10 – Архитектура модели CANN для анизотропных материалов

Используя второй закон термодинамики (2.10), можно выписать *явное выражение* для тензора номинальных напряжений \mathbb{P} , который будет такой же как в формуле (4.19).

Тогда общее количество весов будет равно 32 минус 8 избыточных веса полиномов, т.е. 24 вполне интерпретируемых параметров модели, значительная часть которых в процессе обучения будет обращена в ноль.

Функция потерь будет выглядеть так

$$\mathcal{L}(\theta; \mathbb{F}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\| \mathbb{P}(\mathbb{F}_i) - \hat{\mathbb{P}}_i \right\|^2 + \alpha_1 \|W\|_1 + \frac{1}{2} \alpha_2 \|W\|_2^2 \rightarrow \min \quad (5.6)$$

Обучение сети проводится путем минимизации функции потерь (5.3), а параметры сети $\theta = \{w_{ij}\}$ обучаются с использованием оптимизатора ADAM, который является устойчивым адаптивным алгоритмом для оптимизации на основе градиента первого порядка. При этом веса ограничиваются так, чтобы они всегда оставались неотрицательными, $w_{ij} \geq 0$.

Параметры обучения: максимальное количество эпох – 10000, $\alpha_1 =$

$\alpha_2 = 0$. Функция потерь падает на 4 порядка менее чем за 10000 эпох (рисунок 5.13)

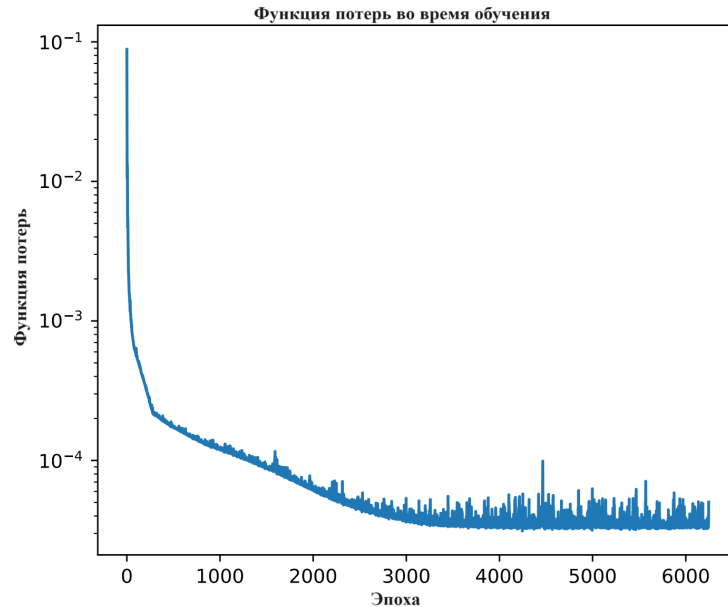


Рисунок 5.11 – График функции потерь при обучении CANN на двухосном механическом тесте с соотношением перемещений зажимов 1:0.5 материала GoreTex

При обучении на единичном двухосном механическом тесте наилучшая модель материала GoreTex получилась с соотношением перемещений зажимов 1:0.5.

Получившаяся функция свободной энергии деформации

$$\begin{aligned}
 \psi(I_1, I_2, I_4, I_5) = & 0.026150 [\exp(0.870109[I_2 - 3]^2) - 1] \\
 & + 0.025259[I_4 - 1]^2 \\
 & + 0.202707 [\exp(0.025848[I_4 - 1]^2) - 1] \\
 & + 0.582025 [\exp(0.018523[I_5 - 1]^2) - 1]
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

хорошо *описывает* обучающие экспериментальные данные, как показано на рисунке 5.12, на котором холодные цвета обозначают вклад изотропных членов в гиперупругую модель, а более теплые цвета вклад анизотропных членов гиперупругой модели. На нижнем графике рисунка 5.12 можно увидеть

более значительный энергетический вклад продольных волокон, отображенный коричневым и желтым цветом, по отношению к верхнему графику, который показывает динамику номинального напряжения \mathbb{P} при тестировании материала GoreTex вдоль оси перпендикулярной линии волокон.

