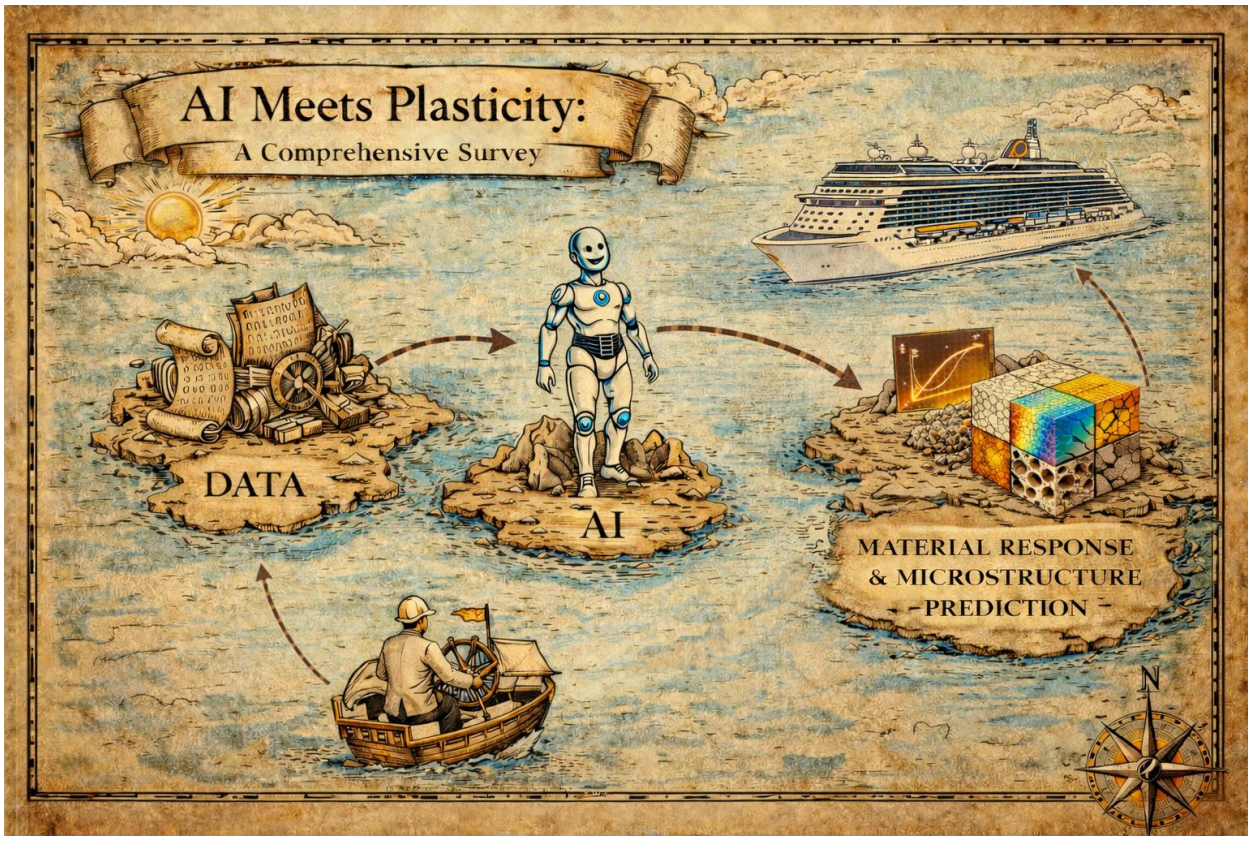
arXiv:2602.01215v1 [cond-mat.mtrl-sci] 1 Feb 2026

图文摘要

人工智能与塑性相遇：全面综述

Hadi Bak hshan, Sima Farshbaf, Junior Ramirez Machado, Fernando Rastellini Canela, Josep Maria Carbonell



人工智能生成的图像（OpenAI）

人工智能与塑性相遇：全面综述

Hadi Bakhshan[a,1], Sima Farshbaf[a,b,2], Junior Ramirez Machado[a,b], Fernando Rastellini Canela[a], Josep Maria Carbonell[a,c]

[a]工程数值方法国际中心（*CIMNE*），*UPC*北校区，*08034* 巴塞罗那，西班牙[b]加泰罗尼亚理工大学（*UPC*），*UPC*北校区，*08034* 巴塞罗那，西班牙[c]材料技术应用机电一体化与建模（*MECAMAT*）研究组。维克大学—加泰罗尼亚中央大学（*UVic-UCC*），*C. de la Laura 13*，*08500* 维克，西班牙

摘要

人工智能（AI）正迅速成为一种科学发现的新范式，即数据驱动科学，并席卷几乎所有科学学科。在材料科学与工程领域，人工智能已开始产生变革性影响，因此，探讨其与材料塑性之间的相互作用正当其时且十分必要。本研究全面综述了人工智能与塑性融合的现状，重点介绍用于发现材料塑性行为、构建其代理模型并对其进行模拟的先进人工智能方法。从材料科学的角度出发，我们考察了支配塑性变形的因果关系，包括微观结构表征，以及通过塑性本构模型描述的宏观响应。从人工智能方法的角度出发，我们评述了广泛的应用方法，从频率学派技术（如经典机器学习（ML）、深度学习（DL）和物理信息模型），到融合不确定性量化与生成式人工智能方法的概率框架。我们结合材料表征和塑性相关应用的上下文，讨论这些数据驱动方法。本综述的主要目标是构建一个以人工智能方法为基础、全面且条理清晰的分类体系，尤其着重区分这些技术的关键方面，包括模型架构、数据需求，以及其在材料塑性这一特定领域中的预测性能。为此，本研究旨在为材料学界的研究人员和从业者提供清晰的路线图，同时加深对人工智能在推动材料塑性与表征方面所起作用的物理洞见与直观认识；在新兴的人工智能驱动时代，这一领域正日益重要。

关键词：
人工智能（AI）、机器学习（ML）、深度学习（DL）、生成式人工智能、材料塑性、微观结构表征

[1]电子邮箱：hbakhshan@cimne.upc.edu [2]
电子邮箱：sima.farshbaf@upc.edu

目录

术语表 **5**

1 引言 7

1.1 分类体系与术语 .71.2 早期综述 .81.3 本文的目标与结构 .8**2 数据集：类型、来源与抽样策略 9**

3 经典机器学习（ML）方法 11

3.1 多项式与非线性回归 .113.2 支持向量机 .123.2.1 基于支持向量机的屈服函数代理模型 .133.2.2 基于支持向量机的本构模型代理模型 .143.3 基于决策树的方法 .153.3.1 自助聚合 .163.3.2 提升 .173.4 用于模型发现的符号回归 .183.5 小结 .20

4 深度学习（DL）方法 20

4.1 人工神经网络 .214.1.1 基于人工神经网络的YF代理模型 .224.1.2 基于人工神经网络的本构模型参数识别 .234.1.3 用于塑性的人工神经网络 .234.1.4 用于黏塑性、热黏塑性和亚塑性的人工神经网络 .244.1.5 用于晶体塑性的人工神经网络 .25

4.2 卷积神经网络（CNN）.26 4.2.1 用于微观结构表征的卷积神经网络.29 4.2.2 用于力学性能预测的卷积神经网络.30 4.2.3 用于力学响应预测的卷积神经网络.30 4.3 循环神经网络（RNN）.33 4.3.1 基础循环神经网络的应用.34 4.3.2 长短期记忆网络.35 4.3.3 门控循环单元网络.37 4.4 Transformer与基于注意力的模型.40 4.5 图神经网络（GNN）.44 4.5.1 用于微观结构表征的图神经网络.45 4.5.2 图神经网络的其他应用.48 4.6 Kolmogorov-Arnold网络（KAN）.48 4.7 多模态融合模型.51 4.7.1 基于编码器-解码器的融合.52 4.7.2 基于GNN的融合.52 4.7.3 基于Transformer的融合.53 4.8 总结.55 5 物理感知神经网络（PANN）56 5.1 物理信息神经网络（PINN）.57 5.1.1 将本构关系作为约束.58

5.1.2 将热力学定律作为约束 .615.1.3 将偏微分方程作为约束 .615.1.4 多重约束 .625.2 物理编码神经网络（PENNs） .635.2.1 对称性、凸性与混合架构 .635.2.2 强制满足精确物理规律 .665.3 神经算子（NOs） .665.3.1 深度算子网络（DeepONet） .675.3.2 傅里叶神经算子（FNO） .695.3.3 其他神经算子 .715.4 总结 .736 **Prob**

不确定性量化（UQ）的概率方法 73

6.1 高斯过程（GP） .746.1.1 基于高斯过程的本构模型参数识别 .756.1.2 基于高斯过程的CM代理模型 .756.2 贝叶斯神经网络（BNN） .786.3 总结 .797 **基因**

生成式人工智能方法 79

7.1 生成对抗网络（GANs） .807.1.1 用于场变量预测的生成对抗网络 .817.1.2 用于微观结构重构的生成对抗网络 .837.2 归一化流（NFs） .857.3 变分自编码器（VAEs） .857.4 扩散模型 .877.5 大语言模型（LLMs）与智能体人工智能 .887.6 总结 .908 **讨论**

讨论与未来方向90

8.1 性能评估.908.2 人工智能在塑性领域的最佳实践.928.2.1 数据集适用性.928.2.2 人工智能模型选择.928.2.3 局限性.928.3 未来方向.93

9 结论 **93**

术语表

ANN	人工神经网络
BI	贝叶斯推断
BNN	贝叶斯神经网络
条件深度卷积生成对抗网络	条件深度卷积生成对抗网络
cGAN	条件生成对抗网络
CM	本构模型
CNN	卷积神经网络
卷积长短期记忆网络	卷积长短期记忆网络
CP	晶体塑性
晶体塑性有限元法	晶体塑性有限元法
Cu	铜
DeepONet	深度算子网络
DeqGAN	微分方程生成对抗网络
DL	深度学习
DP	微分编程
DRX	动态再结晶
DT	决策树
EBSD	电子背散射衍射
ELBO	证据下界
EUCLID	高效无监督本构定律识别与发现
FCC	面心立方
FCN	全卷积网络
FFN	前馈网络
FNO	傅里叶神经算子
GA	遗传算法
GAN	生成对抗网络
GAT	图注意力网络
GBM	梯度提升机
GCN	图卷积网络
Geo-FNO	几何感知傅里叶神经算子
GNN	图神经网络
GNO	图神经算子
GP	高斯过程
GRU	门控循环单元
GS	网格搜索
GWO	灰狼优化
HANO	历史感知神经算子
HCP	六方最密堆积
ICNN	输入凸神经网络
JMAK	Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov
KAM	核平均取向差
KAN	Kolmogorov-Arnold 网络
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
LLM	大语言模型
LN	层归一化
LoRA	低秩适配

LSTM	长短期记忆
MCMC	马尔可夫链蒙特卡罗
ML	机器学习
MLP	多层感知机
MPL	消息传递层
MSC	最小状态单元
MSE	均方误差
NF	归一化流
NO	神经算子
ODE	常微分方程
PANN	物理感知神经网络
PCA	主成分分析
PDE	偏微分方程
PENN	物理编码神经网络
PID-GAN	物理信息判别器生成对抗网络
PIG-GAN	物理信息生成器生成对抗网络
PINN	物理信息神经网络
PINOS	物理信息神经算子求解器
PSO	粒子群优化
RAG	检索增强生成
RBF	径向基函数
ReLU	修正线性单元
ResNet	深度残差网络
RF	随机森林
RNN	循环神经网络
RVE	代表性体积元
SELU	缩放指数线性单元
SEM	扫描电子显微镜
序列到序列	序列到序列
SR	符号回归
SVM	支持向量机
基于移位窗口的多头自注意力	基于移位窗口的多头自注意力
TANN	基于热力学的人工神经网络
TCN	时间卷积网络
TRNO	温度感知循环神经算子
UQ	不确定性量化
VAE	变分自编码器
VGG	甚深卷积网络
ViT	视觉Transformer
基于窗口的多头自注意力	基于窗口的多头自注意力
XGBoost	极端梯度提升
YF	屈服函数

1. 引言

塑性作为一种本构模型（CM），描述了材料在承受足够大的外力时发生永久变形的能力。这种力学性质在金属中尤为突出，在大多数固体材料中也较为常见；自青铜时代以来，人们便利用这一性质将金属制成工具和武器[1]。通常从两个角度考察塑性：宏观尺度和微观尺度。

在宏观尺度上，塑性行为以可观测的材料响应为特征，通常用应力–应变状态变量描述，其中塑性的起始由屈服强度界定。屈服后，材料会发生塑性流动，并可能伴随应变硬化、应变率硬化和热软化[2]。这些效应意味着，要使变形继续进行，就需要施加更大的应力。为描述塑性行为在宏观和连续介质层面上的表现，人们采用计算固体力学和塑性理论 [3–5]。

然而，塑性从根本上源于材料在微观尺度上的内部结构和变形机制。由于原子间键合力远大于材料相对较低的观测屈服强度，因此可以得出结论：晶体材料中的塑性变形源自微观滑移过程，而非原子均匀拉伸 [1]。因此，在原子尺度上，塑性变形是不连续的，并受到晶格的强烈支配；晶格中的不完善之处使变形得以发生。这些线缺陷称为位错，它们能降低原子面彼此相对移动所需的应力，从而促进滑移 [6]。位错运动取决于晶体结构、可用滑移系的数量，以及晶界、析出物和其他晶格缺陷等障碍 [7]。除位错滑移外，变形孪生和应力诱导相变等机制也可能促使某些材料发生塑性变形 [8]。

上述涉及多尺度框架的塑性机制和材料表征，传统上建立在经典物理学范式之上，例如经验观察、理论发展和大规模数值模拟。然而，随着数据时代的到来，第四种范式——数据驱动科学应运而生，并由人工智能（AI）和机器学习（ML）技术 [9–12], 以及现代计算基础设施的进步 [13, 14]共同推动。该范式为材料科学和表征带来了重要机遇，使人们能够分析微观结构、加工条件与宏观力学响应之间高度非线性的相互作用；仅凭传统物理驱动模型难以捕捉这些相互作用。

1.1. 分类体系与术语

固体力学问题由三类控制方程定义：守恒定律，例如线性动量平衡；运动学方程，用于描述位移、应变和应变率之间的关系；以及本构定律，通过将运动学量与应力和平衡方程联系起来，定义材料响应。本构模型通常可分为路径无关（或历史无关）模型（如弹性）和路径相关（或历史相关）模型（如塑性）[2, 4]。传统上，这些模型利用从简化加载条件下获得的实验数据进行表述，并通过校准参数来描述材料行为。然而，对于涉及多物理场现象的复杂情形，这类简化假设往往不充分且不准确。此外，对于受高度复杂物理规律支配的问题，在许多情况下无法推导出具有代表性的解析公式。

随着全场实验技术 [15, 16] 和计算多尺度模拟 [17], 的发展所带来的数据日益丰富，本构建模已转向大数据范式，同时带来了机遇与挑战。这一转变使数据驱动方法在提升材料表征和建模效率方面的影响力与可行性日益增强。数据驱动方法和基于人工智能的方法可根据其可解释性大致分为可解释（白盒）模型和不可解释（黑盒）模型，也可根据其学习范式分为监督学习、无监督学习和强化学习 [18]。不可解释模型主要学习输入–输出映射，并只能提供有限的物理洞见，其中包括许多机器学习和深度学习（DL）方法。相比之下，可解释模型旨在生成具有物理意义的本构关系。就学习范式而言，监督学习依赖带标签的输入–输出数据，无监督学习侧重于从无标签数据中发现模式，而强化学习则能够优化模型参数和架构，以最大化预测性能 [19]。这

因此，人工智能方法与塑性建模之间的交互至关重要，因为经典本构方法日益需要补充性数据驱动方法，而这一领域尚未在文献中得到充分探索。

1.2. 早期综述

近年来，数据驱动人工智能范式与固体材料力学之间的交互作用受到了广泛关注。众多综述研究对这一快速发展的领域进行了总结，突出了其广度与多样性。在材料设计领域，已有多篇综合性综述发表，包括关于人工智能和机器学习用于材料设计 [20–25], 逆向设计 [26, 27], 超材料设计 [28, 29], 以及使用大语言模型（LLMs）进行材料设计与发现的研究 [30–34]。

关于用于材料行为表征的数据驱动人工智能方法——这与本文的重点最为相关——近年来文献中已有多项相关研究。文献 [35]综述了用于土体本构建模的机器学习方法。文献 [36] 还综述了机器学习在金属成形工艺本构建模中的应用，文献 [37] 则针对板料成形进行了综述。文献 [38]介绍了机器学习的应用，主要包括监督学习方法、经典机器学习和深度学习方法，用于非线性材料行为建模。此外，文献 [39]对用于有限元方法（FEM）的机器学习和深度学习方法进行了综述，并简要讨论了本构建模。文献 [40] 综述了固体力学中的物理信息引导数据驱动方法，其中将部分控制物理定律嵌入深度学习流程，以确保物理一致性。

在现有研究中，最相关的综述发表于 [41], ，其中介绍了数据驱动本构定律，并根据其对变形路径或历史的依赖性进行分类。该研究讨论了多种本构模型，例如弹性和塑性，并着重采用计算工程视角。然而，目前仍缺乏对人工智能方法的详细结构化综述，尤其是对应用于本构建模的人工智能技术进行深入探讨的研究。

尽管关于材料与建模领域人工智能方法的综述论文日益增多，但仍存在若干关键空白。首先，从材料与本构建模的角度来看，尚缺乏专门针对塑性的全面综述。其次，大多数研究聚焦于特定的人工智能子领域，如机器学习或深度学习，却忽视了对各类方法与架构进行统一、全面综述的必要性；这些方法与架构涵盖从频率学派范式到概率范式的范围。第三，现有综述往往对表征的阐述含糊不清，也缺乏结构完善的分类体系，无法将人工智能方法及其在材料表征（尤其是塑性表征）中的部署有机地结合起来。第四，大多数本构建模综述侧重于宏观表征，预测材料响应，却未涉及材料行为的微观起源及其相互联系，而这些问题可借助人工智能驱动的方法加以探索。最后，关于新兴人工智能范式的综述明显缺失，例如生成式人工智能和大语言模型的智能体应用。

鉴于这些局限性，本研究旨在通过全面、系统地综述材料塑性的数据驱动人工智能方法，弥补这些不足。

1.3. 研究目标与论文结构

本综述旨在系统呈现材料塑性本构建模中所有已应用人工智能方法的成熟且结构化的表征。从塑性角度出发，我们根据人工智能方法在材料性能预测、材料响应预测和微观结构表征中的应用对相关研究进行分类，如图1所示。从人工智能方法的角度出发，我们探讨其在材料建模、微观结构表征、多尺度分析和数据增强等不同场景中的各种应用方法。分类体系基于人工智能范式，涵盖从广泛使用的机器学习和深度学习等频率学派方法，到新兴的物理信息引导方法和生成式人工智能方法，以及利用大语言模型的智能体人工智能和用于不确定性量化的概率方法。如图1所示，该图突出了人工智能与塑性的交叉领域；我们根据架构分析人工智能方法，以深入了解用于塑性建模和材料表征的模型内部机制。本综述涵盖了利用人工智能方法对塑性进行的所有宏观和微观尺度表征与实现，并探讨它们与最优模型之间的相关性。本文的主要贡献在于为深入理解新兴人工智能方法提供了路径，这不仅适用于塑性，也适用于材料科学和表征，并将推动其未来在计算建模、设计和发现中的应用；这些能力对于材料科学家在人工智能赋能材料科学的新时代至关重要。

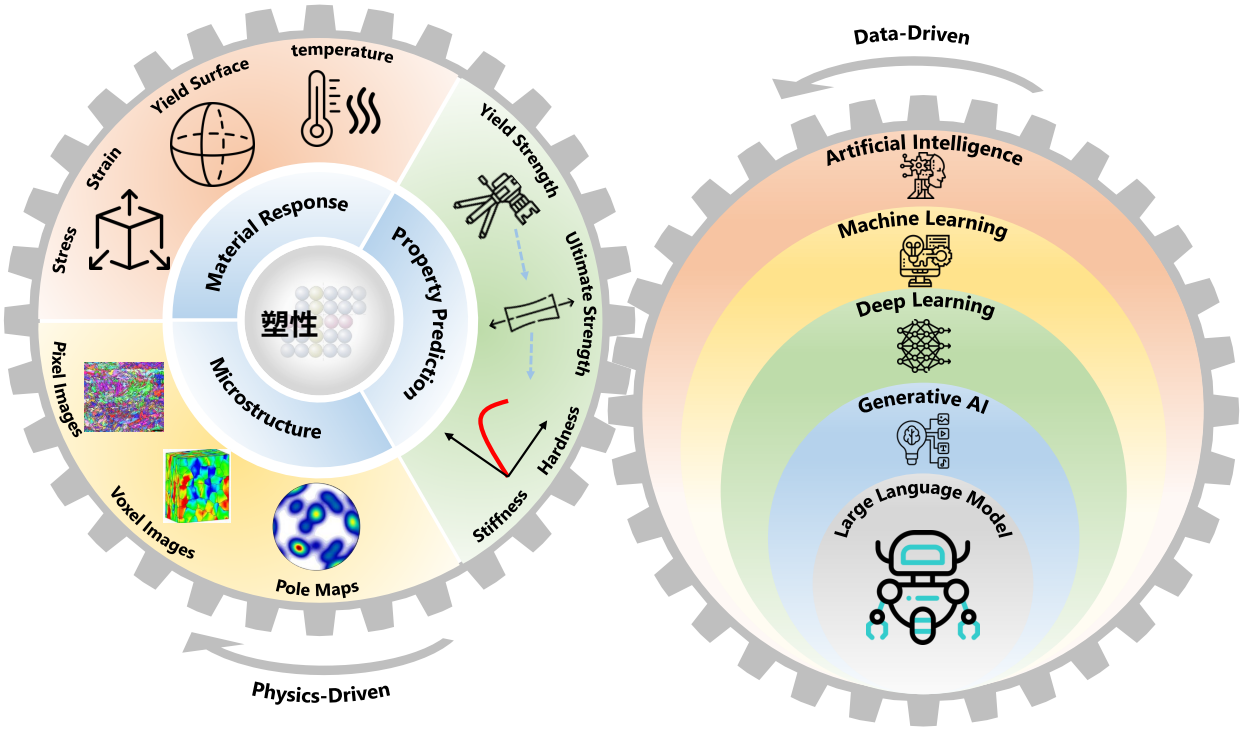


图1： 人工智能遇上可塑性：当数据驱动方法与物理驱动方法交汇时，新的范式应运而生 e.

本文结构安排如下：第2 节讨论数据集的类型、来源和抽样策略，这些数据集和策略用于宏观和微观尺度方法。我们首先在第3节综述经典机器学习方法，以区别于深度学习方法，因为机器学习方法通常应用于不含高维或复杂数据及问题的小型数据集。接下来，第4节介绍应用最广泛的监督学习深度学习方法，讨论适用于各种表格、图像和时变数据集的经典技术与新兴技术。第5 节介绍新颖且广泛应用的基于深度学习的物理引导方法，重点阐述将物理定律融入学习架构的不同差异化策略。这些章节基于频率学派方法，通常预期得到确定性预测；然而，不确定性量化对于材料建模和表征至关重要。第6节探讨这一方面，介绍用于材料塑性的概率方法。第7 节讨论生成式人工智能方法在微观结构数据集预测和数据增强中的应用，并转向大语言模型驱动的方法和智能体人工智能等新兴方法。最后，第8节讨论人工智能方法在塑性领域的性能和最佳实践，并指出未来研究方向。最后，本文在第9节作结。每一节首先简要介绍所讨论的人工智能方法，随后对该方法在文献中的具体应用进行分类，并详细说明所选变体及与其他方法差异显著的新案例。每节最后均以简短总结概述最重要的讨论内容。

2. 数据集：类型、来源和抽样策略

作为数据驱动方法，人工智能方法的性能和可靠性高度依赖于用于训练的数据集。在材料塑性变形建模中，这种依赖尤为显著，因为其底层现象本质上具有非线性、历史相关性，并且对微观结构非均匀性高度敏感。因此，仅使用大型数据集或均匀分布的数据，并不能保证模型的鲁棒性。此外，在材料科学与工程等科学领域，大规模数据集往往十分稀缺 [42]，这进一步加剧了这一局限。相反，现有数据相对于底层材料行为和变形机制的信息丰富度与覆盖范围，起着决定性作用。

在本研究中，材料建模与表征是核心内容，数据集大体可分为三类。第一类是非时序数据集，由独立样本构成，其中假设材料响应仅取决于当前状态变量，例如应变或变形度量。这类数据集通常对应弹性或路径无关的材料行为。由于输入域固定且定义明确，这类数据集相对容易生成和采样。第二类包括时序或路径相关数据集，源于取决于加载历史的材料行为，例如塑性、黏塑性和损伤。在这种情况下，每个数据样本并非单个点，而是代表一条加载路径及其相应响应的序列。这显著增加了问题的复杂性，因为必须同时捕捉瞬时变形效应和累积变形效应。问题还因多条不同的加载路径可能产生相同的材料响应而进一步复杂化，由此形成难以通过人工智能模型学习的多对一映射关系 [41]。第三类是显微组织解析数据集，通常由扫描电子显微镜、透射电子显微镜等成像技术或多尺度模拟获得。这类数据集编码了材料晶体学结构的空间信息，包括晶粒形貌、晶体学取向和相分布，而这些因素都会显著影响塑性变形。然而，这类数据集生成成本高、数量稀少，且难以系统标注，限制了其广泛应用，也引出了如何获取或生成这些数据的问题。

如图 2所示，材料科学中有四种用于基于人工智能的方法的数据集获取机制。首先，可以通过实验研究生成数据集，即开展各种测试来表征材料行为。这些实验涵盖了从宏观尺度测试（如用于确定材料属性的准静态或动态加载），到监测微观结构演化的微观尺度研究。此类多尺度实验方法能够识别不同尺度上的变量之间的相关性。然而，实验数据采集成本高昂，需要先进设备，而且数据量往往十分有限，因此催生了第二种数据集生成范式：通过数值模拟获得合成数据。

数值方法（如有限元法（FEM）和跨尺度方法，包括多尺度建模）被广泛用于生成模型训练所需的数据集。此过程通常需要少量实验结果来验证计算模型，之后便可系统地改变问题参数，以扩展数据定义域。在某些情况下，尤其是在多尺度分析中，计算成本仍然高得难以承受，因此需要探索大规模数据生成的替代方法。在此背景下，生成式人工智能方法应运而生，成为一种独特的数据生成范式 [43]。这些方法可通过多种策略合成扩充数据集 [44]。第7节详细回顾了材料数据集与建模领域中的此类方法。

获取数据集的第四种方法是利用文献中的现有数据，包括公开可用的数据集和数据库。随着大语言模型（LLMs）和检索增强生成（RAG）技术的发展，这一策略变得越来越有效；这些技术能够促进跨多种数据模态的数据挖掘，包括文本、表格数据和图像。

尽管存在多种数据获取途径，获取高质量数据仍然具有挑战性。因此，选择适当的采样策略 [45] 对于最大化每个数据点的信息增益并缓解数据稀缺至关重要。采样策略的设计与力学中的经典实验设计概念 [46] 密切相关。在这两种情况下，目标都是以能够最大程度揭示系统行为的方式，将问题条件与材料参数结合起来。然而，与数值采样不同，实验设计受到可行性、可重复性和设备限制的约束。这一区别凸显了采样策略的必要性：不仅要在理论上合理，还要能够适应现实世界中的数据获取约束。

单次采样是数据生成中的一种常用方法，其中所有采样位置均在模型训练之前确定。网格采样等简单策略常用于材料建模 [47, 48]，因为它们易于实现，并凭借其空间填充特性提供足够的性能。然而，这些方法存在固有的局限性，最显著的是冗余：当某些输入参数对模型响应的影响有限时，多个样本会提供几乎相同的信息 [49]。为缓解这一问题，可以采用随机采样；然而，当可用样本数量有限时，它往往导致对输入域的覆盖不佳。

准随机采样方法兼顾空间填充性和非退化设计，弥补了网格方法和纯随机方法的不足。一种广泛使用的准随机方法是拉丁

超立方采样 [50–53], 确保从输入空间的每个分区中抽取一个样本 [54]。尽管这些方法具有优势，但在高维或受物理约束的输入空间中仍有局限，可能违反基本的力学原理。此外，对于时序输入，单次采样尤为不足，因为生成加载路径不仅需要定义状态变量的边界，还需要确定变形的时间结构。为缓解这一挑战，已有研究提出了多种方法，包括使用随机控制点并进行插值 [55, 56], 在应变空间中进行随机游走 [57], 以及高斯过程（GP）等随机过程 [58]。尽管这些方法取得了一定成效，但目前仍缺少一种能够系统生成兼具空间填充性和力学意义的加载历史的整体方法，因此有必要采用序列式和自适应抽样策略 [59]。

单次采样的一个根本局限在于，缺乏关于所生成数据对学习任务支持程度的反馈。序列式或自适应采样通过依据代理模型不断演化的性能来引导数据生成，从而克服这一局限 [60]。在这些方法中，模型会识别输入空间中预测不确定性较高的区域，并据此生成额外样本，随后对模型进行再训练。这使得自适应采样特别适用于路径相关材料建模，因为局部失效或不准确的预测可能表明训练数据不足。然而，尽管前景可期，自适应抽样策略在材料建模与塑性文献中仍相对未得到充分利用 [41]。

自适应采样的一个新兴扩展将深度强化学习（RL） [61–63]用于数据生成与实验设计。在该框架中，加载路径或实验配置的选择被表述为序贯决策问题，其中强化学习智能体通过提出新的实验或仿真来学习最大化信息增益或模型准确度。此类方法特别适用于成本高昂的仿真或实验，因为每个数据点都会产生很高的成本。借助先前结果，深度强化学习能够识别出难以人工设计、却极具信息量的非直观抽样策略。

3. 经典机器学习方法

在本节中，我们综述经典机器学习方法在塑性中的应用。在进一步讨论采用多层神经网络架构、能够从大型数据集中进行自动特征提取的深度学习模型之前，我们考察机器学习方法，包括线性回归和多项式回归、支持向量机、基于决策树的模型以及符号回归。基于回归的方法是经典本构拟合的自然延伸。支持向量机和决策树在保持相对较高数值稳定性的同时，提供了强大的非线性逼近能力。在可解释方法中，符号回归明确寻求闭式本构表达式，从而直接促进模型发现。这些机器学习方法构成了传统本构建模与现代人工智能驱动框架之间的重要桥梁。

3.1. 多项式与非线性回归

多项式回归和非线性回归一直是文献中最常见的方法，通常依赖使用者的专业知识，先确定合适的应力-应变关系，再确定其相关参数。这一通用方法相对直接，并已广泛应用于不同材料，包括土体 [64–66], 聚合物 [67, 68], 和合金 [69, 70]。

通常，利用一组实验测试结果拟合数学方程，从而得到本构关系。根据应用情况，一个或多个自变量可能会影响塑性响应。例如，在率无关弹塑性模型中，单独使用塑性应变可能就足够了 [71, 72], , 而黏塑性模型和热塑性模型则需要应变、应变率和温度 [73–75]。对于土体亚塑性，通常会结合使用应变率、当前应力和孔隙比 [76, 77]。这类模型通常称为唯象模型 [69]。

另一种方法是在数学表述中明确纳入物理参数，以捕捉材料行为对其物理状态的依赖；这称为基于物理的模型。物理参数涵盖微观结构特征，例如位错密度 [77–81], 孪生 [82], 晶粒尺寸，以及动态再结晶过程中的取向 [83–86]。在更复杂的表述中，这些参数还可以与测试条件耦合，以考虑复杂相互作用并产生更真实的响应 [87, 88], , 同时考虑影响材料塑性行为的其他现象，例如声学效应 [89–92]。然而，由于涉及大量材料内禀参数和过程相关变量，

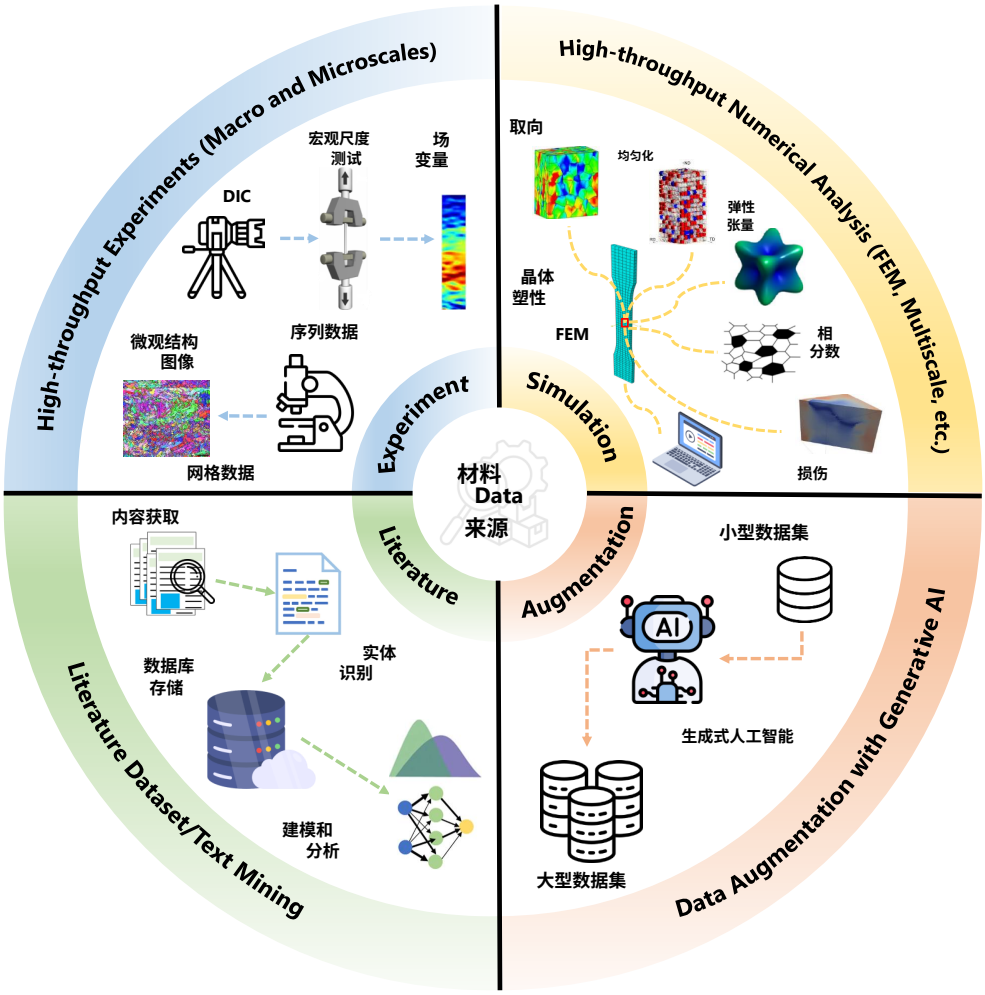


图 2： 展示材料科学中多种数据来源的示意图。

此类模型往往会变得非常复杂，需要在各种测试条件下进行大量实验并加以校准，因此在实践中的可行性较低。

鉴于非线性回归方法高度依赖具体案例，其泛化能力仅限于少数已知但易于使用的模型。有些方法仅纳入问题的场变量，例如应变；另一些则试图捕捉微观结构变化与宏观尺度行为之间的物理关系。对于涉及额外参数的复杂多物理场问题，这些模型往往会丧失准确度；而对于较简单的问题，它们仍适用于数值分析实现。由于根据应用、材料和问题条件的不同，存在许多非线性塑性关系，先前研究已对这些关系进行了详细讨论 [2, 69, 70, 93, 94]。

3.2. 支持向量机

作为一种监督算法，支持向量机既用于分类问题，也用于回归问题 [95, 96]。它主要用于分类问题，目标是在 N 维特征空间中找到最优超平面，以分隔数据点。然而，在用于回归问题时，支持向量机旨在拟合数据，同时尽可能保持函数的线性，以防止过拟合。这样得到的函数能使最多数量的数据点位于指定距离内，该距离记为 γ，在多个分隔超平面中代表最优选择。因此，支持向量机旨在找到使数据点与超平面之间距离最大的超平面

，这段距离称为间隔，如图 3a 所示。通过引入松弛变量 ξ_i 和 ξ_i^*，我们可以重新定义间隔，为元模型提供一定的灵活性。位于这些松弛变量之间且距离在 γ 以内的数据点会受到惩罚，但仍会影响函数的形状。线性问题的支持向量机方法可表示为

$$\begin{cases} \min\left(\frac{1}{2}\parallel \mathbf{w}\parallel^2 + C\sum_i(\xi_i + \xi_i^*)\right) \\ \qquad s.t. \\ y_i - wx_i - b \le \gamma + \xi_i \\ wx_i + b - y_i \le \gamma + \xi_i^* \end{cases} \tag{1}$$

其中$\mathbf{w}$ 是　　垂直于超平面的权重向量，b 是偏置，而C 是惩罚参数，用于控制函数平坦度与 对间隔之外偏差的容忍度之间的权衡 γ。

对于非线性数据，需要采用非线性决策边界。因此，支持向量机引入了核技巧 [97]，这是一种通过概括训练数据集中所有观测值对之间的关系来量化观测值相似度的函数。这种方法有效地避免了显式地将数据映射到更高维空间、寻找超平面并将其投影回低维空间的需求，而这些操作的计算成本会很高。支持向量机通常在小型数据集上表现良好，且训练数据中的离群值不会对其产生显著影响。然而，核的类型会极大地影响其性能，而且支持向量机需要大量记忆，可解释性较低 [37, 98]。

3.2.1. 基于支持向量机的屈服函数代理模型

SVM 的一种应用是在材料各向异性的广义三维和六维载荷工况下，充当弹塑性中的屈服函数（YF）[99, 102, 103]。SVM 不依赖显式的数学表达式，而是用于近似屈服轨迹（图 3b）。训练时，它以一组特征向量及其对应的结果向量作为输入；结果向量只有两个可能值，用于区分弹性和塑性状态。输入数据可以是低维数据（例如应力），也可以是通过晶体塑性建模获得的高维特征向量[103]。

该方法的局限在于，要准确估计屈服函数，需要大量位于屈服轨迹附近的训练数据点。因此，SVM 训练得到的支持向量仅位于训练数据覆盖的区域内。超出该区域后，决策函数往往会趋于零，从而导致弹性预测步骤出现误差。为了解决这一问题，需要在弹性区和塑性区更深处补充合成数据点。对于弹性区，可以将屈服轨迹附近原始数据点的主应力按比例缩小至较小值，以生成此类数据。对于塑性区，则可以将屈服轨迹附近的点线性缩放至较大值来生成数据。这两种方法均无需额外信息，例如应变值 [104]。

在各向异性塑性中描述屈服函数需要若干各向异性参数，这些参数通过实验测试确定。这些参数并未显式表示为晶体学织构的函数，因此在冷变形引起晶体学织构发生任何变化后，都需要修改 YF 参数。在 [105], 中，作者采用支持向量机来解决这一问题，该支持向量机提供了晶体学织构的显式表征。他们的方法将一般球谐函数取向分布函数的系数纳入支持向量机的特征空间。

SVM 在增强 YF 方面的另一种用途，是将基于数据的修正项引入现象学屈服模型中，以局部提高其精确度 [100]。该方法旨在对现象学定义的屈服面施加凸性约束，同时实现局部改进，如图 3b 所示。其他机器学习方法也可用于捕捉类似的效果和结果 [100]。通过采用带有动态停止准则的委员会查询方法对其进行优化，可以进一步增强基于支持向量机的屈服函数预测。这是一种主动学习方法，旨在处理合成生成、实验生成或二者结合生成的数据的选择问题。委员会查询策略作为支持向量机框架中的附加特征，用于引导训练数据的选择，重点选择模型委员会成员之间存在显著分歧的特征空间区域 [106]。

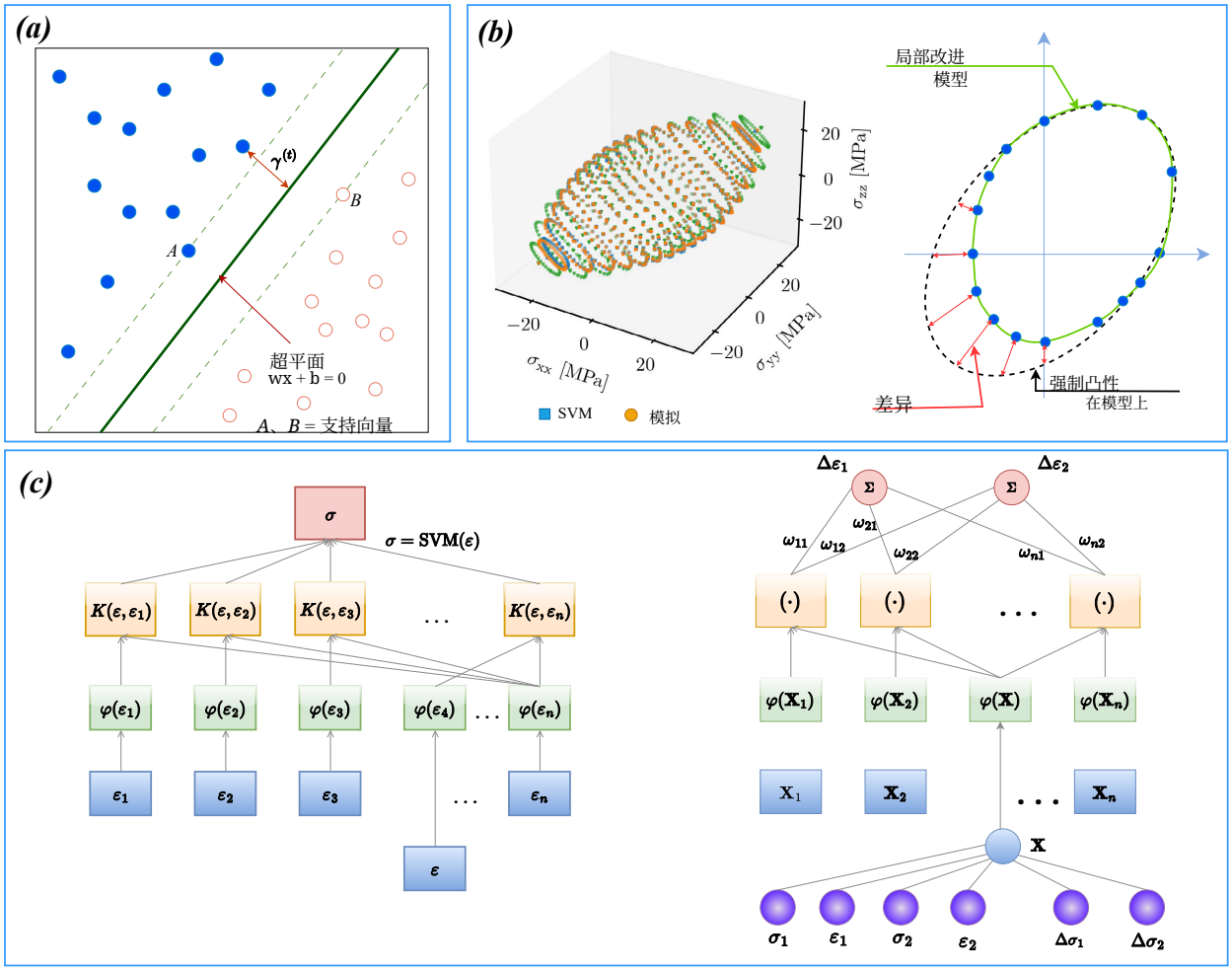


图3： (a) 支持向量机的示意图。(b)（左）金刚石在三维应力空间中的屈服面 [99]，（右）当唯象模型未能捕捉材料行为中固有的各向异性或非对称性时，唯象模型与实验观测之间可能会出现差异。在这种情况下，使用支持向量机组件对唯象框架进行局部细化，从而在测量数据点处准确重构参考屈服面 [100]。(c)（左）单输出支持向量机架构示意图，（右）用于亚塑性岩土材料的多输出支持向量机架构示意图 [101]。

3.2.2. 基于支持向量机的本构模型代理模型

CM 用于连接平衡定律与运动学方程。采用 SVM 替代塑性模型的基础，是建立应变（代表运动学）与应力（代表平衡）之间的黑箱关系，如图 3c 所示。通常，向 SVM 算法提供一组输入参数，以预测相应的应力响应。对于黏塑性材料，这些输入参数可能包括应变、应变率和应力 [107–109]，对于土体等亚塑性材料，甚至还可能包括应力率 [110, 111]。

对于单个输出（通常为传统塑性材料中的塑性流动应力），根据工艺条件或材料行为，可以向支持向量机提供若干输入参数 [112, 113]。例如，在温度起重要作用的热变形过程中，还会将温度作为输入，以考虑其影响 [107, 108]。对于应力增量取决于应变增量的岩土材料，可以纳入上一个时间步的数值以及输入参数的增量值 [110]。

多输出支持向量机 [114]也可用于正交各向异性甚至各向异性材料（如复合材料），这类材料在每个时间步都必须确定多个输出。例如，在亚塑性的双轴分析中

表1： 支持向量机在塑性领域的应用。

应用	材料	塑性模型	数据类型（尺寸）	输入	输出	参考文献
屈服函数预测	合金	各向异性塑性-ity	合成，1488	屈服应力	屈服应力	[102]
	合金	各向异性塑性-ity	合成，400	屈服应力	弹塑性分类	[104]
	合金	各向异性塑性-ity	合成，8000	晶体学纹理-ture	弹塑性分类	[105]
YF修正	合金	塑性	合成	屈服应力	屈服应力	[100]
CM预测	镍基超-合金	塑性	热压缩测试	应力、应变、回火-温度	应力	[112]
	316L 应变-锈钢	热黏塑性	热拉伸试验	应变，应变速率，温度	应力	[107]
	Zircaloy-4	热黏塑性	热压缩测试，380	应变，应变速率，温度	应力	[108]
	混凝土	亚塑性	单轴和双-轴测试	应力，应变，应力rate	应变率	[101]
	Rock	亚塑性	三轴压缩压缩测试，556	应变	应力	[110]
超参数优化	低合金钢	塑性	实验，914	材料元素和温度	抗拉强度	[116]

使用应力控制的基于支持向量回归的材料模型，将两个主应力及其对应的应力增量和应变值用于训练模型，使其能够预测每个时间步的两个应变增量 [101], 如 图 3c 所示。

使用支持向量机准确预测材料行为，很大程度上取决于核函数和惩罚参数等超参数的选择。为了确定最优值，可以结合支持向量机采用优化算法。最直接的方法是网格搜索法（GS） [115],，该方法将核参数和惩罚参数的搜索空间划分为若干个大小相等的网格。随后，使用每种可能的参数值组合训练支持向量机，并通过交叉验证评估其性能。还可以采用其他各种优化方法；例如，一些研究使用粒子群优化（PSO） [111], 灰狼优化（GWO） [116], 和遗传算法（GA） [117]。关于上述各种材料塑性中支持向量机应用的简要概述，表1总结了文献报道的最常见应用，并简要介绍了相关研究及其参考文献。该表可作为前文讨论要点的简明参考。

3.3. 基于决策树的方法

决策树（DT）是一种监督式机器学习算法，它依据由特征值导出的决策规则，逐步将训练数据集划分为更小的组，并持续这一过程，直到生成的子集具有足够的同质性，可以用特定标签表示 [118]。决策树采用自上而下的方法组织数据，旨在将相似的观测值分组并标记。它既可用于目标变量为连续值的回归问题，也可用于目标变量为类别值的分类问题。决策树从代表整个数据集的根节点开始，然后经过决策节点，根据特征条件划分数据，直至到达对应最终预测或结果的叶节点，如 图 4a 所示。