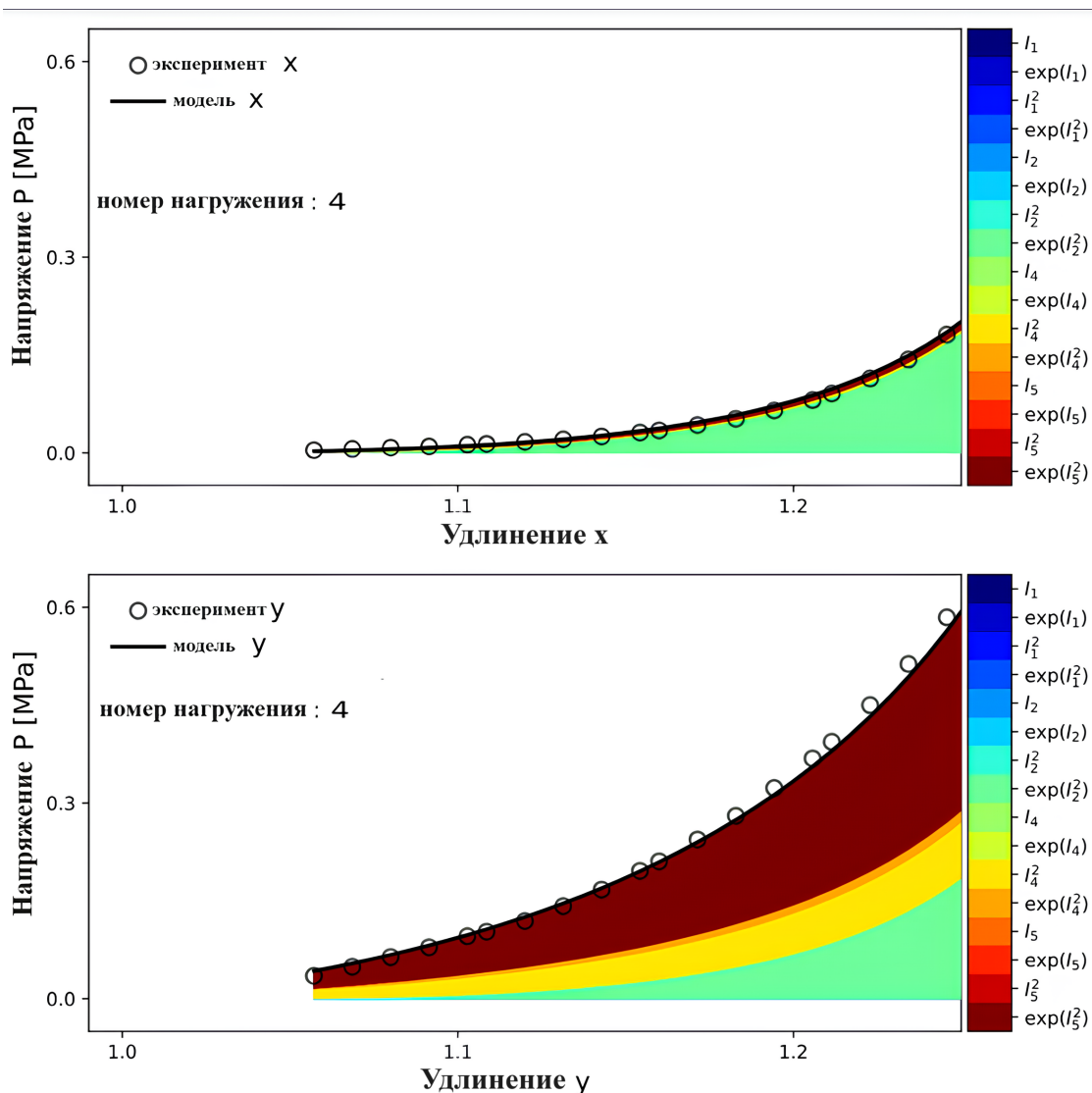


Рисунок 5.12 – Напряжения GoreTex во время двухосного растяжения с соотношением перемещений зажимов 1:0.5