在决策节点处，每次划分都通过选择能够使所选误差或不纯度指标最小化的特征和阈值来确定。均方误差(MSE)通常用于回归任务，而基尼不纯度

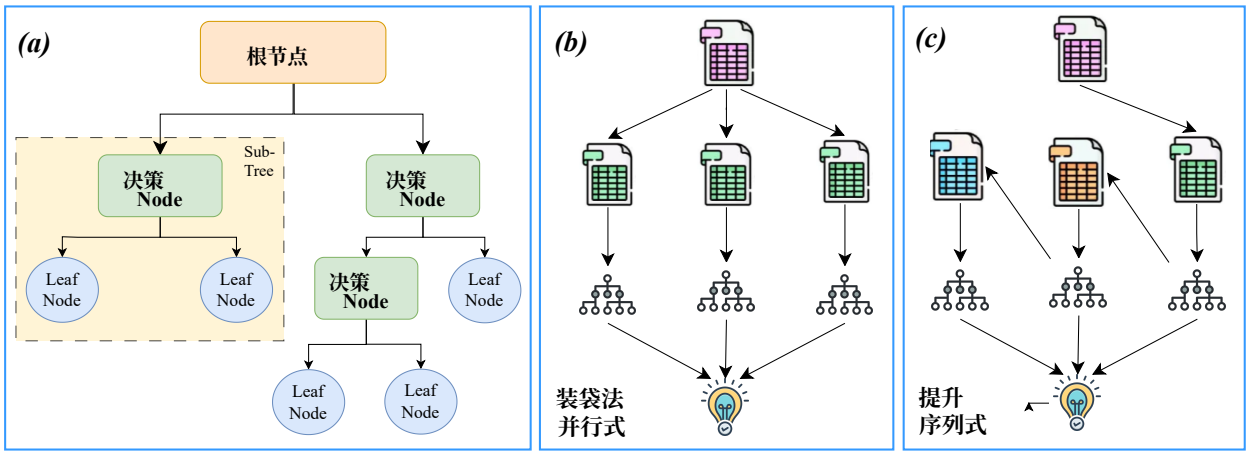


图 4: （a）典型 DT 架构及其术语、（b）作为并行式集成方法的装袋法架构，以及（c）作为序列式集成 DT 方法的提升架构的示意图。

或熵通常应用于分类问题。决策树算法中的渐进式划分过程会持续进行，直到满足停止条件；当进一步划分无法显著降低误差，或节点中的样本数量低于预定义阈值时，便可能停止。在回归树中，每个叶节点的输出通常是该节点所包含目标值的均值 [119]。此外，决策树还可分为单变量树和多变量树。在单变量树中，决策节点处的每次划分均基于单个特征；而在多变量树中，每次划分则通过同时考虑多个特征来确定。

为了提高 ML 中的预测性能，可以将多个模型结合起来，以产生更准确且更稳定的结果，这种策略称为集成学习。集成方法可以使用同质或异质学习器构建。在 DT 模型中，两种常见的集成方法是自助聚合（装袋法）和提升 [119]。装袋法旨在通过生成训练数据集的多个略有差异版本，并分别在每个版本上训练一个弱学习器，来降低模型的方差。随后，对于回归任务，通过对弱模型的输出取平均值，或对于分类任务，通过多数表决来获得最终预测，如图 4b 所示。在装袋法中，自助采样得到的树彼此独立地进行训练，因此该方法非常适合实现为并行学习算法。

随机森林算法（RF）是装袋法的一种扩展，旨在最大限度地降低集成中各棵树之间的相关性 [120]。RF 不会在每个分裂节点处评估整个特征空间，而是随机选取一部分特征进行考量。这一额外的随机性增强了模型的多样性，与标准装袋技术相比，通常能取得更好的性能。

与装袋法不同，提升方法采用序列式策略，每棵树都利用前一棵树的信息构建，如图 4c 所示。提升方法基于弱学习器构建多个模型，每个新模型都尝试利用前序模型的残差作为输入，纠正其所产生的误差。最知名的基于提升的决策树算法包括梯度提升机（GBM） [121] 和极端梯度提升（XGBoost） [122], , 二者在各种预测建模任务中均展现出强劲的性能和高效率。

3.3.1. 自助聚合（装袋法）

在基于决策树的模型中，大多数研究聚焦于本构模型预测，更具体地说，是预测塑性流动应力。为说明这一点，以下介绍典型决策树模型中流动应力的预测过程。该模型的输入空间由 Ti-6Al-4V合金热变形过程中的应变、应变率和温度的组合构成 [123]。算法从完整数据集开始，尝试找到最优特征和阈值，将数据划分为两个子集，使每个子集中的流动应力值更加均一。如图5a所示，模型首先评估温度变量，将数据按该特征的高值和低值进行划分。接下来要评估划分的质量，通常通过最小化每个子集中流动应力

值的均方误差来实现。对于将数据划分为左侧（L）和右侧（R）子集的划分 s，均方误差为

$$MSE_{split} = \frac{|L|}{N} MSE_L + \frac{|R|}{N} MSE_R \tag{2}$$

其中，L 和R 分别为左右子集中的样本数，N 为当前节点中的样本总数。MSE_L 定义为

$$\begin{cases} MSE_L = \frac{1}{n} \sum_i (\sigma_i - \hat{\sigma}_L)^2 \\ \hat{\sigma}_L = \frac{1}{n} \sum_i \sigma_i \end{cases} \tag{3}$$

其中，$\hat{\sigma}_L$ 为数据左子集的平均流动应力数值。右子集采用相同的定义。计算MSE_{split}后，算法选择数值最低的划分方式。随后，该过程递归重复，每个子集根据另一个特征再次进行划分，该特征可以是应变、应变率或温度。该过程持续进行，树也不断生长，直至满足停止条件。该条件可由最大树深度或每个叶节点的最小样本数定义。最后，当树停止生长后，每个叶节点代表（应变、应变率、温度）空间中的一个区域，而该区域的预测应力则为该叶节点所包含训练样本的均值。

典型的决策树（DT）方法直接从完整数据集中学习一组规则（划分），这通常会导致高方差和低偏置，意味着该方法容易过拟合并记忆训练数据。这一局限性可以通过随机森林（RF）算法加以解决。在随机森林中，会构建许多决策树，每棵树都略有不同。如图5b所示，该图展示了92W-5Co-3Ni合金在高应变率和高温条件下的情况 [124]，，森林中的每棵树都基于一个自助采样样本进行训练，该样本是从训练数据中有放回地随机抽取的子集。这确保了每棵树学习到略有不同的模式。在树内的每次划分中，算法不再考虑全部特征（如应变、应变率和温度），而只评估随机选取的特征子集，从而引入另一种随机性，增加决策树之间的多样性。独立训练所有决策树后，如图5b所示，总体预测结果通过对各棵树的流动应力预测值取均值得到。在文献中，采用RF作为计算材料学预测模型的研究主要聚焦于合金的热变形和高应变率分析，这些研究对应于热黏塑性行为 [124–130]。 表2提供了这些研究的其他信息。

用于随机森林算法预测流动应力的输入变量，也可以通过对多晶材料进行微观力学仿真而合成生成，而不必仅依赖实验测试 [131]。该过程首先利用由若干具有相应平均晶粒尺寸的晶粒组成的代表性体积元（RVE）对微观结构进行建模。单个晶粒的各向异性行为通常采用晶体塑性模型来定义。随后在数值模拟中对这些模型施加各种机械载荷，并通过均匀化获得宏观行为 [131]。根据晶体塑性模型的不同，可以提取多种特征作为输入数据，例如弹性应变和塑性应变、应变率，用于塑性应力预测 [132]，甚至可以提取损伤参数用于损伤预测。

此外，随机森林也可用于唯象晶体塑性框架中连续介质力学参数的识别[133]。对于相应的晶体塑性模型，有三个可调参数采用随机森林方法进行预测。为生成训练数据集，在面心立方（FCC）金属的仿真中采用这些可调参数的特定范围。将这些范围与指定间隔相结合，即可生成用于仿真的数据集。随后，利用所得应力-应变曲线及其对应的材料参数来训练机器学习算法（如随机森林），以便根据所提供的应力-应变曲线预测这三个参数。作者声称，在铜（Cu）上训练的模型也可用于预测其他面心立方金属的连续介质力学参数，例如AISI 316L不锈钢、CrMnFeCoNi高熵合金和镍 [133]。

3.3.2. 提升

作为随机森林方法的一种替代方案， [134] 中的作者采用轻量级梯度提升方法（LightGBM），以预测30MnB5V钢在不同应变率下热变形过程中的流动应力。与其他提升算法一样，LightGBM以序列式方式工作，通过学习先前各树的误差（残差）逐步改进模型。然而，LightGBM采用损失函数的二阶（泰勒）近似以提高准确度。它还纳入正则化项以防止过拟合。该模型的输入变量

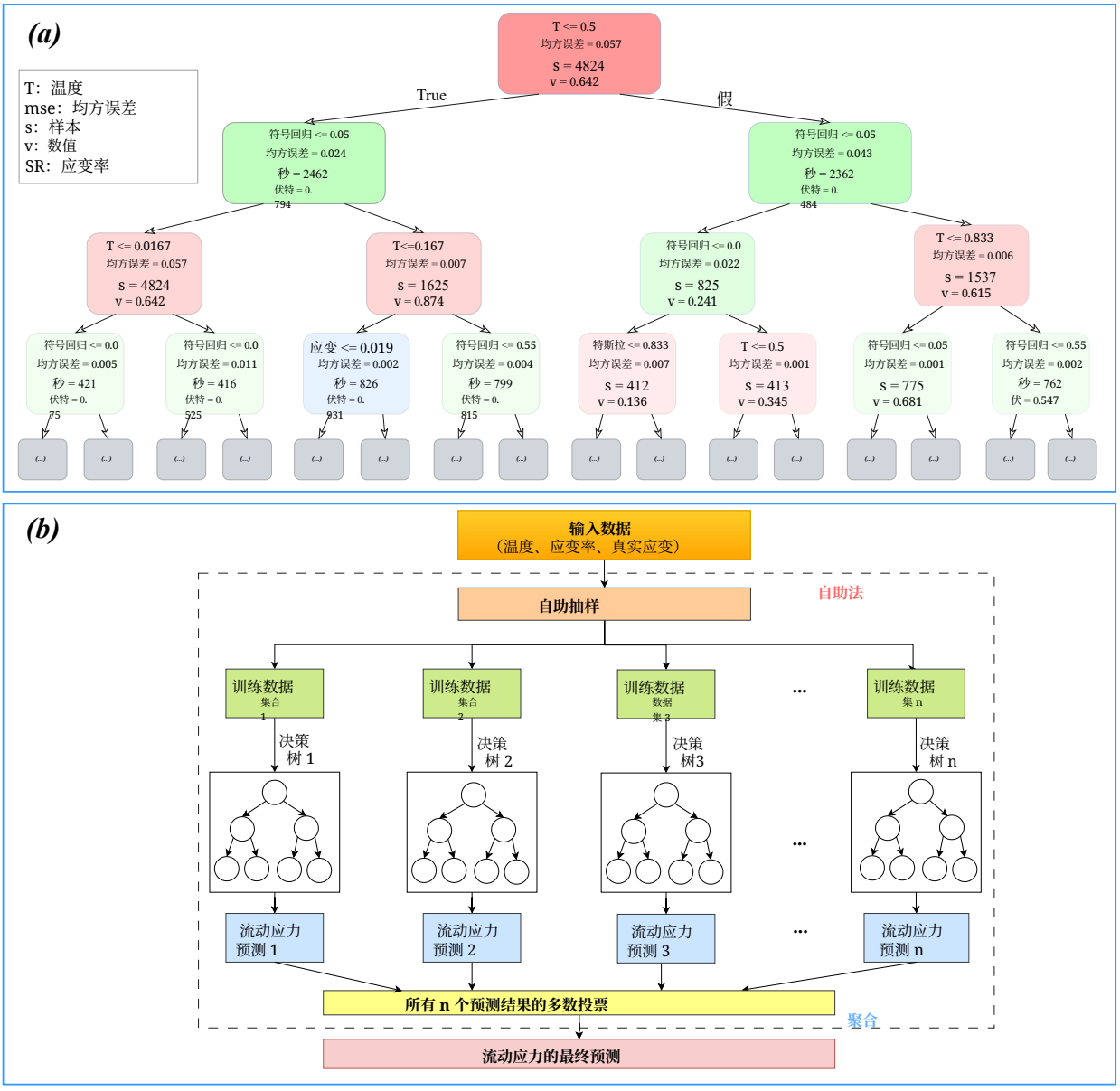


图5： (a) 以温度、应变和应变率为输入的典型决策树模型示意图 [123]。（b）具有三个输入的随机森林模型示意图，其输出表示各棵树结果的聚合 [124]。

为应变、应变率和温度，输出则为预测的流动应力。此外，可采用优化算法来调节LightGBM的超参数。在 [134], 中，作者为此目的使用贝叶斯优化算法。一项类似研究采用XGBoost，以温度、应变和合金元素含量作为输入，并基于文献中这些合金的全部可用数据 [135]，预测钽钨合金的流动应力。其他提升算法，如AdaBoost [136]，被用于金属材料弹塑性行为的流动应力预测 [137, 138]。

3.4. 用于模型发现的符号回归（*SR*）

可解释机器学习中的模型发现方法旨在识别人类能够理解的模型表示形式，例如塑性模型的数学表达式。在最常用的方法中，

表2：基于决策树的方法在本构模型预测中的应用。

方法	材料	塑性模型	数据类型（尺寸）	输入	输出	参考文献
DT	Ti-6Al-4V	热黏塑性	Hot 压缩测试	应变，应变速率，温度	应力	[123]
装袋法（随机森林）	304不锈钢钢	热黏塑性	热拉伸试验，360	应变，应变速率，温度	应力	[125]
	多孔钛	热黏塑性	SHPB试验	应变，应变速率，温度	应力	[126]
	92W-5Co-3Ni合-loy	热黏塑性	SHPB试验	应变，应变速率，温度	应力	[124]
	304L不锈钢	热黏塑性	Hot 压缩测试，1885年	应变，应变速率，温度	应力	[127]
提升	30MnB5V钢	热黏塑性	Hot 压缩测试	应力、应变、温度性质	应力	[134]
	钽钨合金	热黏塑性	文献数据	应变率，温度-度、合金元素含量	应力	[135]

符号回归（SR）是用于此目的的方法之一，它是一种回归分析，能够发现最恰当地描述输入变量与输出变量之间关系的数学表达式。

在传统的线性或非线性回归模型中，模型的函数形式预先固定，目标是确定该预定义结构的最优参数。相比之下，符号回归（SR）直接从数据中同时搜索方程的函数形式及其参数。因此，符号回归能够生成闭式、可解释的方程，揭示输入—输出关系中的潜在模式 [139, 140]。

符号回归流程将候选解表示为由变量、常数和数学运算符构成的表达式，包括加法、减法、乘法、除法，以及正弦和余弦等函数。根据适应度度量（通常基于预测误差）对这些表达式在数据上的表现进行评估。通过迭代过程，不断生成并改进表现更好的表达式，直至在准确度和简洁性之间实现令人满意的权衡。

文献 [141]，展示了符号回归在塑性领域的早期应用之一：针对铜在较大温度和应变率范围内的情况，研究推导出了可用于采用 J2径向返回映射算法和隐式时间积分方案的商用有限元代码的显式表达式。这类应用属于纯数据驱动模型，通过方程将应力表示为应变的函数，而不包含其他状态变量。另一方面，也可以将温度和应变率等状态变量纳入符号回归流程，如文献 [142] 所示。将变形参数与符号回归相结合，旨在捕捉标定系数的依赖关系，从而实现对实验观测范围之外的外推。

符号回归也可用于有限元框架内的屈服函数预测。例如， [143] 中的研究结合均质化有限元响应与符号回归，识别多孔材料中的屈服函数。类似地， [144], 中的作者利用符号回归复现了经典屈服准则，例如冯·米塞斯、德鲁克–普拉格、特雷斯卡、莫尔–库仑以及抛物面屈服函数。他们通过引入第一应力不变量来保留物理特征，例如冯·米塞斯型偏应力依赖性和压力敏感性，这与德鲁克–普拉格公式类似。对于循环塑性， [145] 中的研究提出了循环域塑性模型，利用符号回归学习塑性应变逐循环的演化，这与基于机器学习的时域方法不同。

执行符号回归的一种广泛使用的技术是遗传编程，其中数学表达式被编码为树结构，并依据受生物进化启发的原理（如选择、交叉和变异）进行演化 [146]。根据适应度准则，表现更优的表达式更有可能被重组，从而随时间得到越来越准确的模型。遗传编程通过高效搜索可能的符号模型空间，为符号回归提供了一个有效的框架 [147]。

遗传编程被应用于 [148] 并结合符号回归，使用一个通过内部状态变量（例如位错密度）描述材料流动、且包含依赖于温度和应变率等加工条件的校准参数的基础模型。作者提出了一种隐式方法，其中符号回归直接在基于物理的模型内部演化附加项或函数依赖关系。同样， [149]采用遗传编程来系统探索超参数，并从实验应力–应变数据中识别最优的数据驱动模型。最近，研究 [150] 开发了一种算法，用于从含噪数据集中推导可解释的隐式屈服面模型，整合序贯蒙特卡罗方法以在噪声条件下计算模型似然，以及基于隐式遗传编程的符号回归指标，以确保满足 Prager 一致性条件的物理有效解。

此外，除了符号回归之外，还可以通过无监督框架进行模型发现。例如，[151] 提出了 EUCLID（高效无监督本构定律识别与发现），它无需对材料模型或应力测量作出先验假设，即可发现可解释模型。EUCLID 利用无标签实验数据，例如单次测试中的全场位移和全局反作用力，并引入基于物理的约束来指导发现。该方法构建候选材料模型库，并自动选择最相关的特征，以描述不断演变的塑性屈服面。随后，[152] 将 EUCLID 扩展至可处理本构类别未知的材料。通过运用广义标准材料理论，该方法能够识别热力学势，例如耗散势和亥姆霍兹自由能，从而完整定义材料行为，包括弹性、黏性、塑性及其组合。EUCLID 的最新扩展见于 [153], , 该方法针对具有任意形状凸屈服面和非关联流动法则的压力敏感塑性模型。

3.5. 总结

如本节所述，在有带标签数值数据可用的情况下，通常会采用机器学习方法作为塑性流动应力和屈服函数的代理模型。根据塑性模型的不同，这些带标签数据可以是单输入单输出，例如经典塑性中以应变为输入、应力为输出；也可以是多输入单输出，例如热黏塑性中以应变、应变率和温度为输入、应力为输出。然而，这些机器学习模型固有的结构使其无法处理网格状数据，例如微观结构图像分析所涉及的数据。

在讨论的方法中，线性变换和多项式回归仍是用于拟合应力–应变曲线的传统且广泛使用的技术，能够以直接明了的方式描述材料行为。支持向量机通过构建具有最大间隔的最优超平面，并利用核捕捉非线性行为；在塑性领域，它们用于近似屈服函数、建模应力–应变关系，并改进唯象本构定律，尤其适用于各向异性材料。其性能很大程度上取决于核的选择、超参数优化，以及关键区域（如屈服面）附近训练数据的可用性。决策树依据基于特征的规则递归划分数据，以执行回归或分类。虽然单棵决策树简单且易于解释，但往往会过拟合；装袋法和提升等集成方法可以缓解这一问题。在塑性领域，基于决策树的方法主要用于预测流动应力和识别本构参数。作为一种可解释方法，符号回归能够直接从数据中识别闭式数学表达式，同时学习模型结构和参数。在塑性领域，符号回归已用于推导本构定律和屈服函数，且通常能够再现或扩展经典屈服准则。遗传编程是符号回归中应用最广泛的技术，可高效探索符号模型空间，并实现物理集成混合形式。

4. 深度学习方法

作为机器学习（ML）的一个子集，深度学习（DL）由旨在学习数据复杂分层表征的多层神经网络组成 [154]。DL 通过其分层架构自动从数据中提取特征，从而能够捕捉材料行为中固有的高度非线性关系。这一能力对于高维数据尤其有用，例如历史相关应力–应变值等序列数据，或微观结构图像等基于网格的数据。如图6所示，本节将综述一些已应用于材料塑性和微观结构表征的 DL 模型。这里，我们重点讨论 DL 中的频率学派方法，这些方法将数据（如状态变量和微观结构信息）与材料响应及塑性变形行为联系起来。

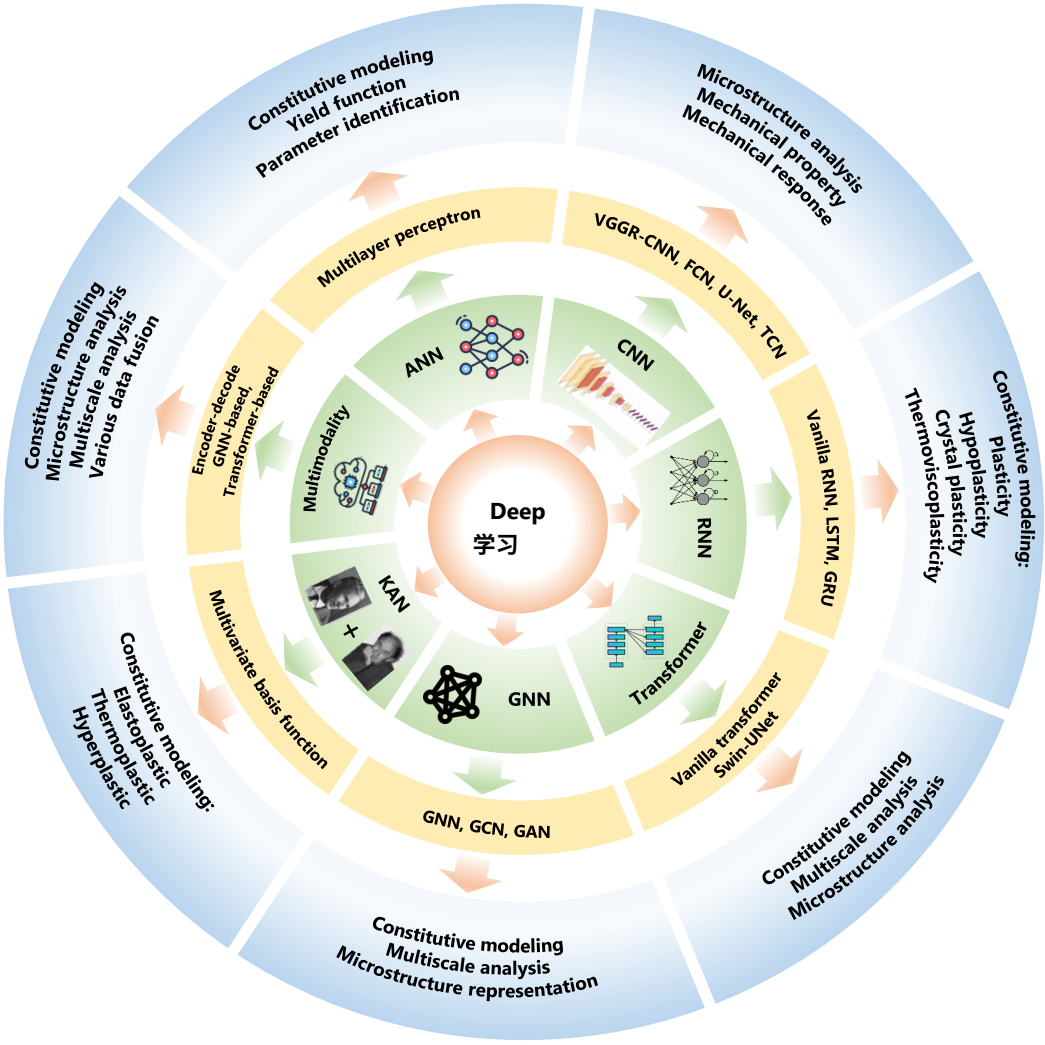


图6： 一个总体框架，展示了各种深度学习方法及其在塑性中的应用。

我们首先介绍作为深度学习方法基本支柱的神经网络，然后探讨近年来在文献中提出并应用的更先进模型。

4.1. 人工神经网络

人工神经网络（ANN），也称为多层感知机（MLP），是一种简单但应用广泛的机器学习算法，可用于回归和分类问题 [155]。ANN 是一种前馈网络，在深度学习框架中由若干层组成。每一层都包含节点（也称为神经元或感知机），它们充当网络的信息处理单元。单个节点的结构如图 7a 所示。每个输入都与相应的权重相乘，与偏置项相加，然后通过激活函数引入非线性。所得输出随后作为输入传递给下一个节点。数学上，单个节点可描述为

$$a = \phi\left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b\right) \tag{4}$$

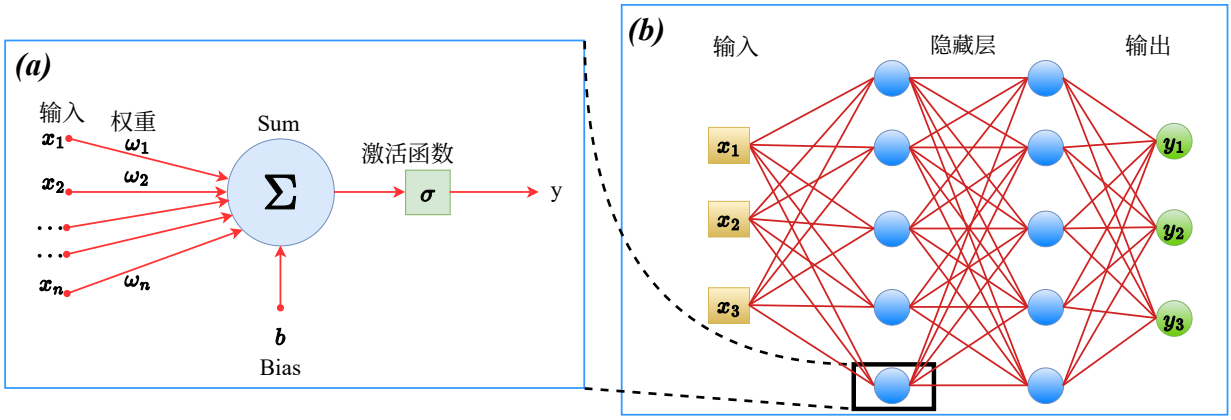


图 7： (a) 节点的示意图，展示了输入、权重、偏置和激活函数。(b) 人工神经网络示意图，包含三个输入、两个隐藏层（每层由若干节点组成）和三个输出。

其中，x_i 表示输入特征，w_i 表示其对应的权重，b 是偏置项，$\phi(\cdot)$是激活函数，可以是 ReLU、Sigmoid、双曲正切函数或其他非线性函数。