Результат работы модели на тестовых данных, т.е. которые не использовались при обучении, представлены в таблице 5.1. Гиперупругая модель ψ (5.9) имеет плохую предсказательную способность для большинства представленных экспериментов, кроме протоколов на соотношение зажимов 1:1,

0.33:1, которые она предсказывает отлично.

Интересно заметить, что при обучении CANN на одиночных двухосных экспериментах, устойчиво подбирается функция свободной энергии деформации с наибольшим вкладом таких членов

$$a_1/b_1(\exp^{b_1(I_2-3)^2} - 1) + a_2/b_2(\exp^{b_2(I_5-1)^2} - 1), \quad (5.8)$$

но различными наборами коэффициентов для каждого двухосного эксперимента.

Таблица 5.1 – Коэффициенты корреляции R^2 модельных и экспериментальных значений номинального напряжения при обучении индивидуально на эксперименте 1.00 : 0.5

Эксперимент	R_x^2	R_y^2
1.00 : 1.00	0.97	0.52
1.00 : 0.75	0.13	0.01
0.75 : 1.00	0.00	0.00
1.00 : 0.50	0.99	0.99
0.50 : 1.00	0.25	0.00
1.00 : 0.33	0.00	0.00
0.33 : 1.00	0.86	0.97

Наилучшая модель материала GoreTex получилась при обучении на всех типах протокольных нагрузжений одновременно. Функция потерь падает на 4 порядка менее чем за 10000 эпох (рисунок 5.13).

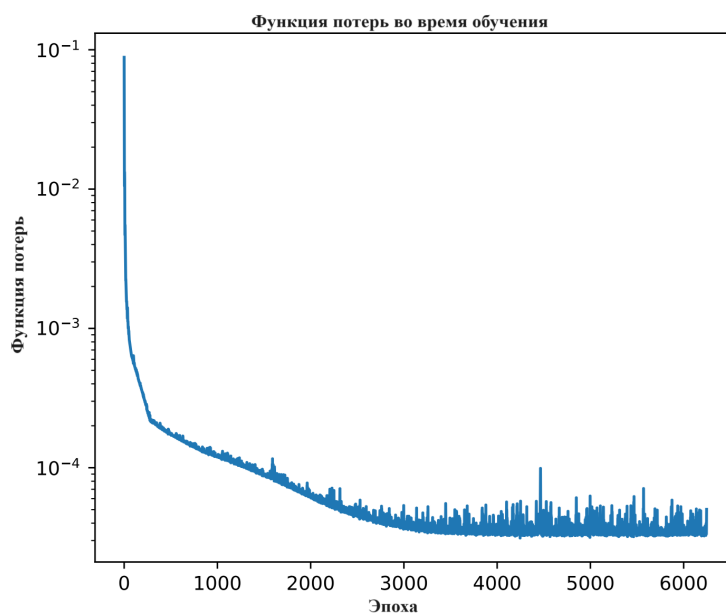


Рисунок 5.13 – График функции потерь при обучении CANN на двухосном механическом тесте материала GogTex со всеми возможными соотношениями перемещений зажимов

Таблица 5.2 – Коэффициенты корреляции R^2 модельных и экспериментальных значений номинального напряжения при обучении на всех экспериментах

Эксперимент	R_x^2	R_y^2
1.00 : 1.00	0.92	0.95
1.00 : 0.75	0.92	0.88
0.75 : 1.00	0.92	0.93
1.00 : 0.50	0.73	0.52
0.50 : 1.00	0.90	0.96
1.00 : 0.33	0.30	0.00
0.33 : 1.00	0.91	0.97

Получившаяся функция свободной энергии деформации

$$\begin{aligned}
 \psi(I_1, I_2, I_4, I_5) = & 0.483[I_2 - 3]^2 + 0.986 [\exp(0.633[I_2 - 3]^2) - 1] \\
 & + 0.218[I_4 - 1]^2 + 0.809 [\exp(0.486[I_4 - 1]^2) - 1] \\
 & + 0.140[I_5 - 1]^2 + 1.150 [\exp(0.099[I_5 - 1]^2) - 1]
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

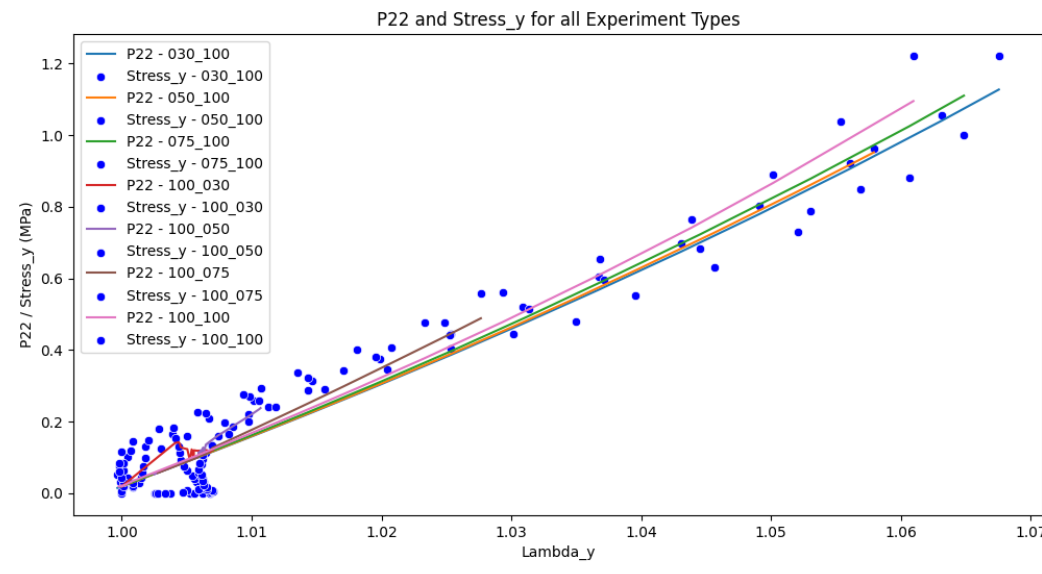
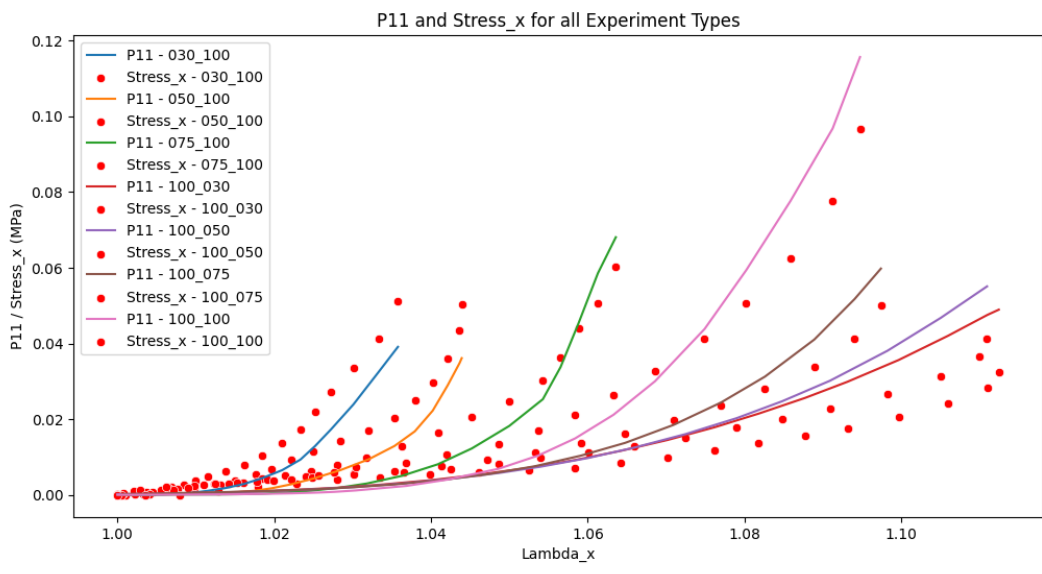