图 7b 展示了人工神经网络的示意图，该网络包含两层，每层由多个节点组成。输入层是第一层，其节点数量与模型的输入特征数量相同。该层中的每个节点只向下一层的节点传递信息，不与本层中的节点交互。输入层和输出层之间的层称为隐藏层。隐藏层的数量以及每个隐藏层中的节点数量可以调整，以优化网络的性能；这些称为模型超参数。输出层根据通过所有先前层传播的信息生成最终预测。对于具有 L 层的整个网络，前向传播方程为

$$\begin{cases} z^{[l]} = W^{[l]} a^{[l-1]} + b^{[l]} \\ a^{[l]} = \phi^{[l]}(z^{[l]}) \end{cases} \tag{5}$$

其中，$W^{[l]}$ 是连接第 $l-1$ 层与第l层的权重矩阵，$b^{[l]}$ 是第l层的偏置向量，$\phi^{[l]}(\cdot)$ 是第l层的激活函数，而$a^{[l]}$ 表示第l层的输出。预测值（最终输出）为

$$\hat{y} = a^{[L]} \tag{6}$$

人工神经网络的训练过程通过反向传播方法 [156] 调整权重，以获得从输入到输出的适当映射函数。这是一个迭代过程，在每一步中都会评估并修改每个权重的数值，通过增加或减少权重来最小化预测误差准则。反向传播是一种适用于复杂问题的强大方法；然而，在高维情形下，其结果难以解释。

4.1.1. 基于人工神经网络的*YF*代理模型

人工神经网络充当黑箱函数，将输入与输出关联起来。其中一个输出可以是各向异性屈服函数的参数，并可纳入应力等多种输入。在 [157], 中，作者将晶体学织构作为输入，将屈服函数的材料参数作为输出，从而建立描述二者对屈服函数影响的关系。这样，冶金过程中动态织构演化便可纳入屈服函数预测并加以考虑。作为人工神经网络输入的晶体学织构，有望在基于一般加载条件和晶体学织构的数据库支持下，取代屈服函数并预测平面应力宏观屈服 [158]。使用人工神经网络预测屈服函数的一个缺点是难以确保凸性。在 [158], 中，作者通过采用部分输入凸人工神经网络有效地解决了这一问题。

不可逆塑性变形和损伤是使用人工神经网络替代本构模型时面临的另一项挑战；然而，人工神经网络的贡献不容忽视。为提高基于人工神经网络的预测的鲁棒性，[159], 文中提出了一种混合方法，分别使用不同的人工神经网络来处理屈服函数、流动法则和损伤模型。采用模块化的人工神经网络，而非用单个人工神经网络替代本构模型，可确保正确表征不可逆行为和损伤现象。该模块化实现所需的数据集由单调加载条件下泡沫材料的代表性体积单元模拟生成。这种多尺度人工神经网络方法能够有效预测泡沫结构的塑性行为，并结合损伤的各向异性演化和塑性流动。该方法近期在[160], 中，作者提出了一种所谓的谱神经网络，作为一种新方法，可针对给定各向异性材料的任意变化自动生成合理的屈服函数。该方法仅需少量数据点（最多八个）即可实现这一目标。它依托解析屈服函数生成大型训练数据集。作者使用六方最密堆积（HCP）材料（包括钛）验证了这一新方法的能力。

4.1.2. 基于人工神经网络的本构模型参数识别

现象学本构模型乃至基于物理的本构模型都是包含常数参数、某些情况下还包含变量参数的数学表征，这些参数需要确定，以实现适当的材料表征。通常通过迭代试错来优化这些参数，但这高度依赖用户的技能和知识；也可以将优化过程与数值计算程序结合起来，但计算成本较高。人工神经网络能够改进塑性模型的参数识别过程。[161], 中介绍了一个实例：研究人员开发了一种人工神经网络，利用实验弯曲测试获得的力-位移数据识别材料模型参数。输入为力和位移数据对，输出为Swift塑性模型的参数 [162]。结合遗传算法等优化算法，能够进一步改进人工神经网络的参数识别过程 [163]。人工神经网络还应用于塑性 [163, 164] 和黏塑性 [165] 材料的参数识别，其中采用遗传算法等优化算法，从人工神经网络针对指定模型参数生成的大量输出中寻找最优解。

4.1.3. 用于塑性的人工神经网络

在单调塑性中，要用人工神经网络替代模型，最简单的结构是将输入设为应变张量的分量（二维情况下为三个值），输出则给出应力分量（二维情况下为三个值）[166]。在处理本构模型行为无法通过数学方程简单描述的材料时，这一过程展现出其优势，例如各向异性材料、复合材料或多孔材料；对于这些材料，整体材料表征需要进行代表性体积单元分析，正如 [167]中所研究的那样。将人工神经网络用于多孔结构或复合结构的过程可通过多种形式实现，例如屈服函数预测 [167]。

循环塑性依靠背应力和拖曳应力的概念来解释循环加载和卸载过程中屈服函数的演化。这些术语分别源于塑性中的随动硬化和各向同性硬化分量。背应力表示屈服面在应力空间中的平移 [2], , 体现塑性的方向性效应，这对于发生应力反向的循环加载十分重要。拖曳应力表示屈服面的尺寸变化（即其在应力空间中的半径），用于描述各向同性硬化或软化，并反映整体屈服应力如何随塑性应变累积而增加或降低。在这些概念的基础上，[168], 作者定义了两个独立的人工神经网络，分别用于预测背应力和拖曳应力；每个网络均使用六个输入变量和一个输出变量。背应力人工神经网络以当前状态和前两个状态的背应力与塑性应变作为输入，输出则为背应力增量。拖曳应力人工神经网络采用类似的结构。两个人工神经网络均包含一个具有14个节点的隐藏层。为进一步提高循环塑性中的材料预测性能，可将返回映射算法替换为人工神经网络，并将其作为针对特定硬化模型所开发的隐式应力积分方案的一部分 [169]。如图8a所示，人工神经网络的输入是Chaboche模型的随动硬化规律和各向同性硬化规律的参数 [170], , 输出则是返回映射算法中使用的塑性修正项。所提出的人工神经网络模型被嵌入返回映射算法的塑性修正器中，如图8a所示；图中还给出了随机循环加载下得到的应力–应变曲线，展示了所提模型的精确度和能力。

人工神经网络在塑性领域的应用形式多种多样。随着人工神经网络在材料建模与表征中的应用日益广泛，研究人员提出了不同的方法来提升其性能。为 [171],完全取代本构模型，研究人员开发了两种不同的人工神经网络，一种用于超弹性，另一种用于塑性。

作者将应变–应力映射拆分为彼此独立的应变–系数映射，因此，人工神经网络不再输出多维应力序列，而是生成彼此独立的一维系数序列。这种方法采用多个人工神经网络，降低了训练的计算成本并提升了性能。近期，相关研究的作者 [172–174] 开发了用于研究J2塑性模型的人工神经网络框架和算法，结果表明，无需明确定义屈服函数、流动法则或硬化定律，也无需改变输入的表示坐标，人工神经网络即可描述冯·米塞斯材料的应力–应变响应 [175]。这种方法可集成到有限元法框架中，从而能够利用全场数据（如位移场）以及从样本获得的实验数据（如力–位移曲线）进行学习[176]。

4.1.4. 用于黏塑性、热黏塑性和亚塑性的人工神经网络

黏塑性是指所谓的率相关材料，其等效塑性应力不仅取决于应变，还取决于应变率 [177]。因此，针对黏塑性材料开发的人工神经网络会将应变率变量纳入模型。为此，研究 [178] 将塑性应变、内变量和应力作为人工神经网络的输入，并将内变量速率和应变速率作为输出。另一种方法是直接将当前和前一时间步的应变、应变率、应力和应力率作为输入。这些数据通常来自问题的数值分析 [179]。

考虑热效应及其对材料行为的影响，可建立热黏塑性模型。许多将人工神经网络应用于热黏塑性材料建模的研究，采用应变、应变率和温度作为输入变量，并以应力作为网络的输出 [180–188]。为捕捉材料行为对温度和应变率的依赖性，通常在温控环境中进行动态试验，以获得不同应变率和温度下的应力–应变曲线。随后将这些数据输入人工神经网络，以建立应力预测模型。这是热黏塑性材料建模中常用的方法[189–193]。在一项相关研究中 [194], , 作者开发了两个人工神经网络，一个用于模拟应变硬化行为，如图 8b 所示；另一个用于预测预定义各向异性屈服函数的参数。用于构建这些模型的数据来自沿三个取向进行的单轴拉伸试验，以及在不同温度和应变率下进行的面内双轴拉伸试验。如图 8b 所示，该模型在预测工业纯钛合金的各向异性塑性变形方面表现出很高的准确度，其中展示了沿轴向和横向的应变预测。近来，已有多项研究采用径向基函数人工神经网络作为代理模型，研究热变形过程 [195]。基于径向基函数的人工神经网络是一种在隐藏层中使用径向基函数（通常为高斯函数）作为激活函数的网络。它通过衡量输入与特定中心点之间的接近程度，能够捕捉数据中的局部非线性关系 [196]。在 [197], 中，作者使用温成形过程的测试数据，训练基于径向基函数的人工神经网络，以进行有限元法中的应力积分和切线模量计算。在一项类似研究中，研究者使用径向基函数人工神经网络预测热变形行为，并将其与阿伦尼乌斯唯象模型进行比较。作者报告称，与阿伦尼乌斯模型相比，径向基函数人工神经网络具有更好的预测能力和性能，尤其是在高应变率下。

在最早将人工神经网络应用于亚塑性材料，尤其是地质材料的研究之一中，作者提出了直接基于实验测试结果进行训练的嵌套自适应神经网络 [198]。所提出的嵌套网络架构利用实验测试数据的层次结构，并将其纳入人工神经网络设计中。其核心思想是训练一个基础模块，以表示数据结构中最低功能层级上材料的行为。该基础模型采用自适应方式训练，使节点数量能够在训练过程中增加。

基础模型以当前步的应力、应变和应变率作为输入，输出则表示该步的应力增量。在自适应训练过程中，会引入一个额外的历史点模块，将前几个步骤的应力和应变作为输入。添加历史模块的过程可以递归进行，使网络逐步捕捉更多材料的加载历史。因此，该方法纳入了依赖行为的某些方面，适用于历史相关材料的建模。不过，它仍局限于相对近期的历史，而且每新增一个模块都需要额外训练。

后续研究 采用类似方法开发用于地质材料的亚塑性预测模型 [199–201]。在相比之下，stu dy [202] 利用文献中报告的砂土固结排水压缩试验结果，

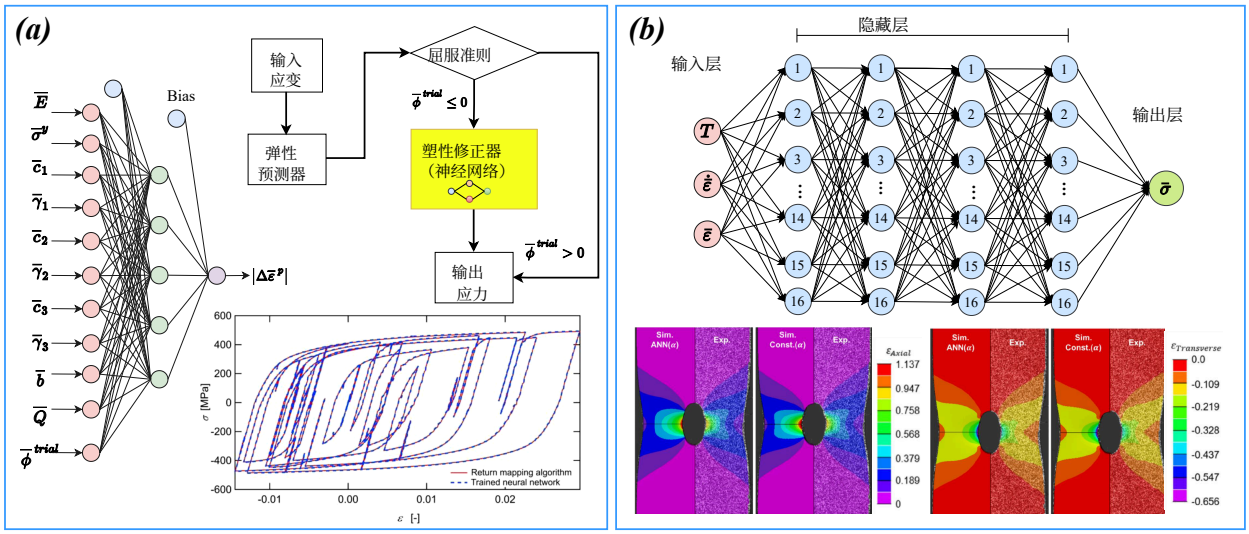


图 8： (a) 人工神经网络用于塑性修正器预测，其输入为运动硬化模型和各向同性硬化模型的参数。所提出的人工神经网络嵌入返回映射算法中以修正屈服函数，预测得到的循环塑性结果与所提出的模型相比具有较高的准确性 [169]。(b) 将人工神经网络应用于热黏塑性，输入包括应变、应变率和温度，输出为应力。预测得到的轴向和横向塑性应变分布与实验应变分布结果吻合良好 [194]。

引入人工神经网络模型，并采用若干输入变量（如矿物硬度、孔隙比、形状因子、应变和应力）来预测当前加载步的应变和应力。

最近，为了模拟土体的复杂行为，研究人员提出了一种多保真度人工神经网络，由一个低保真度网络和两个高保真度网络组成 [203]。低保真度网络纳入了由简化唯象本构模型生成的大量合成数据集，而高保真度网络则从实验数据集中学习。这些高保真度人工神经网络旨在捕捉两个数据集之间的线性和非线性相关性。该模型已成功应用于各向异性固结黏土及其他地质材料。

4.1.5. 用于晶体塑性的人工神经网络（*CP*）

将人工神经网络用作晶体塑性代理模型，需要纳入与材料晶体学结构相关的数据，以预测宏观行为（如力学响应）和微观结构演化。提供给人工神经网络的数据是数值型数据，因此需要能够描述材料微观结构的定量变量。因此，定量微观力学表征至关重要；可以采用数值方法和实验技术进行微观结构表征，以获取所需的输入数据 [204]。

为了将微观力学纳入多晶材料塑性行为的研究，一种方法是采用晶体塑性有限元法（CPFEM），如 [205], 所开展的研究，其中将CPFEM结果与实验单轴拉伸和剪切试验进行验证。随后，通过单晶模拟生成基于CPFEM的模拟结果，为人工神经网络提供输入数据。人工神经网络的输入包括应变和一组表示材料初始微观结构的欧拉角。人工神经网络模型的输出为应力以及演化后微观结构的欧拉角，如图9a所示。所提出的人工神经网络框架纳入了来自微观尺度的织构数据和来自宏观尺度分析的AA6063-T6应力-应变行为，有效地将两个尺度整合到人工神经网络中，以预测两个层级的响应。如图9a所示，人工神经网络对应力–应变行为和织构演化的预测均与通过CPFEM模拟获得的结果吻合良好。

将针对特定数据集训练的人工神经网络应用于不同于其训练数据的条件，是一项重大挑战。在塑性问题中，材料行为会随加载条件和应变路径而变化，因此塑性是一种路径相关现象，模型的泛化能力至关重要。为解决这一问题， [206],作者提出了一种人工神经网络集成（见图 9b），该集成基于面心立方材料单调加载条件下经验证的晶体塑性有限元模拟所生成的数据集进行训练。其目标是开发一种同时基于应力–应变

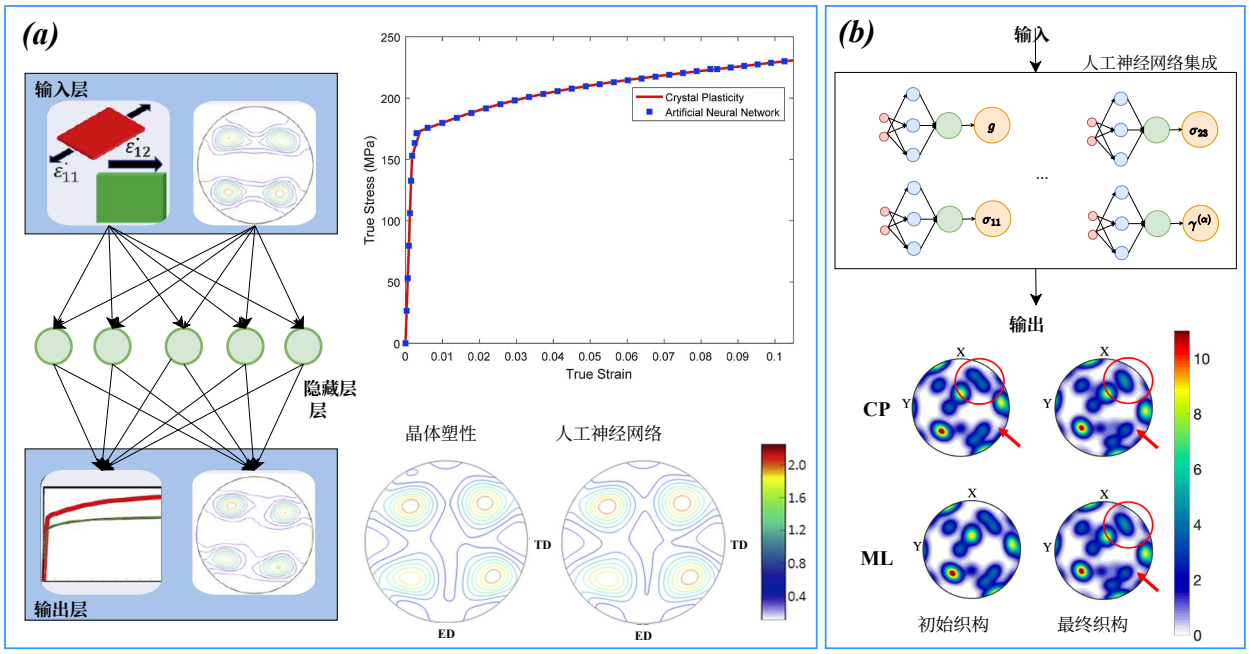


图 9： 人工神经网络在晶体塑性中的应用，其中所提出的模型将通过晶体塑性有限元法模拟获得的织构数据中的两个应变分量和欧拉角作为输入，并将应力张量和演化后的欧拉角作为输出，从而生成多尺度预测模型。预测的宏观应力和织构的微观演化展现了该模型的鲁棒性 [205]。（b）提出了一种人工神经网络集成，以增强预测能力，使用来自宏观尺度的应力–应变数据和来自材料微观结构的织构数据。与晶体塑性有限元模拟结果相比，该模型展现出准确的织构预测能力 [206]。

数据和织构演化数据的模型，以预测单调加载工况下的应力–应变响应和织构演化，并将其推广至任意非单调加载路径。如图 9b 所示，结果证明了该模型的准确度，以及其应用于复杂应变路径的可行性，且无需进一步重新训练。

近期的研究进一步探索了多尺度数据在基于人工神经网络的材料建模中的其他应用方向 [207, 208]。例如，在 [209], 中，作者提出将温度等实验条件纳入人工神经网络模型，并使用晶体塑性模拟数据作为输入来预测应力-应变。他们研究了多种机器学习方法，发现由于训练数据集较小且数据结构特殊，基于决策树的模型比人工神经网络模型预测效果更好。

晶体塑性生成的仿真数据也被用于训练人工神经网络，以预测多晶材料中的各向异性屈服函数。在 [210], 中，输入数据由铝合金仿真生成的、位于弹性区偏移0.2% 处的随机应力状态构成。所开发的模型能够准确描述屈服轨迹，即使其形状复杂也不例外，从而消除了晶体塑性屈服函数公式中通常所需的大量参数识别。为实现人工神经网络架构设计的自动化，作者进一步采用了贝叶斯优化方法。 表 3 总结了基于人工神经网络的材料塑性主要应用，并提供简要说明和参考文献，以便快速查阅。

4.2. 卷积神经网络（*CNN*）

卷积神经网络（CNN）是一种深度学习模型，旨在处理和分析具有空间结构或网格状结构的数据，例如图像。其核心思想是从数据中自动提取重要特征；对于图像，这一过程通过卷积层实现：卷积层将滤波器（卷积核）滑过输入，以检测边、织构和形状等特征。随着网络加深，这些卷积核会学习越来越复杂、抽象的模式，使网络能够从低层数据中解读高层信息。典型的卷积神经网络由若干关键组件构成，包括用于特征提取的卷积层、用于引入非线性的激活函数、用于降低空间维度和计算复杂度的池化层，以及全连接

表 3： 人工神经网络在塑性中的应用。

塑性模型	应用	材料	数据类型（尺寸）	输入	输出	参考文献
塑性	CM代理模型	合金	合成，338182	应力硬化数值	应力	[172]
	CM代理模型	合金	合成，200000	应力硬化数值	应力	[173]
	屈服函数、流动法则，演化律	合金	合成	应力-应变来自RVE	应力、损伤	[159]
	屈服函数参数识别	AA5052-H32	合成	应力、应变	应力	[164]
黏塑性	YF参数识别	合金	合成	应变率，硬化和 Lode 变量	硬化参数	[177]
热黏塑性	屈服函数参数识别	钛	单轴和双轴拉伸测试	应力、应变，温度	YF 参数	[194]
	CM代理模型	5182-O 铝合金	狗骨形拉伸测试	应变、应变率，温度	应力	[189]
	CM代理模型	铝 DP780 钢	单轴拉伸测试	应变、应变率，温度和应变时效	硬化响应	[190]
亚塑性	CM代理模型	Soil	合成和实验	应变、应力，各向异性参数	应力	[177]
晶体塑性	CM代理模型	AA6063-T6	简单剪切和拉伸	应力、应变、织构 data	应力-应变曲线和织构演化	[205]
	CM代理模型	面心立方材料	拉伸，压缩，剪切试验	应力、应变、织构 data	应力-应变曲线和织构演化	[206]
	CM代理模型	面心立方材料	拉伸，压缩，剪切试验	应力、应变、织构 data	应力-应变曲线以及织构演化	[206]

层，用于执行分类或回归任务，如图10a所示。这种层次结构使卷积神经网络能够逐步构建丰富的数据内部表征，使其在各种应用中非常高效且得到广泛应用 [211]。

接下来，我们将讨论卷积神经网络在材料塑性变形研究中的应用。卷积神经网络主要用于从基于图像的数据中提取特征；在本构建模中，这类数据通常源自微观结构表征，例如晶体学实现。因此，本节将根据卷积神经网络在这一上下文中发挥的典型作用来组织。文献表明，卷积神经网络的应用通常分为三类：微观结构实现与表征、材料性能预测以及力学响应预测。