Рисунок 5.14 – Графики экспериментальных и модельных напряжений при обучении на всей выборке данных.

хорошо *описывает* всю экспериментальную выборку данных, как показано на рисунке 5.14 и таблице 5.2 коэффициентов детерминации R^2 .

Обучение модели CANN одновременно на всех типах двухосного теста на растяжение материала GoreTex чувствительно к начальным значениям весов модели. При разных запусках получается разный набор весов модели, к тому же большинство весов не зануляется. Коэффициенты корреляции R^2 модельных и экспериментальных значений номинального напряжения при обучении на всех экспериментах можно посмотреть в таблице 5.2.

Предполагаем, что улучшения результатов можно добиться за счет использования лишь некоторой части экспериментов для обучения CANN. Возможно, что для одинаковых деформированных конфигураций получились разные энергетические состояния образцов во время экспериментов, что не дает нейронной сети из-за механических ограничений, внесенных в ее архитектуру, хорошо описать данные. И попробовать включить логарифмические блоки в архитектуру трансверсально изотропной CANN.

Выводы

В работе были проанализированы основные подходы к построению моделей гиперупругого поведения биоматериалов на основе алгоритмов машинного обучения. А также выбрана и разработана интерпретируемая нейронная сеть для решения обратной задачи поиска модели.

Получившаяся функция свободной энергии деформации отвечает условиям объективности, материальной симметрии и поливыпуклости, а также физическим предположениям о гиперупругости. Показано, что веса нейронной сети обладают физическим смыслом, а сама архитектура является обобщением класса гиперупругих моделей, что позволяет, например, делать выводы о механике материала, анализируя построенную модель.

Подход был применен к трем материалам: белое вещество головного мозга, латекс и GoreTex для кардиоимплантов. Механические эксперименты на растяжение латекса и GoreTex были проведены в Лаборатории экспериментальной биомеханики. На основе полученных данных были построены несжимаемые изотропные и трансверсально изотропные гиперупругие модели биоматериалов.

- *Белое вещество головного мозга.* Для верификации программного кода данные были взяты из оригинальной статьи авторов архитектуры CANN. Нейронная сеть обучалась одновременно на данных экспериментов с разными типами нагружения (сжатие, растяжение, сдвиг), благодаря чему устойчиво получается одна и та же модель. CANN успешно воспроизвела гиперупругое поведение *corona radiata*, показав лучшую точность по сравнению с классическими феноменологическими моделями.

- *Латекс.* Была построена изотропная модель, которая хорошо описывает и предсказывает механические тесты материала на двухосное и одноос-

ное растяжение.

- *GoreTex*. Был построен класс трансверсально изотропных моделей, которые хорошо описывают механические тесты материала на двухосное растяжение. При обучении нейронной сети отдельно на экспериментальных данных с разными соотношениями величин максимального перемещения зажимов установки во время эксперимента устойчиво получается одна и та же модель отлично описывающая данные, но с разными наборами коэффициентов. Требуется дальнейшее исследование оптимального набора экспериментальных данных для наилучшего обучения нейронной сети, а также тестирование архитектуры с дополнительными функциями активации.

Итогом работы стала библиотека *CANNTorch* для автоматического подбора гиперупругой модели при помощи архитектуры *CANN*, использующая фреймворк для глубокого обучения *PyTorch*. Что послужит хорошим инструментом автоматического подбора гиперупругих моделей в дальнейших исследованиях в Лаборатории экспериментальной биомеханики.