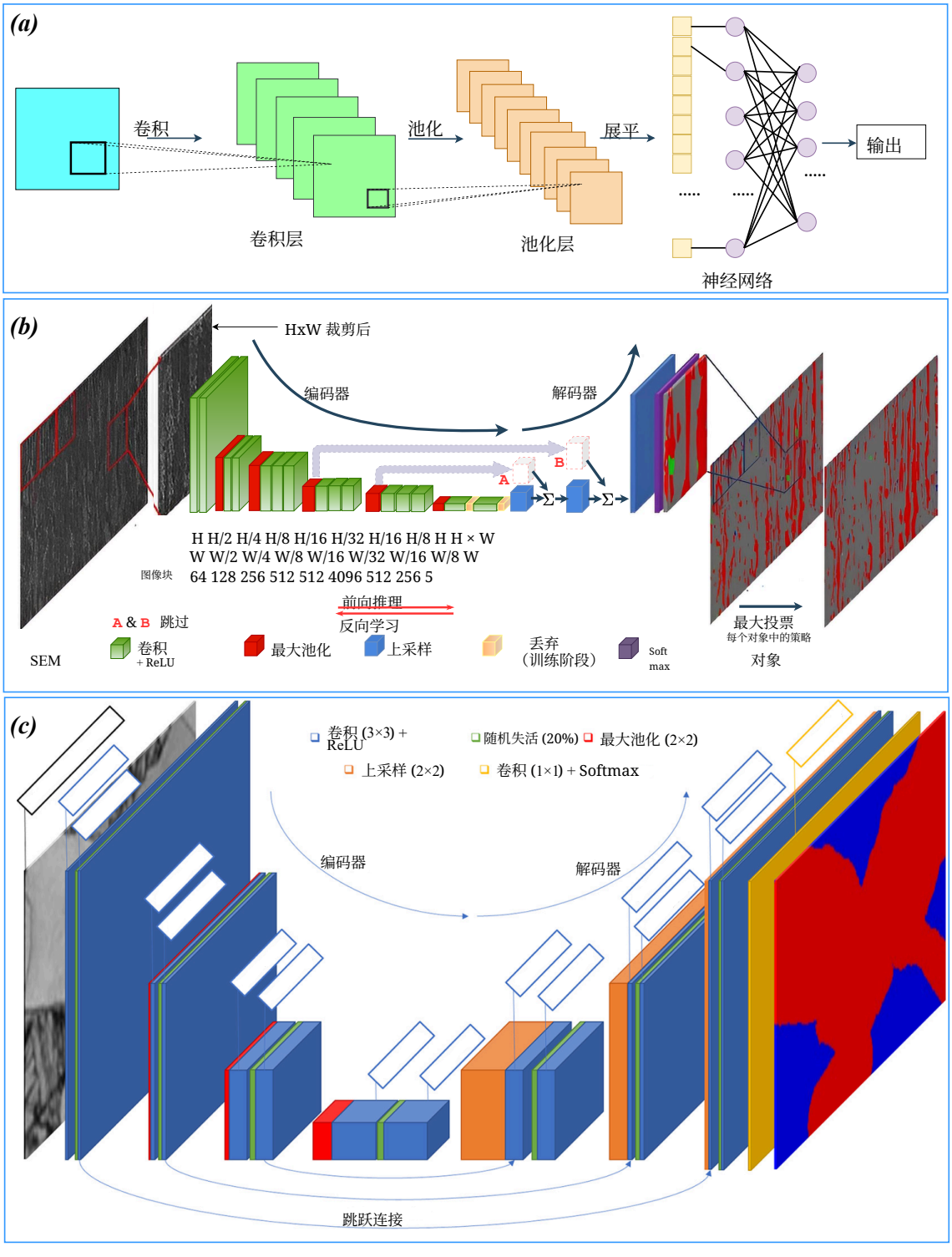


图10： (a) 典型卷积神经网络示意图，由卷积、池化和全连接层组成；(b) 用于基于最大投票分割的显微组织分类方法的全卷积网络示意图 [212]。在该方法中，首先将扫描电子显微镜输入图像划分为较小的图像块。随后，全卷积网络对每个图像块进行处理，生成标注了微观结构特征的分割输出。分割完成后，将所有图像块拼接起来以重建完整图像。接着执行最大投票步骤，算法会检查重叠区域的预测结果，并将每个区域标记为出现频率最高的标签。最终输出显微组织分类结果。(c) 用于 [213] 双相钢相分割任务的 U-Net架构，由卷积、随机失活、最大池化和上采样层组成。

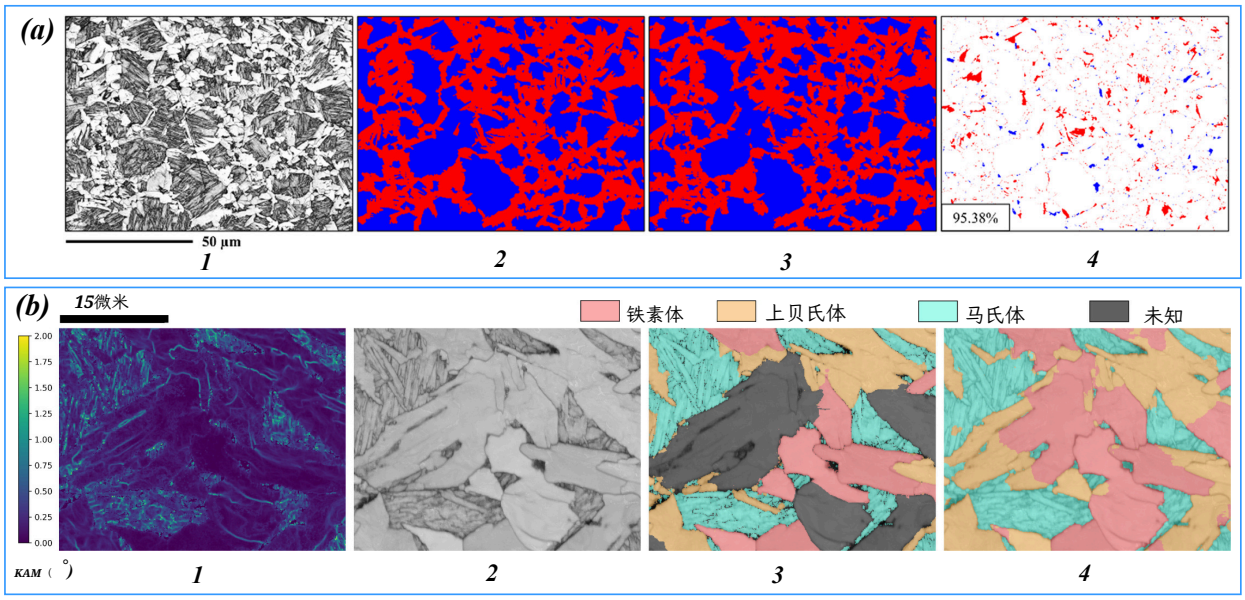


图11：（a）图像1显示带斜率图，这是一种用于区分铁素体相和马氏体相的电子背散射衍射指标。图像2展示真实标注显微组织。图像3显示根据带斜率和核平均取向差（KAM）指标得出的预测分类结果。图像4显示准确率图，其中正确分类的像素以白色显示，误分类为铁素体的像素以蓝色显示，误分类为马氏体的像素以红色显示 [213]。（b）U-Net 模型应用于电子背散射衍射图像的预测结果。图像1显示 KAM 图，图像2显示带对比度图，图像3展示真实标签，图像4显示预测的相分割结果 [225]。

4.2.1. 用于微观结构表征的卷积神经网络

卷积神经网络可用于目标检测；在材料科学中，感兴趣的对象可能包括晶体 [214],纳米颗粒 [215] 或缺陷 [216]。在这种情况下，基于卷积神经网络的方法通过识别目标特征的边界和形状 [217]来进行结构检测。例如，研究 [218]将 Mask R-CNN 应用于光学显微镜图像，以自动检测二维材料。Mask R-CNN 能够在图像中定位对象、对其进行分类，并生成像素级分割掩膜以勾勒出对象的精确形状。另一项研究[219], 评估了多种卷积神经网络架构，包括甚深卷积网络（VGG） [220], Inception [221], ResNet[222], 和 MobileNet, 以识别晶粒形貌、枝晶、共晶区域和析出物等微观结构特征。针对高熵合金生成的显著性图揭示了已学习特征的空间分布，展现了卷积神经网络成功识别关键微观组织特征的能力。

在微观结构表征中，一项重要任务是结构分割，通常将其表述为语义分割任务 [223]，并采用全卷积网络（FCN）实现。FCN去除了传统卷积神经网络（CNN）中的全连接层，仅由卷积和池化操作构成，因此适用于像素级预测，且比基于边界框的检测方法更加精确。例如，研究 [212]采用了带最大投票方案的 FCN，如图10b所示，对扫描电子显微镜（SEM）图像中的微观结构进行分类，成功区分了马氏体、贝氏体和珠光体的形貌。一种广泛使用的FCN架构是U-Net [224]，，如图10c所示。该架构由编码器–解码器结构组成：编码器提取特征并降低空间分辨率，解码器则通过上采样恢复空间分辨率。U-Net采用跳跃连接，将编码器中的特征图传递到对应的解码器层，从而保留边界和边缘等精细结构细节。在 [213], 电子背散射衍射（EBSD）图中，研究者将其作为U-Net模型的输入进行相分割，具体用于区分钢微观组织中的铁素体和马氏体，并获得了较高的预测准确度，如图11a所示。类似地，在[225] 研究中，U-Net用于分割EBSD数据集中的贝氏体相、铁素体相和马氏体相，报告的总体准确度约为92%，如图11b所示。研究还表明，合成微观组织数据集（例如利用相场模拟生成的数据集）也能有效用于训练分割模型[226, 227]。

4.2.2. 用于力学性能预测的卷积神经网络

CNN的另一项应用是建立材料微观结构特征与力学性能之间的联系。这种方法需要从微观结构图像中提取特征，并结合力学加载条件。在 [228], 3D微观结构图像与描述加载条件的辅助特征相结合，并输入VGG模型。数据集由晶体塑性模拟生成，以基于体素的子体积表示，并包含不同加载条件下对应的屈服强度值。加载条件通过一个独热向量进行编码，该向量在全连接层之前指示全局加载方向。为预测拉伸加载下的屈服强度， 研究还将织构、晶粒尺寸和晶粒形貌等附加特征与AZ31合金的微观结构图像一并输入CNN。该方法获得了准确的预测结果。 [229]

在 [230], 中，作者采用定量方法建立双相钢的合金成分、微观结构与力学性能之间的关系，以预测屈服强度。他们评估了两种策略：第一种是多模态耦合方法，即将成分数据和微观结构图像同时作为网络的输入；第二种仅在全连接层引入成分数据，而非从初始输入阶段开始。 [231], 中采用了类似策略，在全连接层阶段将YF 参数引入卷积神经网络，以基于微观结构图像预测屈服面。力学性能，包括硬度 [232] 以及复合材料等正交各向异性材料中的本构张量分量 [233],，也可使用基于卷积神经网络的模型进行预测。

4.2.3. 用于力学响应预测的卷积神经网络

使用基于卷积神经网络的预测模型进行力学响应预测（CM预测）的目的，是直接根据材料的微观结构估计其宏观应力–应变行为。输入微观结构通常表示为二维像素图像或三维体素体积。其核心思想是，卷积神经网络通过卷积层从这些微观结构图像中提取有意义的特征。随后，这些提取的特征在全连接层中与相应的应力–应变数据相结合，使模型能够学习一种将微观组织特征与力学响应联系起来的潜在表示。

作为输入数据的微观结构图像往往难以通过实验获取，因为受到时间和成本的限制。因此，在大多数研究中，这些图像由合成生成，并据此确定微观结构与力学响应之间的映射关系 [234]。利用微观结构图像数据预测本构模型的一般流程如图12a所示。该流程首先建立经过验证的数值模型，例如晶体塑性有限元模型。利用实验获取的微观结构图像对该模型进行校准，以表征晶体塑性参数，并通过实验观测验证数值结果。接下来，利用经过验证的数值模型生成合成微观结构数据。随后提取所需特征和应力–应变数据，进行预处理，并划分为训练集和测试集。最后，将输入数据提供给CNN模型。除基于图像的输入外，也可使用序列数据，例如应变分量。对模型进行训练以实现最佳预测性能，并将其预测结果与参考数据进行比较，以调整超参数并提高准确度。

图12b 表明，采用 [235] 中类似的流程后，预测的微观结构和应力–应变曲线与晶体塑性有限元模拟结果高度吻合。作者利用所开发的 CNN模型，通过电子背散射衍射图像，将模型应用于 AA5754 和 AA6061 的全新微观结构。预测的应力–应变曲线与晶体塑性有限元模拟结果高度一致。这表明，将微观结构图像特征与应力–应变行为等力学响应数据相结合，能够使模型稳健地预测此前未见微观结构的演化及其相应的力学响应。

该研究 [236] 采用类似方法，开发了两个基于卷积神经网络的模型，用于预测铝的双轴应力–应变响应。在这项工作中，研究人员使用二维卷积神经网络处理 {111} 面的数字极图图像，并使用三维卷积神经网络处理三维织构数据。合成数据集由双轴拉伸试验的基于晶体塑性的模拟结果生成。图12c 展示了 CNN模型的示意图。除了极图输入外，全连接层还接收应力比作为第二个输入，该应力比表示双轴加载中第一应力分量与第二应力分量之比。模型输出分为两部分：第一部分预测轧制方向和横向的归一化塑性应变，第二部分预测这两个方向上的最大应力和应变值。对于黏塑性多晶材料，也可以采用类似方法，如 [237] 所示。为了同时预测应力–应变场和整体应力–应变曲线， 该研究 [238]使用

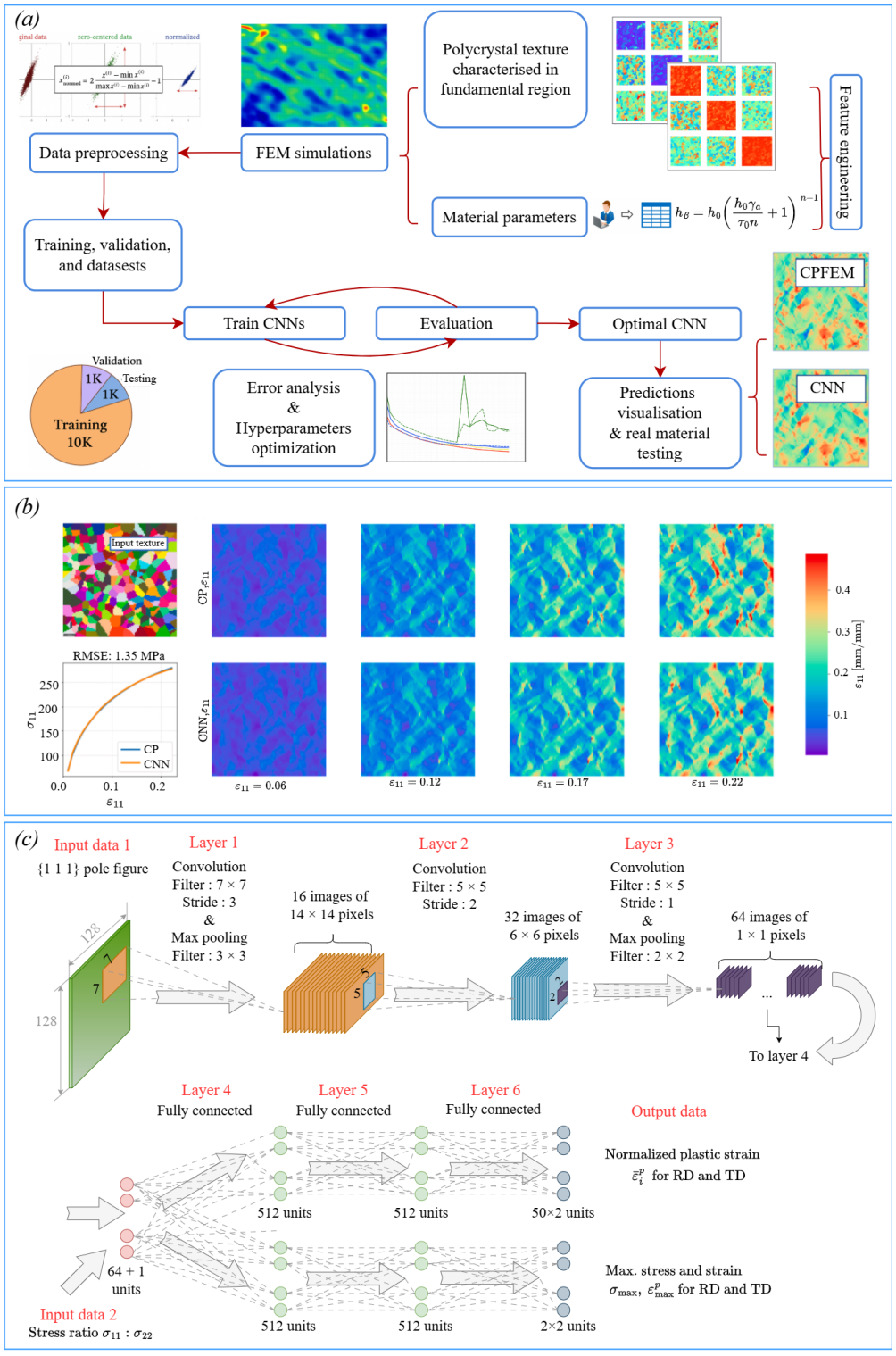


图12： (a) 典型框架示意图：利用经过验证的数值模拟结果生成图像数据，作为CNN模型的输入，并结合相应的力学响应结果。序列式应力-应变数据通常在全连接层输入模型 [235]。(b) 图中展示了输入微观结构及其对应的应力-应变曲线，以及在四个选定应变水平下一个应变分量的演化 [235]。(c) 用于预测双轴应力-应变曲线的二维CNN模型示意图。111晶面的数字极图图像用作第一个输入，双轴加载下两个应力分量的比值用作第二个输入 [236]。31

由模拟拉伸试验中应力–应变场演化的24帧组成的序列输入数据，而非单条曲线。随后采用CNN模型，将这些序列场数据与双相钢对应的微观结构图像关联起来，从而构建出一种能够根据微观结构信息预测完整应力–应变场分布的模型。

并非所有研究都会在CNN的展平阶段使用全连接层，将微观组织图像数据与力学响应向量结合起来。在 [239], 中，采用循环神经网络（RNN）将应变历史纳入模型，以预测当前应力分量。这使网络能够考虑变形历史，从而更准确地预测多晶材料的材料响应。类似地，卷积长短期记忆网络（ConvLSTM）等更先进的循环神经网络[240] 可用于结合卷积神经网络的空间特征提取能力与长短期记忆网络的序列学习能力。这种方法在 [241] 中用于预测多晶材料中应力的演化。

卷积神经网络也可用于表现出各向异性或正交各向异性行为的非均质材料，例如复合材料。在 [242], 中，作者通过使用合成有限元法生成的微观结构图像训练卷积神经网络，预测二元复合材料的应力-应变行为。他们将卷积神经网络框架与主成分分析（PCA）相结合，以降低输入数据的维度；这些输入数据由一组应变点对应的应力值构成。使用主成分分析的目的是找到一个能够高效表征训练数据的标准正交基。对于一个包含 100000 张微观结构图像、每个样本对应 61 个应力值的数据集，将应力向量转换为维度较低的表征后，输入 CNN 模型。随后，CNN 预测包含软相和硬相的二元复合材料的完整应力-应变响应，其中两相各自具有不同的力学性能。一些研究使用数值模拟得到的微观结构图像及其对应的应力场或应变场分布，训练 CNN 模型，以预测由基体相和纤维相组成的复合材料中的应力场 [243–245]。

在最近的一项研究中， [246], 作者采用 [247] 中提出的、基于 K 均值聚类的增强复合材料微观结构生成方法，生成了双相材料（如纤维增强复合材料和金属基复合材料）的二维代表性体积单元图像。生成的数据确保纤维在基体中随机分布。利用其中的 50000 张二值微观结构图像，作者按照图13a 所示的框架训练 CNN 模型。将量化后的微观结构特征与夹杂相和基体相的数值材料属性一同输入网络的全连接层。模型预测复合材料的应力-应变响应，如图13b 所示。对于不同的纤维几何形状，预测值均与相应的模拟结果高度吻合，预测误差处于可接受范围内。

卷积神经网络也可用于本构模型参数识别。在 [248], 中提出了一种框架，将依次获得的合成有限元法应变场输入卷积神经网络，以提取应变特征。随后，将这些特征传递给位于网络全连接部分的长短期记忆网络，用于序列数据训练；模型输出简单弹塑性本构模型的材料参数，例如刚度、泊松比、屈服强度和指数硬化参数。在 [249], 中，研究者将额外的成分数据与钛合金微观结构图像结合起来，输入具有全连接层的卷积神经网络，以识别四次多项式本构关系的参数。类似方法也已用于识别 AZ80镁合金 [250]和铝-环氧树脂复合材料 [251]的参数。

上述卷积神经网络框架通常用于二维或三维数据，例如以像素或体素形式表示的微观结构图像。然而，卷积神经网络也可用于一维输入数据，尤其是序列数据，因此适用于材料响应取决于变形历史的本构建模。在此背景下，文献 [253]使用时间卷积网络（TCN） [252] 对钢和混凝土进行本构建模。TCN的核心思想是保留输入数据的长期历史依赖性，这对于塑性至关重要。为此，网络采用多个扩张卷积层，从而保持因果性并表征长程依赖关系。因此，无需重新处理整个加载路径，即可根据应变历史更新应力。研究结果表明，TCN适用于单调和循环加载条件下塑性行为的代理建模。研究[254] 采用二维时间卷积网络，其中输入为序列应变数据，输出为一个二维数组：一个维度表示应变分量，另一个维度表示这些分量随时间步变化的值。随后，该输出数组被传递至全连接层，以预测应力分量。文献 [255], 比较了多种方法，包括基于时间卷积网络和循环神经网络的模型，其中框架的编码器部分由不同架构替代。

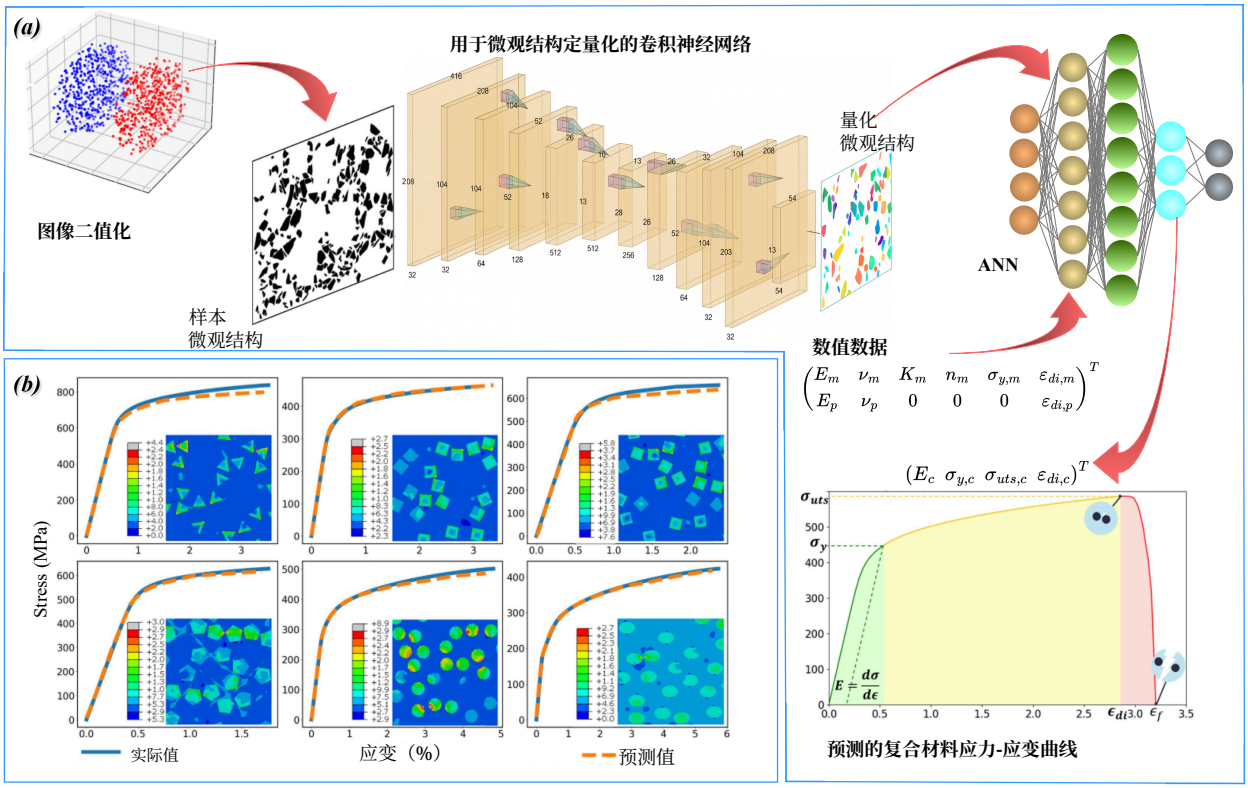


图13： (a) 示意图展示了 [246] 中提出的整体框架。将二值化的微观结构图像输入卷积神经网络，以量化微观结构中的每个夹杂物。由此得到以特征向量形式表示的量化表征，其中包含夹杂物的几何参数和分布参数。随后，全连接层将这些量化后的图像参数与基体相和纤维相的数值材料属性数据结合起来，以预测复合材料的应力-应变曲线。(b) 将 (a) 中 CNN模型预测的应力-应变曲线与不同纤维几何形状对应的模拟结果进行比较，其中代表性体积单元承受水平拉伸载荷 [246]。

4.3. 循环神经网络（*RNN*）

在人工神经网络中，通常假设输出与输入相互独立，并且每一步的输出直接由对应步骤的输入得到，或有时与前一步的输入结合得到。然而，循环神经网络（RNN）的工作方式则不同，它会纳入网络先前的元素，使先前的输出能够作为隐藏状态输入。循环神经网络是一种专为序列数据或时间序列数据设计的神经网络，其中包含来自先前步骤的信息，可以影响当前输出 [211]。这种影响通过在每一步提供一个隐藏状态来实现，如图14a所示。每一步的隐藏状态都根据当前输入x_t 和先前的隐藏状态h_{t-1} 更新，并表示为

$$h_t = \phi_1(w_x x_t + w_h h_{t-1} + b_h) \tag{7}$$

其中 h_{t-1} 表示网络从过去记住的信息，x_t 表示网络当前看到的信息，w_x、w_h 为可学习参数，即权重矩阵，b_h 是隐藏状态的偏置矩阵，而 $\phi_1(\cdot)$ 是激活函数。循环连接使网络能够捕捉序列依赖关系，例如时间关系，因此适用于时间序列数据或路径依赖预测等任务，在这些任务中，当前步骤的数据会受到前面步骤数据的影响。如图14a所示，网络在每一步都会生成一个输出：

$$y_t = \phi_2(w_y h_t + b_y) \tag{8}$$

其中 w_y 和 b_y 分别是权重矩阵和偏置矩阵，而 $\phi_2(\cdot)$ 是输出连接的激活函数。在循环神经网络中引入隐藏状态相当于引入了记忆，反映了其对知识的解读或预测

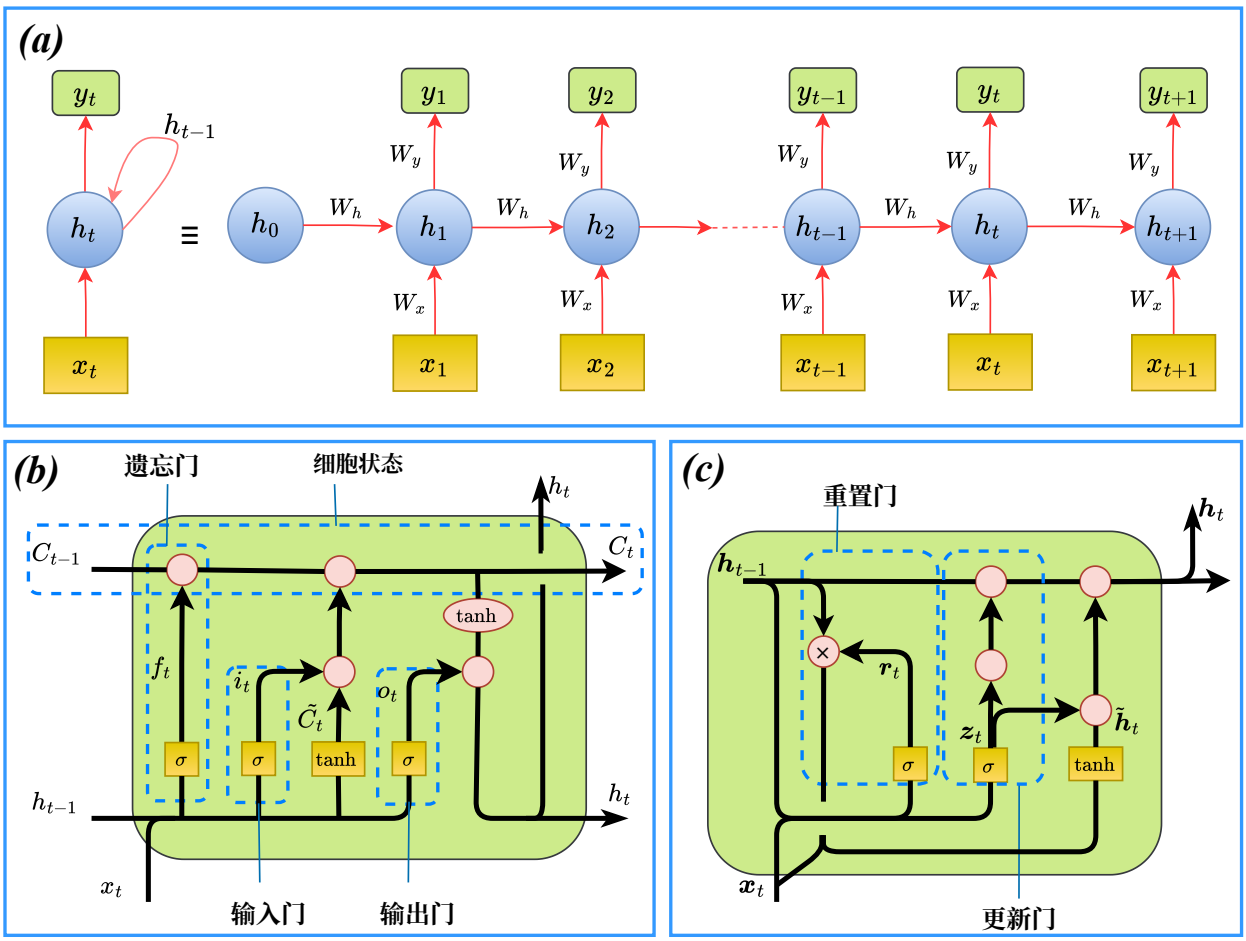


图14: （a）循环神经网络的示意图及其折叠与展开表示，（b）具有细胞状态以及遗忘门、输入门和输出门的长短期记忆网络示意图，以及（c）具有重置门和更新门的门控循环单元示意图。

基于先验　　知识。循环神经网络的训练通过使用反向传播调整权重来完成
通过时间 [21　1], 这是一种处理时间（序列）维度的反向传播方法。

4.3.1. 基础循环神经网络的应用

为捕捉材料塑性变形中的路径依赖性，除了使用本构模型中的内部状态变量来描述材料外，采用不同于人工神经网络的架构（如循环神经网络）也是一种替代方案，这相当于嵌入并描述内部变量。因此，为了模拟塑性，文献中首次于1995年探索了循环神经网络： [256], 的研究采用序列式人工神经网络对砂土亚塑性进行建模。根据三轴试验结果，模型设有七个输入，包括当前应力和应变状态、初始相对密度、围压，以及表征砂土粒径分布的不均匀系数。两个输出分别是下一个时间步的应力和应变。该模型采用序列式Jordan网络 [257]，并将两个输出存储在人工神经网络中，以纳入序列效应。该模型用于捕捉输入参数对砂土及后续黏土应力–应变关系的影响 [258]。随后一项针对同一主题进行补充讨论的研究表明，该模型只能在特定应变率下得到充分应用 [259]。为改进所提出的序列网络架构，可将输入特征空间拆分为两部分，使用同一砂与砾石材料数据集训练两个不同的网络 [202]。

与Jordan网络不同，Jordan网络的循环反馈来自输出层，而Elman网络 [260],的反馈来自隐藏层的输出，其中上下文层存储了前一时间步隐藏状态的副本，从而捕捉时间模式的内部表征。

态，捕捉时间模式的内部表征。相关研究 [261, 262]采用Elman网络，根据从应变控制的不排水试验和应力控制的排水试验中获得的数据集，对残积土的剪切行为进行建模。普通型循环神经网络也用于黏土等其他地质材料 [263], 非饱和土 [264] 和砂土 [265] 的亚塑性建模。此外，研究 [266, 267] 还探讨了循环神经网络模型中的映射技术，以建立输入与输出之间的关系。研究比较了多种映射技术，包括函数标记、函数分段、准序列动态映射和真正序列动态映射，以找出循环神经网络模型中用于土体本构模型的最准确预测技术。最终，研究提出混合技术最为有效。

最近，有研究尝试开发用于循环神经网络的新型序列应变–应力数据表征，以建模单调与循环加载条件下的率无关理想塑性 [268]。其主要思路是结合两个网络：第一个是状态网络，以当前和下一时间步的应变及内变量作为输入，并输出内变量增量。利用这些预测的增量计算更新后的内变量，并将其与更新后的塑性应变一起输入响应循环神经网络模型，从而获得相应的应力响应。训练采用无梯度优化技术，使网络能够准确再现塑性特有的分段线性行为。循环神经网络还可用于混合场数值分析；除位移场外，基于循环神经网络的模型还可以纳入损伤等额外标量变量 [269]。

由于基础循环神经网络在文献中用于塑性的应用受到其固有缺陷的限制，因此更常采用循环神经网络的各种改进版本，以下各节将对此进行讨论和阐述。

4.3.2. 长短期记忆网络

普通循环神经网络存在两大主要问题：梯度消失和梯度爆炸。在反向传播过程中，梯度用于更新网络的权重。在普通循环神经网络中，梯度在沿时间反向传播时可能会消失，对长序列尤为如此。这会阻碍网络学习长期依赖，因为梯度会变得过小，无法有效更新权重。因此，普通循环神经网络难以捕捉跨越较长时间步的信息。

梯度爆炸是另一项挑战，发生在反向传播期间梯度呈指数级增长时，并导致训练过程中的数值不稳定性。梯度爆炸的后果是，网络可能会进行过大的权重更新，从而使训练发散或失败。

长短期记忆网络是一种专门用于学习长期依赖的特殊循环神经网络 [270]。它们在结构上能够在较长时间内保留信息。长短期记忆网络的关键特征是细胞状态，它像一条传送带，使信息能够沿其流动且改动极小。细胞状态调节信息流入和流出细胞，并贯穿整个细胞链，如图14b所示，由图顶部的水平线表示。长短期记忆网络可以使用控制信息如何更新的门，向细胞状态添加或移除信息。共有三种门：遗忘门、输入门和输出门，如图14b所示。每个门由一个Sigmoid神经网络层和一个逐点运算组成。该Sigmoid层 σ 产生介于0与1之间的值，接近0的值表示“阻断”（不允许信息通过），接近1的值表示“允许”（让全部信息通过）。

遗忘门层负责从细胞状态中移除不需要的信息。它接收前一时间步的隐藏状态 h_{t-1} 和当前输入 x_t，并为前一细胞状态C_{t-1}的每个元素生成一个介于 0 和 1 之间的数值，表示为

$$f_t = \sigma\left(w_f\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_f\right) \tag{9}$$

随后，网络通过两个步骤来决定在细胞状态中存储哪些信息。首先，输入门层i_t 将值传递给 Sigmoid函数 σ，以此更新这些值。然后，tanh层生成一个由新候选值C_t组成的˜向量。接着将这两个部分结合起来，以创建并更新细胞状态，可表示为

$$\begin{cases} i_t = \sigma\left(w_i\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_i\right) \\ \tilde{C}_t = \tanh\left(w_C\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_C\right) \end{cases} \tag{10}$$

LSTM单元的下一步是将细胞状态从C_{t-1}更新为C_t：将旧状态乘以f_t，以˜移除不需要的信息，然后加上$i_t \odot C_t$。后者表示由输入门缩放的新候选值，用于确定每个值应更新多少。该过程表示为

$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t \tag{11}$$

最后一步中，对于输出，会对输入和隐藏状态应用 sigmoid 门，以确定细胞状态中哪些部分应当输出。随后，将细胞状态通过 tanh 函数，将数值缩放至 −1和 1 之间，并将结果与 sigmoid 门的输出相乘，从而仅将选定的信息传递至下一个隐藏状态。输出门和更新后隐藏状态的方程如下：

$$\begin{cases} o_t = \sigma\left(w_o\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_o\right) \\ h_t = o_t \odot \tanh\left(C_t\right) \end{cases} \tag{12}$$

前文讨论的细胞状态机制有助于网络解决梯度消失问题，该问题通常出现在循环神经网络中。在反向传播过程中，偏导数可以经过多个时间步而不与小数值相乘，因为细胞状态主要采用加法交互，因此衰减很小。与普通循环神经网络相比，LSTM网络性能更优，因此已广泛应用于材料的塑性表征。

在路径相关塑性中，学习材料行为如何随加载路径变化，同时考虑从弹性阶段向塑性阶段的转变，是一项挑战。有人尝试采用基础 LSTM网络来复现弹塑性行为，并考虑材料的非均质性和各向异性 [271]。该研究旨在通过调整输入变量来实现这一目标，从而增强模型对过去信息的归纳偏置。为表征材料非均质性，作者在指定范围内采用不同的材料属性，例如弹性常数、屈服应力和硬化参数，以对复合材料中具有各向同性硬化的 J2 塑性进行建模。通过随机选择这些材料属性，生成了 14,000 个数据集，并针对不同加载方向进行数值分析，以捕捉各加载路径下的应力张量分量。随后，将这些材料属性以及加载路径及其历史作为输入，并将过去的平均应变作为额外输入，以解决先前报告的质量守恒问题 [272]。该方法能够准确预测异构各向异性材料在任意加载条件下的响应。

在大规模数值模拟中，常采用深度学习模型对塑性进行代理建模，因为大量自由度会产生维度极高的数据。在 [273], 为解决这一问题，作者将 LSTM网络与本征正交分解相结合。其思路是先将有限元分析得到的位移和塑性应变（作为输入）以及冯·米塞斯应力（作为输出）的高维数据转换为低维正交分解系数，再将这些系数输入网络进行训练。通过大幅降低数据维度，采用了单个网络结构和集成网络结构，以确保结果稳健。降维采用奇异值分解，得到少数几个主导系数，能够以低于 1% 的误差重现全阶数据。基于若干大规模数值分析的结果，所提出的分解与 LSTM模型相结合的方法，为高效、准确地对塑性进行代理建模提供了稳健的框架。

LSTM网络也被用于材料的多尺度分析，以加快不同尺度间的信息传递。一种方法是使用 LSTM网络，将应变历史和收敛指标序列等输入序列映射为所有时间步上的输出应力序列 [274]。训练数据取自微观尺度分析，并用于训练网络。随后，将训练好的 LSTM集成到宏观尺度有限元分析中。网络架构由若干组件构成，包括 LSTM层、用于正则化以避免过拟合的丢弃层，以及全连接层。所开发的 LSTM网络作为微观尺度模拟的代理模型，在宏观尺度有限元模型的每个积分点处提供应力更新。

文献 [275]介绍了一种类似的方法，即通过微观尺度分析获取训练数据，并将其用于实现宏观尺度预测。在这项工作中，采用有限体积直接平均微观力学，从复合材料的单轴响应和循环响应中生成数据。LSTM网络由两层组成，以应变分量为输入、应力分量为输出。所提出的两层LSTM网络表现出

相比全连接人工神经网络有更好的性能，并且通过参考微观力学模拟对这两种模型进行评估。为了进一步促进基于微观尺度的数据生成，以训练用于宏观尺度本构模型预测的LSTM网络， [276] 该研究首先采用人工神经网络为晶体塑性模型推导参数。随后从晶体塑性模拟中提取数据，包括应变和应力历史，并将其输入LSTM网络，以便在宏观尺度模拟中复现本构行为。LSTM网络还可用于识别本构模型的参数，例如循环加载下黏塑性材料的晶体塑性模型 [277]。总体而言，LSTM架构非常适合复现塑性和热黏塑性 [278]；然而，问题对具体情形的依赖性会显著影响不同的循环神经网络模型的性能，已有多项研究对此进行了讨论和比较 [279, 280]。下一节将介绍塑性领域中其他常用的循环神经网络架构。

4.3.3. 门控循环单元网络

门控循环单元（GRU） [281] 是另一种循环神经网络，也已用于材料本构模型的定义。与长短期记忆网络相比，在某些情况下，GRU凭借更简单的架构和更少的待确定参数，能够减少记忆占用并缩短计算时间，因此具有一定优势。与长短期记忆网络类似，门控循环单元也具有维持长期记忆的机制。如图14c所示，门控循环单元网络包含两个门：重置门和更新门。重置门r_t 由一个Sigmoid函数 σ构成，它决定˜在计算新的候选激活h_{t-1} 之前，应移除多少先前的隐藏状态h_t。该门使网络能够从过去的信息中移除无关内容，其表达式为

$$r_t = \sigma\left(w_r\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_r\right) \tag{13}$$

更新门z_t 决定应保留多少先前隐藏状态中的信息，以及应使用多少候选隐藏状态来更新隐藏状态h_t。更新门负责在保留旧信息和纳入新信息之间维持平衡，其表达式为

$$z_t = \sigma\left(w_z\left[h_{t-1},\, x_t\right] + b_z\right) \tag{14}$$

候选激活利用当前输入x_t 和隐藏重置状态$r_t \odot h_{t-1}$生成新的候选值，这些值可根据更新门对隐藏状态的决策加以采用。候选激活定义为

$$\tilde{h}_t = \tanh\left(w_h\left[r_t \odot h_{t-1},\, x_t\right] + b_h\right) \tag{15}$$

利用前一隐藏状态和候选隐藏状态更新当前隐藏状态h_t ，其组合由更新门z_t控制。具体而言，该过程会保留过去的相关信息，并纳入当前时间步的新信息。更新后的隐藏状态可用数学形式表示为

$$h_t = (1 - z_t) \odot h_{t-1} + z_t \odot \tilde{h} \tag{16}$$

在基于GRU网络的路径相关塑性应用中，每个时间步更新后的隐藏状态通常表示应力张量 [56] ；在热黏塑性中，则表示应力和温度 [55]。早期关于使用GRU进行塑性建模的研究 [56], 探讨了GRU复现各向异性Yld2000-2d屈服函数 [282] （采用均匀硬化）预测结果的潜力。为此，研究人员针对加载路径复杂度逐渐增加的一系列问题进行了模拟。在建模测试中，首先考察最简单的情况，即反向卸载的单轴加载，随后逐步扩展到任意加载路径下的多轴平面应力问题。数据集类型也会因问题而异。例如，在单轴测试中，输入包括当前对数轴向应变和应变路径总长度，以及相应的应力。相比之下，在更复杂的模型中，应变分量被定义为加载路径的函数，并映射到应力响应。与执行相同任务的全连接人工神经网络相比，基于门控循环单元的本构模型能够获得更准确的结果。

本文探讨了基于门控循环单元的本构模型复制在复杂加载路径下的表现 [283], ，作者利用在单轴加载条件下获得的一维应力–应变数据，对承受任意加载路径的三维结构进行建模。输入数据由应变序列组成，输出则对应于相关的应力序列。训练好的模型被嵌入有限元分析框架中，所得

结果与经典J2塑性模型的结果进行了比较，二者高度一致，证明了基于GRU的方法具有较高的准确度。

有限元分析中的应变增量通常并非先验已知，导致仿真结果存在较大差异。这一问题会导致有限元建模中基于RNN的代理预测出现错误结果和较大误差。为进一步改进使用GRU网络对路径相关塑性的建模，文献 [284]研究了GRU输出应力对应变增量尺寸的依赖性。作者提出了新的GRU架构，以及一种基于随机游走方法的新型训练数据生成方法。如图15a所示，所提出的架构将应变、应变增量和非时序材料性质（如刚度和泊松比）作为输入，并预测应力作为输出。该架构由一个GRU层组成，该层在每个时间步更新隐藏状态；第一全连接层接收应力增量和材料属性，通过激活函数进行处理，并将结果传递至第二个全连接层。该方法引入的改进确保模型在不同应变条件下具有鲁棒性，包括单调、循环和正弦加载路径。

还探讨了由于应变增量尺寸变化导致基于RNN的训练模型与有限元分析之间不一致的问题 [285], 其中，作者提出了所谓的材料单元架构，如图15b所示。材料单元在由随机加载路径生成的数据集上进行训练，随后利用高斯过程进行随机增强。材料单元框架在一种单元中融入了物理扩展，在另一种单元中融入了对称性约束。为减少由应变增量不一致引起的预测误差，作者将自适应线性变换嵌入材料单元中，如图15b所示。材料单元共有三种类型。第一种类型嵌入两个GRU单元和一个全连接层，以应变增量作为输入，并输出应力。第二种类型在将数据输入GRU单元之前，引入物理扩展模块以提高泛化能力（见图15b）。该架构的输入包括应变增量、应变增量的Lode角，以及第一和第二主应变的增量。应力输出在应力张量分量的基础上，还扩展为包含剪应力、旋转角以及第一和第二主应力。第三种架构结合了前两种设计，并将其表示为隐式内部变量，如图15b所示。通过将所提出的代理架构与多个示例的有限元结果进行比较，验证了其预测能力。

为进一步解决GRU网络因增量尺寸变化而产生的自洽性问题，研究 [286]提出了一种称为最小状态单元（MSC）的新架构，并在 [287]中进一步改进。MSC即使在短序列上训练也能保持自洽性，而在应用于具有小增量的长序列时仍表现出稳健性能。MSC采用最少数量的内部状态变量，足以捕捉材料的基本历史依赖性，同时依靠更具表达能力的转移函数与输出神经网络函数来表征复杂行为。作者提出MSC，是为了应对传统RNN架构的局限性：这类架构往往包含大量内部记忆单元和高维隐藏状态，从而妨碍可解释性、引入冗余记忆变量并削弱外推能力。相比之下，MSC使用一小套有意义的状态变量，即最小维度表示，同时将模型复杂度交由转移函数与输出函数承担。

为复现固体塑性，MSC 架构以应变增量作为输入并输出应力。所提出的架构也可基于由基于晶体塑性的有限元分析生成的数据进行训练，如 [288], 中所讨论的那样，使用应变增量及相应的应力值。此外，[289] 中的研究采用了基于MSC 架构的迁移学习概念，利用预训练模型及其已学习参数来初始化权重和偏置。该方法提高了收敛速度，并减少了训练所需的数据量，例如应力–应变序列。

最近，在 [290], 中，MSC 网络被应用于非均质材料，以获得均匀化响应；同时，在该架构中设计并评估了替代性的自洽循环单元，以减少在多尺度分析中复现复合材料行为所需的隐藏变量数量。为了取得优于迁移学习的性能，在 [291] 中引入了材料塑性背景下的共同核心概念。该概念表示一组材料之间共享的模型参数子集。通过多任务学习，利用 MSC 架构为冯·米塞斯材料定义共同核心，从而提升了泛化性能。

除了连续体尺度塑性研究之外，基于 GRU 的代理建模还可应用于多尺度分析，其中代表性体积单元技术通常用于复合材料等非均质材料、

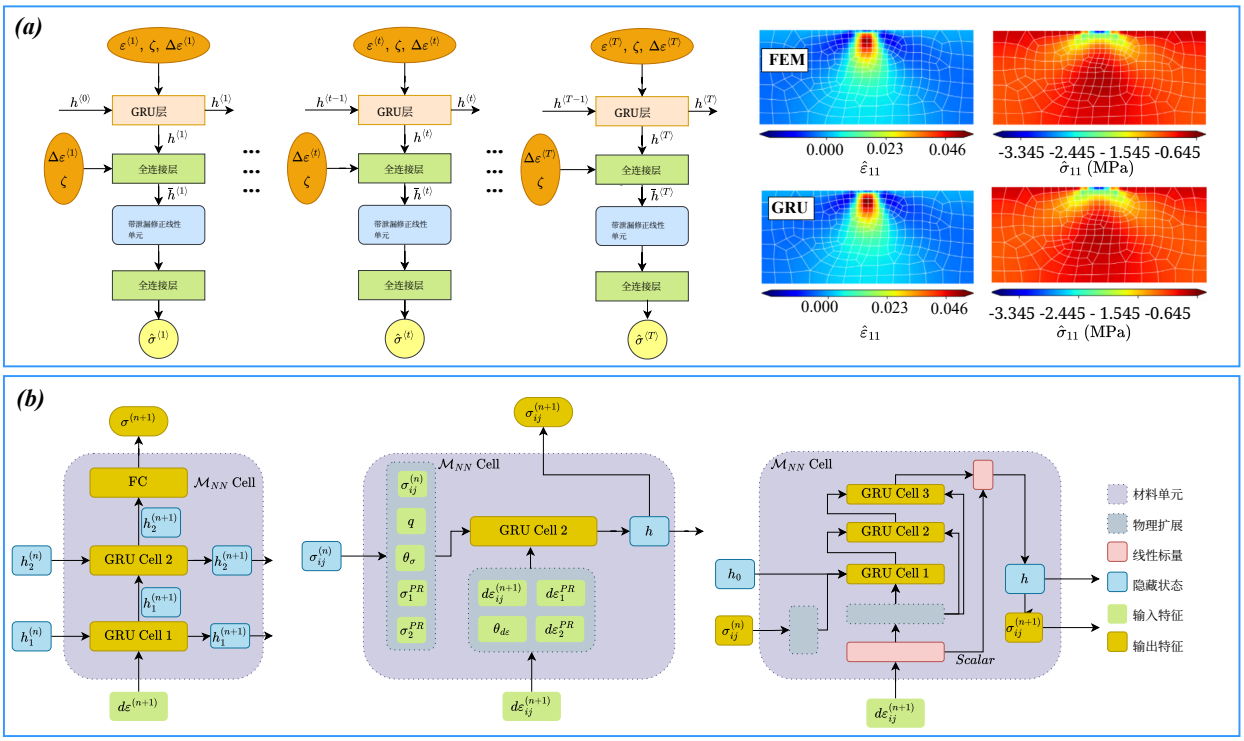


图15： (a) 新型基于GRU的架构示意图，其中将额外数据注入第一个全连接层。将数值模拟得到的第一应变和应力分量的轮廓与有限元结果进行比较，结果表明预测准确 [284]。(b) 三种材料单元架构：左侧为最简单的结构，由两个GRU层和一个全连接层组成；中间的架构纳入了物理扩展变量；右侧的架构则将前两者结合，并将其嵌入为隐式内部变量 [285]。