Библиотека *CANNTorch* доступна по ссылке:

<https://github.com/23Grammer58/data-driven-constitutive-modelling>

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Young T.* A course of lectures on natural philosophy and the mechanical arts. T. 1. — Taylor, Walton, 1845.
2. *Holzapfel G. A.* Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering science. — 2002.
3. *Sutton M., Hild F.* Recent advances and perspectives in digital image correlation // *Experimental Mechanics*. — 2015. — Т. 55, № 1. — С. 1—8.
4. X-ray computed tomography / P. J. Withers [и др.] // *Nature Reviews Methods Primers*. — 2021. — Т. 1, № 1. — С. 18.
5. Voxel-scale digital volume correlation / H. Leclerc, J.-N. Périé, S. Roux, F. Hild // *Experimental mechanics*. — 2011. — Т. 51. — С. 479—490.
6. *Fung Y.-c.* Biomechanics: mechanical properties of living tissues. — Springer Science & Business Media, 2013.
7. *Ватульян А.* Обратные задачи в механике деформируемого твердого тела. — Litres, 2022.
8. *Pucci E., Saccomandi G.* A note on the Gent model for rubber-like materials // *Rubber chemistry and technology*. — 2002. — Т. 75, № 5. — С. 839—852.
9. *Ogden R. W.* Non-linear elastic deformations. — Courier Corporation, 1997.
10. *Chagnon G., Rebouah M., Favier D.* Hyperelastic energy densities for soft biological tissues: a review // *Journal of Elasticity*. — 2015. — Т. 120. — С. 129—160.

11. A state-of-the-art review on machine learning-based multiscale modeling, simulation, homogenization and design of materials / D. Bishara, Y. Xie, W. K. Liu, S. Li // Archives of computational methods in engineering. — 2023. — Т. 30, № 1. — С. 191—222.
12. Neural network based constitutive model for rubber material / Y. Shen, K. Chandrashekhara, W. Breig, L. Oliver // Rubber chemistry and technology. — 2004. — Т. 77, № 2. — С. 257—277.
13. Automated constitutive modeling of isotropic hyperelasticity based on artificial neural networks / К. А. Kalina [и др.] // Computational Mechanics. — 2022. — Т. 69, № 1. — С. 213—232.
14. Polyconvex anisotropic hyperelasticity with neural networks / D. K. Klein [и др.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2022. — Т. 159. — С. 104703.
15. NNEUCLID: Deep-learning hyperelasticity without stress data (May 2022) / P. Thakolkaran [и др.] // arXiv preprint arXiv:2205.06664. —
16. *Tac V., Costabal F. S., Tepole A. B.* Data-driven tissue mechanics with polyconvex neural ordinary differential equations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2022. — Т. 398. — С. 115248.
17. Evolutionary identification of macro-mechanical models / M. Schoenauer [и др.]. — 1996.
18. The Language of Hyperelastic Materials / G. Kissas, S. Mishra, E. Chatzi, L. De Lorenzis // arXiv preprint arXiv:2402.04263. — 2024.

19. Баранов И., Ватульян А., Соловьев А. Об одном генетическом алгоритме и его применении в обратных задачах идентификации упругих сред // Вычислительные технологии. — 2006. — Т. 11, № 3. — С. 14—26.
20. Flaschel M., Kumar S., De Lorenzis L. Unsupervised discovery of interpretable hyperelastic constitutive laws // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2021. — Т. 381. — С. 113852.
21. Automated model discovery for skin: Discovering the best model, data, and experiment / K. Linka, A. B. Tepole, G. A. Holzapfel, E. Kuhl // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2023. — Т. 410. — С. 116007.
22. Linka K., Kuhl E. A new family of Constitutive Artificial Neural Networks towards automated model discovery // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2023. — Т. 403. — С. 115731.
23. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library / A. Paszke [и др.] // Advances in neural information processing systems. — 2019. — Т. 32.
24. Taber L. A. Continuum modeling in mechanobiology. Т. 10. — Springer, 2020.
25. Ильюшин А. А. Механика сплошной среды. — 1971.
26. Novozhilov V. V. Foundations of the nonlinear theory of elasticity. — Courier Corporation, 1999.
27. Ciarlet P. G. Mathematical elasticity: Three-dimensional elasticity. — SIAM, 2021.