多孔固体和颗粒材料 [292]。这种方法能够捕捉影响材料宏观变形行为的微观结构特征。使用代表性体积单元构建本构模型需要明确三个关键要素：微观结构描述符、与各微观结构相相关的材料属性，以及加载条件。代表性体积单元为采用数值方法（通常是有限元分析）生成数据提供了合适的框架，可用于塑性问题中的循环神经网络代理建模 [293, 294]。 [57], 介绍了一项早期研究，作者采用包含微观结构及其组成部分的代表性体积单元，并施加不同的加载路径。他们在采样过程中使用高斯过程和多项式回归技术，生成一系列点，以表示随时间变化的特征，例如变形路径。此外，他们的基于 GRU 的代理模型将应力和塑性应变能响应映射至加载条件和微观结构描述符。类似地， [295]中的研究利用了弹塑性复合材料的代表性体积单元，并对其施加随机加载路径；这些路径以类似随机过程中的随机游走的方式生成。

在近期的一项多尺度研究中 [296], ，研究采用 MSC 架构，构建了一个包含两个新设计的并行状态单元的框架，以捕捉材料的力学和织构演化特征。所提出的架构被用作晶体塑性模拟中的代理模型，并采用一种基于广义球谐函数傅里叶系数的织构–力学关联方法。为提高泛化能力，研究选取了任意应变路径和随机应变增量。模型输入包括由欧拉角表示生成的一组精简傅里叶系数，这些系数作为架构的隐藏状态；此外还包括宏观变形分析得到的应变增量。该架构的两个并行分支分别输出用于宏观预测的当前时间步应力，以及代表微观尺度模型演化后织构的欧拉角。表 4总结了本节评述的基于 RNN 的方法。

表 4：循环神经网络在 CM预测中的应用。

方法	材料	塑性模型	数据类型（尺寸）	输入	输出	参考文献
基础循环神经网络	Sand	亚塑性	不排水三轴试验	相对应变密度，应力	应力	[265]
	固体材料	各向异性塑性	合成 or 实验材料单轴试验	应力-应变数据序列	应力	[268]
LSTM	复合材料	各向异性塑性	合成，14000	材料属性，应变和应变历史	应力	[271]
	合金	塑性	合成，有限元分析	应变，位移	冯·米塞斯应力	[273]
	复合材料	CP	合成，微观力-学	应变	应力	[275]
				分量	分量	
GRU	合金	塑性	合成，单轴仿真	应变	应力	[283]
				序列	序列	
	钢	热黏塑性	合成，凝固-tion	应变，热通量	应力，温度	[55]
	复合材料	塑性	合成，代表性体积单元模拟-计算	微观结构描述符，加载条件	应力、塑性应变能能量	[57]
修改后门控循环单元：MSC	固体材料	塑性	合成	应变	应力	[287]
				序列	序列	
	铝合金	CP	合成，晶体塑性模拟	应变	应力	[288]
			tions	增量	增量	

*4.4. Transformer*与基于注意力的模型

自问世以来， [297], Transformer 已成为人工智能领域最具影响力的发展成果之一。它借助注意力机制，重新定义了序列建模和表征学习的格局。Transformer 在多种深度学习任务中展现出卓越的效果，包括自然语言处理、计算机视觉、信号处理、语音识别和多模态分析 [298]。Transformer 的核心思想是以自注意力机制取代早期序列模型中的核心机制——循环和卷积；自注意力机制能够直接建模序列中所有元素之间的依赖关系，而不受元素间距离的影响。这一范式转变从根本上改变了序列数据的处理方式，并通过并行化兼顾了概念上的简洁性与计算效率。

Transformer 的底层框架基于一种广为人知的序列到序列（Seq2Seq）框架，即编码器–解码器，该框架由 [281, 299] 提出。编码器处理输入序列，并将其转换为上下文表示，从而捕获其中相关的语义信息。随后，解码器利用这一表征以及此前生成的输出，逐步生成目标序列。换言之，编码器对输入进行概括，而解码器则将这一概括转换为最终输出。

[297]中提出的原始Transformer的架构由两个模块组成，即编码器和解码器，其中包含重复的层，这些层集成了注意力机制、前馈网络（FFN）、残差连接以及

位置编码，如图16a所示。每个组件都有助于模型在不依赖循环或卷积的情况下捕捉序列数据中的复杂关系。

注意力模块的核心是自注意力机制，它允许序列中的每个词元关注其他所有词元，使模型能够高效地捕获全局依赖关系。给定以基体 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d_{\text{model}}}$表示的输入数据，首先将其投影到三个空间：查询（$\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{W}_Q$）、键（$\mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{W}_K$）和值（$\mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}_V$），其中 $\mathbf{W}_Q$、$\mathbf{W}_K$ 和 $\mathbf{W}_V$ 是学习参数矩阵。根据查询与键之间的相似度，注意力函数计算值的加权表征，其形式为

$$Attention(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = softmax\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}}\right)\mathbf{V} \tag{17}$$

其中 d_k 是键矩阵的维度，在注意力机制中用于缓解 softmax 激活函数的梯度消失问题。在 Transformer 中，这种注意力机制扩展为多头注意力，多个注意力头并行运作，以学习不同类型的关系。随后，将所有注意力头的输出拼接起来，并通过线性变换映射回模型维度，形式为

$$MultiHead(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = Concat(head_1, ..., head_h)\mathbf{W}_O \tag{18}$$

这种设计使模型能够联合关注来自不同表示子空间的信息，从而提升对上下文的理解能力。在注意力层之后，每个词元的表征会分别输入逐位置前馈网络（FFN），以增强模型进行非线性变换和特征抽象的能力。前馈层由两个线性层组成，中间通常应用非线性激活函数 ReLU，其表达式为

$$FFN(\mathbf{H}') = \text{ReLU}(\mathbf{H}'\mathbf{W}_1 + \mathbf{b}_1)\mathbf{W}_2 + \mathbf{b}_2 \tag{19}$$

其中$\mathbf{H}'$ 是前一层的输出。为了在整个序列中实现一致的变换，同时保持计算效率，对每个词元位置应用相同的前馈网络参数。每个子层（注意力和前馈网络）都通过残差连接 [222] 连接，然后在下一步进行层归一化 [300]，以便于优化并稳定训练过程。残差连接使梯度能够更容易地流经深度网络，并减少梯度消失问题；而层归一化则控制激活值的尺度。考虑到残差连接和层归一化，每个 Transformer 编码器块可表示为

$$\begin{cases} \mathbf{H}' = LayerNorm(SelfAttention(\mathbf{X}) + \mathbf{X}) \\ \mathbf{H} = LayerNorm(FFN(\mathbf{H}') + \mathbf{H}') \end{cases} \tag{20}$$

这种结构确保模型在学习连续变换所产生的新特征的同时，保留来自较早层的关键信息。自注意力具有置换不变性，因为它不包含循环或卷积，因此不会自然地编码词元顺序。为了解决这一问题，会将位置编码添加到输入嵌入中，以提供有关数据序列结构的信息，如图16a 所示。根据数据的序列表征，存在多种不同的位置编码，详见 [301]。

一般而言，Transformer 架构有三种使用方式： [298]第一种是仅编码器，只使用编码器块，其输出作为输入的表征。这种设置常用于语言理解任务，例如文本分类和序列标注。第二种是仅解码器，只使用解码器块，并移除编码器–解码器交叉注意力模块；这种配置通常用于序列生成任务，例如语言建模。第三种是编码器–解码器配置，采用上述完整的 Transformer 架构，如图16a所示。这种设置用于序列到序列建模，包括与本文综述相关的应用；本文聚焦于通过纳入序列式应力–应变数据对材料进行本构建模。

在早期的一项研究中 [302], ，作者利用编码器–解码器架构，将材料的历史依赖响应建模为序列到序列预测问题。研究提出了一种采用展开式注意力机制的通用深度学习框架。该框架由一个使用门控循环单元的编码器和一个同样使用门控循环单元的解码器组成，两者通过注意力模块连接。输入为序列应变张量分量，输出为

相应的序列应力张量分量。由GRU单元构成的编码器接收前一隐藏状态和当前输入数据，以生成新的隐藏状态及供注意力模块使用的输出。注意力模块还接收来自解码器的隐藏状态。最后，它将输出馈送至解码器流程，以预测当前应力张量。在注意力模块中采用了两种机制：第一种是自注意力，用于增强输入序列内部的依赖关系，并细化编码器学习到的表征；第二种是编码器–解码器注意力，用于捕捉输入和输出序列之间的相互依赖关系，从而帮助检索数据中具有重要影响的历史状态。将该框架应用于钢材循环应力–应变响应所得的结果，证明了其有效性和准确度。

同样，该研究 [255] 提出了一种编码器–解码器框架，用于铝板试样在单轴拉伸试验下热黏塑性行为的代理建模，同时考虑单调与循环加载以及应变率和温度的变化。输入数据由各种加载路径和条件下的序列式应力–应变对组成。该研究比较了不同的编码器架构，用于将高维输入空间映射到较低维的隐藏空间，再将其投影以预测应力。所评估的编码器架构包括门控循环单元、带注意力机制的GRU、时间卷积网络和Transformer编码器。结果表明，所考虑的所有编码器架构均实现了高准确度预测。

对于材料行为预测，注意力机制可与多种深度学习架构相结合，例如长短期记忆网络 [303, 304], 门控循环单元 [305] 和卷积神经网络 [306]。然而，Transformer也已被用于材料代理建模，如 [307], 中将其用于预测钢的单轴和多轴循环变形响应。该研究采用原始Transformer架构，并评估其在各种输入序列下的性能。在一种情况下，使用单一输入序列（应变）来预测单一输出序列（应力）。在另一种情况下，使用两个输入序列（例如轴向应变和扭转应变）来预测相应的应力序列。最后，该研究还考虑了多步时间序列输入，其中以应力序列作为输入，输出则为多步应力序列。

注意力机制也可应用于其他领域，例如预测成分–工艺–性能关系。例如，已提出一种对成分系数进行归一化的方法，其中通过逐元素乘法将电负性、热学描述符和物理描述符整合到系数矩阵中，从而生成能够捕获综合成分信息的合金因子 [308]。另一项应用是预测内嵌褶皱纤维增强复合材料的失效模式，其中采用U-Net架构作为编码器，并以强度、应力–应变曲线和失效模式作为输入数据 [309]。采用由注意力机制增强的编码器–解码器框架可提高预测准确度。

在一项较新的研究中 [310], , 作者提出了一种面向不同加载条件与代表性体积单元的三维晶体塑性模拟代理模型。利用晶体塑性模拟生成的合成数据，他们开发了一种基于自注意力机制的三维卷积神经网络，用以预测应力–应变曲线以及晶体学织构的演化。图16b展示了优化模型的架构，其中包括三个卷积层，随后是一个注意力层。所得结果与基于晶体塑性的仿真进行了比较，如图16b所示，针对织构演化。结果表明，所提出的模型在不同晶粒结构和几何尺寸下均具有有效性与鲁棒性，同时还显著提高了计算效率。

另一项近期尝试见 [311], , 作者通过结合仅编码器变换器架构与适当正交分解技术，加速弹塑性材料的多尺度分析。其目标是预测局部微观结构中物理状态变量的演化，从而加快多尺度分析中的微观尺度计算。图17a展示了基于有限元的变换器模型，包括微观离线阶段和宏观在线计算阶段。在线离线阶段，将随机循环加载路径下生成的高维微观应力场数据降维为系数数据，通过分解技术以少量模态表示关键信息。随后使用仅编码器变换器有效捕捉全局依赖关系。如图17a所示，多尺度有限元^2 方法与基于变换器的预测模型，在微观和宏观尺度冯·米塞斯应力场方面给出了高度吻合的结果。

为了将基于像素的数据（如场分布或微观结构图像）纳入计算，可以采用视觉变换器。其中一种模型是Swin Transformer，这是一种用于图像识别及相关计算机视觉任务的分层视觉变换器架构 [312]。其主要优势在于，它通过在局部、互不重叠的窗口内计算自注意力，降低了全局自注意力的高计算成本。各层之间会移动窗口划分，以实现跨窗口通信，使信息得以

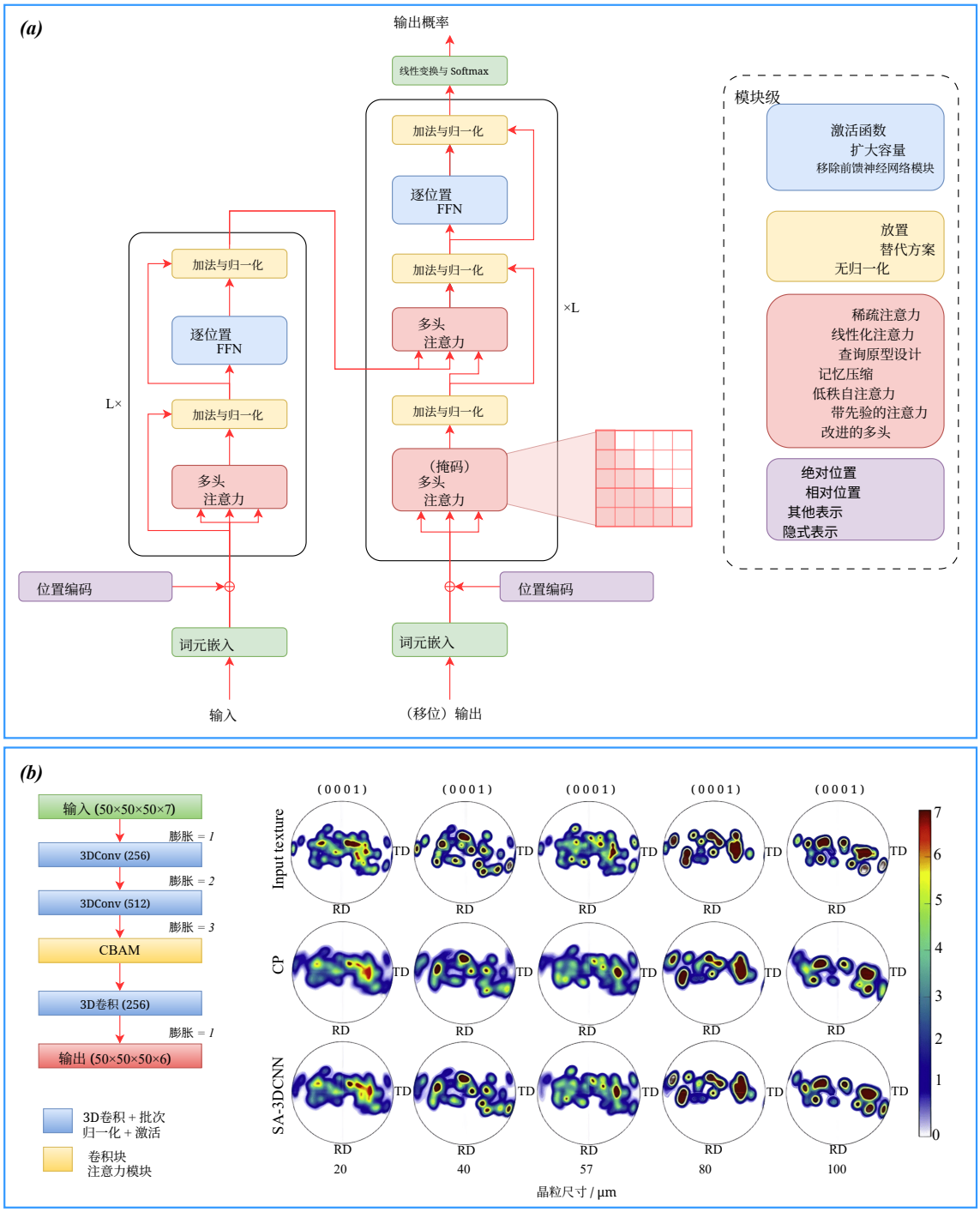


图16： (a) 由编码器块和解码器块组成的原始Transformer架构示意图。这些模块中的主要组成部分包括位置编码、多头注意力机制、前馈神经网络层和残差层 [297]。(b) 采用自注意力机制的三维卷积神经网络架构，其中注意力模块集成在三维卷积层中。所提出模型生成的预测织构演化图与不同晶粒尺寸的代表性体积单元的晶体塑性模拟结果的对比。相应的织构演化是在给定输入织构的基础上，在应变为0.2的双轴拉伸–压缩载荷下获得的 [310]。

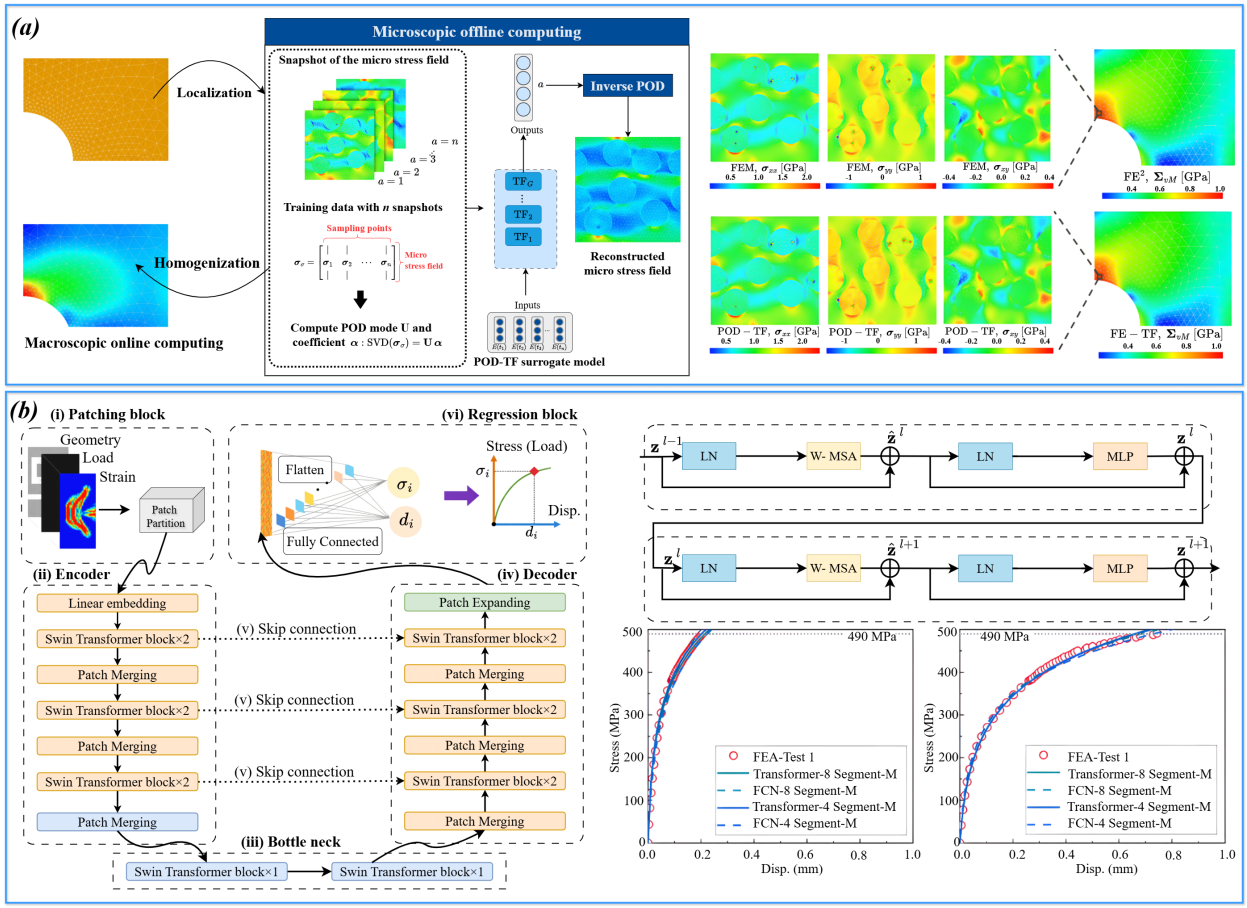


图17： (a) 所提出的基于有限元的变换器框架概览，该框架包含微观离线和宏观在线计算模块。在离线模块中，代表性体积单元的应力场被正交分解为系数，随后将这些系数输入变换器，以预测微观尺度应力场。将所提出模型预测的宏观冯·米塞斯应力场与有限元法结果进行比较，并将选定点处的微观应力分量与有限元预测进行对比 [311]。(b) 所提出的增强型变换器架构概览 [313]，，其中应变场图像作为输入，输出全场应力–位移数据。Swin Transformer 包含两个连续的变换器块，分别采用针对基于图像的输入而设计的层归一化、基于窗口的多头自注意力、基于移位窗口的多头自注意力和多层感知机层。将预测的应力–位移曲线与多个数据集中的有限元法结果进行比较。

使信息流贯穿整个图像，同时不会增加计算复杂度。 图17b展示了Swin变换器块，每个块均由一个层归一化层、一个多层感知机和一个注意力模块组成；第一个块采用基于窗口的多头自注意力，而后续块采用基于移位窗口的多头自注意力。研究 [313] 采用改进的Swin-U-Net [314] 模型从应变场中提取特征，并预测桥梁结构中混凝土带头钢筋接头的应力和位移响应。如 图17b所示，将图像块的基于像素的应变场数据输入U形Swin变换器，使模型能够预测应力和位移值。所得应力–位移曲线与有限元结果高度吻合，证明了该代理模型的稳健性能。

4.5. 图神经网络（图神经网络）

到目前为止，我们讨论了卷积神经网络和循环神经网络，它们分别作用于网格和序列等结构化数据，即二维和一维变量数组。然而，还存在一种更为通用的数据形式，可以纳入深度学习方法：图结构数据，如图18a所示。图神经网络（GNN）旨在利用这类数据 [315]。图由节点（顶点）和边（连接）组成，二者都可以具有相关特征。图结构数据的例子十分丰富，其中两个

表5： 图神经网络与卷积神经网络和循环神经网络的主要区别。

方面	CNNs	RNNs	GNNs
数据结构	规则网格（二维图像、三维体素）	序列（文本等有序数据、时间序列）	不规则图（任意拓扑）
局部性假设 tion	通过卷积核实现固定尺寸的局部感受野卷积核	序列局部性（前一时间步骤会影响当前值）	邻域局部性（由图边定义，尺寸可变）
置换不变性	不具不变性（旋转一张图像会改变像素网格）	顺序很重要（打乱词语会破坏含义）	对节点排序具有不变性
权重共享	在空间位置间共享权重（平移等变性）	在时间步间共享权重	在所有边/节点间共享权重（若为异构图，则采用关系类型特定的权重）（基因异质性）
归纳偏置	平移等变性（适用于图像）	时间/因果排序	关系归纳偏置（适用于实体和关系）
处理可变输入尺寸	通常固定输入 size (or 填充/池化）	支持可变长度序列	可自然处理任意尺寸的图和形状
信息流	通过.....进行分层特征提取卷积	序列式传播通过隐-藏状态	沿图进行的迭代消息传递边

如图18b所示。

传统的神经网络架构，如人工神经网络、卷积神经网络和循环神经网络，都假设输入尺寸固定，无法自然地处理不规则关系数据。在图数据中，不规则性是固有的：节点可能具有数量可变的邻居，邻居的排列具有置换不变性，而结构本身也承载着重要信息。图神经网络通过引入消息传递机制来应对这些挑战，从而扩展神经网络：每个节点从其邻居处聚合信息，更新自身的隐藏表示，并在多个层中重复这一过程。该过程使模型能够捕获节点特征和图拓扑。表5概述了卷积神经网络、循环神经网络和图神经网络之间的关键差异。