28. *Boussinesq J.* Application des potentiels à l'étude de l'équilibre et du mouvement des solides élastiques: principalement au calcul des déformations et des pressions que produisent, dans ces solides, des efforts quelconques exercés sur une petite partie de leur surface ou de leur intérieur; mémoire suivi de notes étendues sur divers points de physique mathématique et d'analyse. — Gauthier-Villars, 1885.

29. *Green G.* An essay on the application of mathematical analysis to the theories of electricity and magnetism. T. 3. — author, 1889.

30. *Bower A. F.* Applied mechanics of solids. — CRC press, 2009.

31. *Noll W.* The foundations of mechanics and thermodynamics: selected papers. — Springer Science & Business Media, 2012.

32. *Spencer A. J.* Part III. Theory of invariants // Continuum physics. — 1971. — T. 1. — C. 239—353.

33. *Ball J. M.* Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity // Archive for rational mechanics and Analysis. — 1976. — T. 63. — C. 337—403.

34. *Rivlin R. S., Saunders D.* Large elastic deformations of isotropic materials VII. Experiments on the deformation of rubber // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. — 1951. — T. 243, № 865. — C. 251—288.

35. *Hartmann S., Neff P.* Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility // International journal of solids and structures. — 2003. — T. 40, № 11. — C. 2767—2791.

36. *Antman S. S.* Regular and singular problems for large elastic deformations of tubes, wedges, and cylinders // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. — 1983. — Т. 83. — С. 1—52.

37. РАЗРАБОТКА ИСПЫТАТЕЛЬНОЙ МАШИНЫ ДЛЯ ДВУХОС-
НОВОГО ТЕСТИРОВАНИЯ МЯГКИХ ТКАНЕЙ И БИОМАТЕРИАЛОВ / А. Л.
Овсепьян [и др.] // *Российский журнал биомеханики*. — 2023. — Т. 27, №
4. — С. 12—24.

38. *Abbasi J., Andersen P. Ø.* Physical activation functions (pafs): An approach for more efficient induction of physics into physics-informed neural networks (pinns) // *arXiv preprint arXiv:2205.14630*. — 2022.

39. *Jagtap A. D., Kharazmi E., Karniadakis G. E.* Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: Applications to forward and inverse problems // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2020. — Т. 365. — С. 113028.

40. *Cybenko G.* Approximation by superpositions of a sigmoidal function // *Mathematics of control, signals and systems*. — 1989. — Т. 2, № 4. — С. 303—314.

41. *Automatic differentiation in pytorch / A. Paszke [и др.]*. — 2017.

42. *Neuralpde: Automating physics-informed neural networks (pinns) with error approximations / K. Zubov [и др.]* // *arXiv preprint arXiv:2107.09443*. — 2021.

43. *Werbos P. J.* Backpropagation through time: what it does and how to do it // *Proceedings of the IEEE*. — 1990. — Т. 78, № 10. — С. 1550—1560.

44. *Kingma D. P., Ba J.* Adam: A method for stochastic optimization // arXiv preprint arXiv:1412.6980. — 2014.

45. *Asuero A. G., Sayago A., González A.* The correlation coefficient: An overview // *Critical reviews in analytical chemistry*. — 2006. — T. 36, № 1. — C. 41—59.

46. *Gohlke D. J., Tanner J. C.* Gore-Tex® waterproof breathable laminates // *Journal of Coated Fabrics*. — 1976. — T. 6, № 1. — C. 28—38.