图神经网络有若干变体，它们都保持节点交换信息这一相同核心思想，但在结构、表达能力和训练行为上有所不同。一种突出的变体是图卷积网络（GCN） [316], , 如图18c所示，它采用卷积的消息传递视角，其中每个节点聚合来自其邻居的信息。当不同邻居应以不同的重要性水平做出贡献时，则使用图注意力网络（GAT） [317] 。图注意力网络将类似于Transformer的注意力机制融入图消息传递，从而使每个邻居获得学习得到的注意力权重，而不是被均匀平均。GAT的结构如图18d所示。此外还引入了图神经网络的其他新颖变体，如图变换器 [318]和图自编码器 [319]。

图神经网络已在计算力学中展现出众多应用，尤其是在本构建模和材料表征方面。这些应用包括但不限于各向同性弹性 [320] 和各向异性弹性 [321], 软组织力学 [322], 静力结构分析 [323], 有限元网格的图表征 [324], 疲劳寿命预测 [325, 326], 以及晶粒微观结构演化 [327]和缺陷预测 [328]。

为使讨论聚焦于本综述的范围，我们考察了采用图神经网络对永久变形进行建模的研究，并按照一种分类体系进行组织；在该体系中，图神经网络用于嵌入材料的微观结构特征和多晶结构，以及其他相关应用。

4.5.1. 用于微观结构表征的图神经网络

近年来，图神经网络作为分析多晶材料的有效深度学习框架，受到了广泛关注。在这种方法中，微观结构通常是由许多晶粒组成的多晶，并被表示为

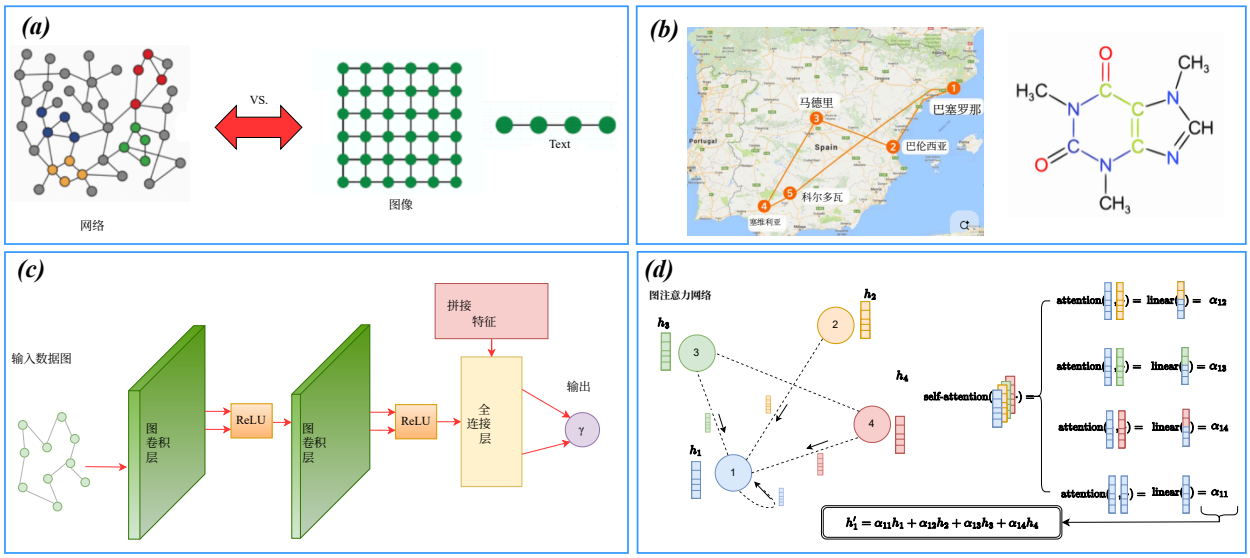


图18： (a) 不同数据类型的示意图，包括文本等序列数据、图像等网格数据，以及作为非规则类型的图数据。(b) 展示了图结构数据的两个示例：连接西班牙巴塞罗那与其他城市的道路图，以及由化学键连接的原子构成的分子。(c) GCN 示意图。输入层由特征矩阵构成，例如节点属性或独热标签。图卷积层聚合邻居信息，卷积层之间应用激活函数（通常为 ReLU），输出前设有一个全连接层。(d) GAT 示意图，展示了针对节点 1 的注意力机制，以及如何计算并聚合注意力分数以形成节点 1 的隐藏层表征。

一个图，其中每个晶粒都被视为一个节点，边则连接代表共享同一界面的晶粒的节点 [329]。这种表征以紧凑、简化的方式描述微观结构，同时保留了关键的三维邻域关系，而无需使用完整的场体数据。这一点十分重要，因为许多材料响应都受到相邻晶粒间相互作用的显著影响。

将微观结构表示为图，不仅可以纳入晶粒连通性，还能包含晶粒属性和晶界的详细信息。多晶材料可以通过分配给节点、边以及整个图的特征来描述 [330]。节点特征可包括晶体学取向、晶粒尺寸和形状、晶粒质心坐标，或局部力学性质和物理性质等量。为整个图定义的特征可以表示有效或汇总的材料响应，例如应力；这些通常是预测或推断所关注的主要量。

一项早期研究 [331] 采用图神经网络，同时捕捉各个晶粒的物理特性及其相互作用，并通过前馈网络将这些信息与目标性能相关联。N 个晶粒多晶微观结构的图表征如图19a 所示。对于每个晶粒，其三个欧拉角和晶粒尺寸等特征被编码为向量，而晶粒之间的相互作用则通过相邻晶粒的数量来描述。对于整个微观结构，利用定义晶粒连接方式的邻接矩阵构建特征矩阵。该图表征经过多个消息传递层处理，随后将得到的潜在表示输入前馈网络，以预测目标性能；在这项研究中，目标性能是有效磁致伸缩，如效果图19a 所示。

在 [332] 中采用了类似的方法，用于预测 α-Ti 微观结构的刚度和屈服强度，并纳入晶体学取向、晶粒尺寸和邻域连通性等关键晶粒属性。作者报告称，该方法在性能预测方面准确度很高，包括对未见过的微观结构也表现出色，并证明其基于图神经网络的模型优于三维卷积神经网络基线模型。

可以将其他晶体学特征纳入图神经网络的输入数据，以表征微观结构。在 [333], 所提出的框架从微观结构图像构建无向图，其中节点（晶粒）特征包括质心坐标、晶粒尺寸、以欧拉角表示的取向以及电导率值。边（晶界）特征也包括晶界厚度和电导率，如图19b所示。该数据集由通过沃罗诺伊镶嵌生成的三维多晶微观结构以及

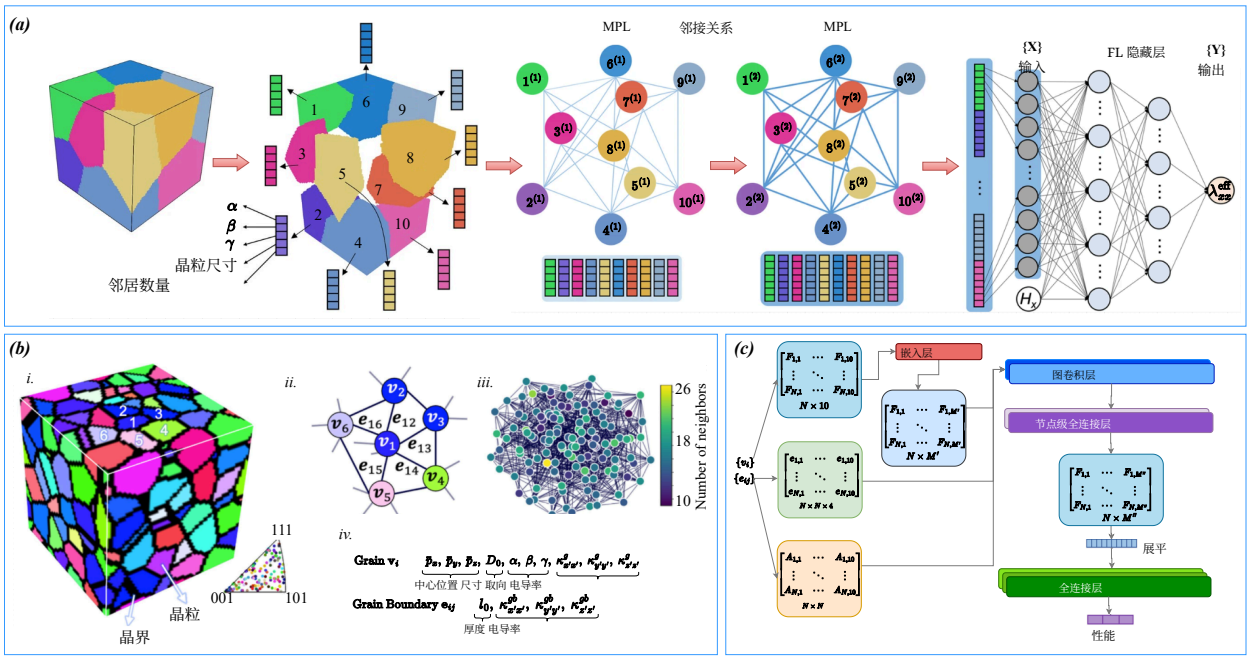


图19： (a) 10晶粒多晶微观结构的基于图的表征。每个晶粒由五个物理特征描述，包括欧拉角、晶粒尺寸和邻居数量，这些特征以特征向量的形式存储。随后将这些向量组合成特征矩阵。晶粒之间的连通性由邻接矩阵编码，其中数值1表示两个晶粒共享一条晶界，数值0则表示没有共享晶界。通过一系列消息传递层（MPL），逐步优化节点特征矩阵，最终生成图嵌入。每一层都根据从邻近节点收集的信息更新节点特征。使用更多MPL还可以捕捉非邻近节点之间的相互作用 [331]。(b) 数据集中的三维多晶微观结构示意图，晶粒根据其欧拉角着色，如反极图所示。该图展示了如何从微观结构构建无向图：晶粒作为节点，邻接关系定义边；还展示了生成的微观结构图，以及特征概览：节点特征表示晶粒属性，边特征则编码晶界特征 [333]。(c) GNN模型的架构，由图卷积网络层以及节点级和图级全连接层组成，用于基于(b)中所示的嵌入式微观结构进行性能预测 [333]。

处理后的电子背散射衍射图像，目标是预测有效离子电导率和刚度系数。如图19c所示，基于图的表征与邻域信息一同输入图卷积网络，随后经过节点级全连接层，再经过全局全连接层，输出预测属性。作者还研究了模型的外推行为以及其在迁移学习场景下的性能。

为捕捉多晶材料的各向异性弹性和非弹性性质， [330] 中的研究采用了与上述方法类似的图神经网络框架，但有一项关键区别。该模型旨在通过预测刚性旋转后的微观结构的响应，将性能预测推广到新的加载方向。为此，节点特征包含与晶粒级性质相关、且与目标响应有关的张量量。例如，对于镍基高温合金，目标是预测弹性模量；而对于铝，目标是预测屈服强度。在 [334], 中，作者提出了一种图神经网络框架，旨在捕捉用于多尺度材料建模的微观结构信息学。

随后，研究人员将 Ti-6Al-4V 等双相合金的微观结构嵌入图神经网络，以预测应力张量分量 [335]。在这项工作中，图卷积网络以微观结构属性（欧拉角、晶粒尺寸和相体积分数）以及施加的应变张量分量作为输入。该架构包含两个图卷积层，每层之后均接一个 ReLU 激活函数，并通过一系列全连接层生成最终预测。

近年来，已有多种新颖方法被提出，以进一步提升人工智能应用于微观结构表征时的鲁棒性。其中一种方法是， [336] 开发时序图神经网络，以对承受不同加载条件的多晶材料的跨尺度变形进行建模，同时考虑微观结构变化和局部相互作用。所提出的时序图神经网络模型如图20a所示，在每个

时间步进行增量预测。该模型由一个用于关联晶粒空间位置和局部相互作用的图神经网络模块，以及其后的循环神经网络模块组成。循环神经网络模块是 [287] 中提出并在第4.3.3节讨论的线性化 MSC 的一种变体。图神经网络用于嵌入晶粒的关键特征，例如连通性、晶体学取向和变形状态。在通过图神经网络捕获空间相关性后，提取的特征被传递至 MSC 模块，以考虑历史相关的变形和微观组织演化行为。输入数据通过代表性体积单元模拟准备，且应变增量与图神经网络生成的微观结构表示共同构成模型输入；输出则为演化织构的应力和欧拉角，如图 20b 所示。预测得到的极图与晶体塑性有限元法结果吻合良好，表明同时引入材料的空间属性和时间属性能够改善塑性行为的预测效果，因为微观结构及其变形历史均发挥着关键作用。

在另一种近期方法中， [337] 提出了一种改进的图注意力网络，用于捕捉双相 Ti-6Al-4V 合金微观结构中的晶粒间关系。该方法通过整合节点属性与图结构信息，能够预测应力–应变曲线和屈服强度等力学性能。如图 20c 所示，所提出的图注意力网络架构包含多个采用多头注意力的图注意力网络层，以捕捉节点级特征信息，并通过自适应特征聚合生成全局特征表征。输入由节点（晶粒）特征组成，例如欧拉角、晶粒尺寸，以及 α 相和 β 相的体积分数；还包括表示相邻晶粒间相互作用的边信息，以及施加的应变张量。输出为预测的应力张量。如图 20d 所示，预测应力与有限元法结果高度吻合，作者报告的误差小于 0.4

4.5.2. 图神经网络的其他应用

本节综述了几项将图神经网络应用于微观结构特征提取以外领域的研究。这些领域涵盖多尺度分析，以及在计算材料建模中表征场变量。其中一项研究 [338], 旨在为各向异性塑性构建坐标系不变的机器学习本构模型，并比较传统人工神经网络、循环神经网络以及一种融入先验信息的有向图方案等方法。另一项研究[339], 提出了一种通用方法，利用图神经网络将网格化材料或结构映射为图。该模型采用编码器–解码器架构，以近似材料和结构特征与位移、应力和应变等物理场之间的关系。模型由三个部分组成：编码器、消息传递模块和解码器。编码器利用人工神经网络将节点和边属性映射到潜在空间。在消息传递模块中，这些潜在表示也利用人工神经网络进行聚合和更新。最后，解码器将聚合后的潜在信息转换回位移、应力和应变等物理场输出。因此，整个框架实现了从几何形状、材料属性和边界条件到场变量的映射。作者称，这种表征可作为传统基于物理的方程求解器的代理模型，其性能优于类似问题中常用的卷积神经网络等基于图像的模型。

在多尺度分析中，计算成本往往是限制因素。 [340]提出了一种基于图神经网络的机器学习模型，用作任意时间步的微观尺度有限元求解器的代理模型，同时保留框架的多尺度特性。该模型纳入了微观应变、内变量、下一时间步的宏观应变以及其他几何节点特征等微观尺度信息。图神经网络预测下一时间步的微观应变，再将其与本构模型结合，以计算相应的微观应力，进而得到宏观应力响应。在多尺度分析中，该图神经网络框架取代了微观尺度积分点处的本构模型，从而显著加快整体计算。 [341], 介绍了一种类似方法，但仅关注微观尺度：利用图神经网络，根据有限元模拟预测多晶塑性中的应力响应。

*4.6. Kolmogorov-Arnold*网络（*KAN*）

在深度学习场景中，多层感知机用途广泛、应用普遍，通常被视为许多架构的骨干。然而，它们也存在若干广为人知的局限性。固定的激活函数可能会限制它们能够表征的行为范围 [342, 343]。此外，它们通常被视为黑箱或灰箱模型，其内部表征 notoriously 难以解释 [344]。此外，对复杂非线性依赖关系进行建模，通常需要构建更深、参数更多的网络 [345, 346]。这些问题推动了人们对替代架构的兴趣日益增长，这些架构具有更强的表达能力和更好的可解释性。

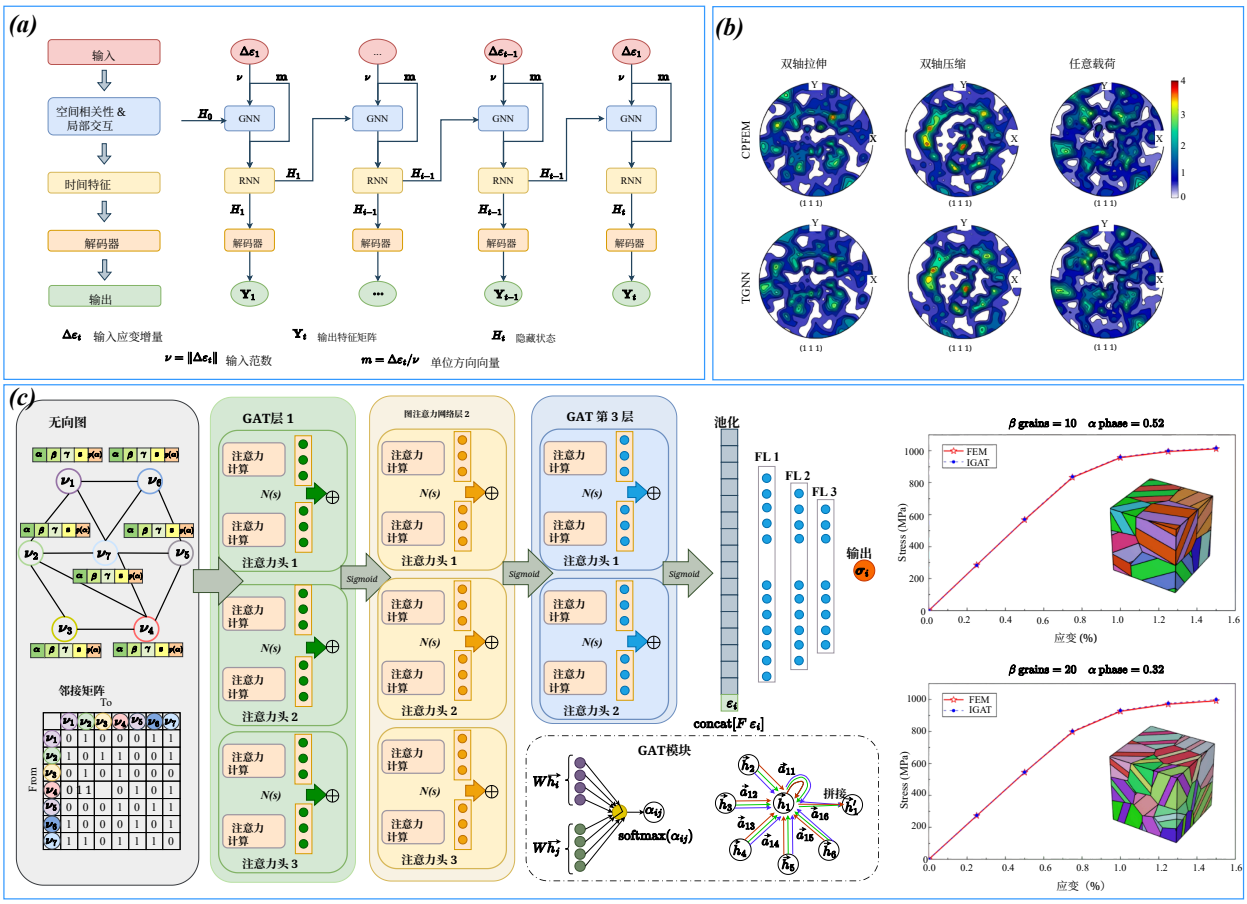


图 20： （a）文献 [336]提出的时序图神经网络架构。该框架针对时空问题，预测多晶合金的应力–应变响应和织构演化。图神经网络对多晶拓扑结构和变形状态进行编码，循环神经网络预测历史相关变量，解码器输出预测值。该架构融合了序列数据与基于图的学习。（b）图（a）中的时序图神经网络在双轴拉伸、双轴压缩和任意载荷下，对演化织构在相应平面上的极图所作的预测，并与晶体塑性有限元法模拟结果进行比较 [336]。（c）文献[337] 提出的改进图注意力网络架构，用于提取微观结构表征以预测力学性能。该模型包含三个具有多个注意力头的图注意力网络层。模型使用邻接矩阵表示代表性体积单元的无向图结构，其中 0 表示节点（晶粒）之间不存在连接，1 表示存在连接。图的节点特征包括欧拉角、晶粒尺寸和 α 相的体积分数，以及边信息。经过三个图注意力网络层提取特征后，通过全局池化将这些特征与应变信息拼接，形成全局表征，再输入全连接层以预测应力。（d）使用图（c）中的改进图注意力网络框架预测的特定体积分数下的应力值。与有限元预测的比较表明，该模型能够准确预测应力 [337]。

一个颇具前景的方向是开发 Kolmogorov–Arnold 网络（KAN） [347]。这些架构受到 Kolmogorov–Arnold 表示定理 [348–350]，的启发，该定理指出，任何连续多元函数都可以仅通过连续单变量函数的复合与求和来表示。换言之，即使是高度复杂的多元关系，也能分解为有序的简单一维变换链。然而，该定理纯属存在性定理，只保证此类分解存在，却未提供确定所需单变量函数的构造方法。由于缺乏构造性，该定理难以直接应用于深度学习场景。

为解决这一问题，人们提出 KAN，将其作为一种实用方法，通过把该定理的函数结构转化为可训练的神经网络架构 [347]，从而使该定理得以实际应用。在 KAN 中，分解得到的单变量函数通过基函数展开进行参数化，其系数由数据学习得到。这形成了一种计算图，其中非线性运算发生在边上，而求和运算发生在节点上 [351, 352],，如

表 6： KAN 与多层感知机的主要区别。

方面	MLPs	KANs
核心思想	借助线性变换与非线性激- 活	借助可学习一元函数与求- 表征
万能逼近	万能逼近器（经典定理）	基于 Kolmogorov–Arnold 表示定理
层	带权重和偏置的全连接层	由基于样条函数（或其他参数化函数）的层组成 一维函数
参数化	基体权重	分配给每个连接的样条函数等函数
可解释性	较低层：权重矩阵难以解释	较高层：学习到的函数通常具有可解释性
训练动态	标准深度学习优化	由于采用结构化表示，训练更加稳定
泛化行为	在数据充足并进行正则化时表现强劲	对光滑函数具有更好的归纳偏置
应用	通用深度学习	科学机器学习

图21a 所示。最简单的 KAN 架构与原始 Kolmogorov–Arnold 构造十分相似，实际上构成了一个两层网络。然而，这种最简设计在实际应用中可能存在局限，尤其是当单变量函数使用平滑基函数表示时，灵活性可能会因此降低。为克服这些限制，较新的 KAN 变体采用了更深或更宽的架构配置。这些扩展保留了学习自适应单变量变换这一核心原则，同时显著增强了模型捕捉复杂输入–输出关系的能力 [346, 353, 354]。表 6 重点介绍了 KAN 与多层感知机相比的关键区别。

与大多数深度学习方法不同，KAN 最近才被引入深度学习领域，其应用仍然有限，尤其是在塑性本构建模和材料表征方面。尽管如此，KAN 在科学机器学习领域展现出巨大的潜力。材料本构建模领域最早的应用之一见于 [355], ，其中使用单调输入凸样条作为 KAN 的基函数来建模超弹性材料。在这项研究中，模型使用应变场数据进行训练，并预测应变能密度以及第一类 Piola–Kirchhoff 应力。多项仿真测试表明，该方法能够鲁棒地捕捉超弹性的非线性行为，而且学习到的结构甚至可以提取出应变能的解析本构表达式。

KAN 相较于多层感知机的优势在于可解释性更强，因为它学习的是显式的一元函数，而非仅仅依赖权重矩阵。因此，可以直接检查和分析学习得到的模型。这些学习到的函数通常可以简化为解析表达式，从而从数据中提取有意义的函数关系。在一项此类尝试中， [356] 将 KAN 与针对其输出的符号回归框架相结合，从而推导出适用于超弹性材料的解析应变能函数。

KAN 的一项应用是对 GH4698 合金热变形过程进行热黏塑性本构建模 [357]。在这项研究中，研究人员构建了一个三层 KAN，其结构与多层感知机相似，如 图 21b 所示，并将其性能与传统多层感知机和唯象本构模型进行了比较。报告结果显示，KAN 架构的表现优于可比的多层感知机，在预测应力响应方面准确度更高。为了预测钢包耐火衬里的热塑性响应，该研究[358]采用 KAN，在利用数据驱动学习优势的同时保持物理合理性。该研究使用的 KAN 包含两层，以材料的几何形状及热学和力学性质为输入，并输出抗拉强度和抗压强度。

另一项近期研究 [359] 采用切比雪夫多项式构建 KAN 框架，以模拟颗粒材料的弹塑性行为。作者研究了多种多层感知机和 KAN 架构，包括串联式和并联设计。并联 KAN 架构的结构如图 21c 所示，其中输入包括孔隙比、应力张量、应变张量、塑性应变和应变增量，输出则包括孔隙比增量、应力变化和塑性应变的演化。研究报告指出

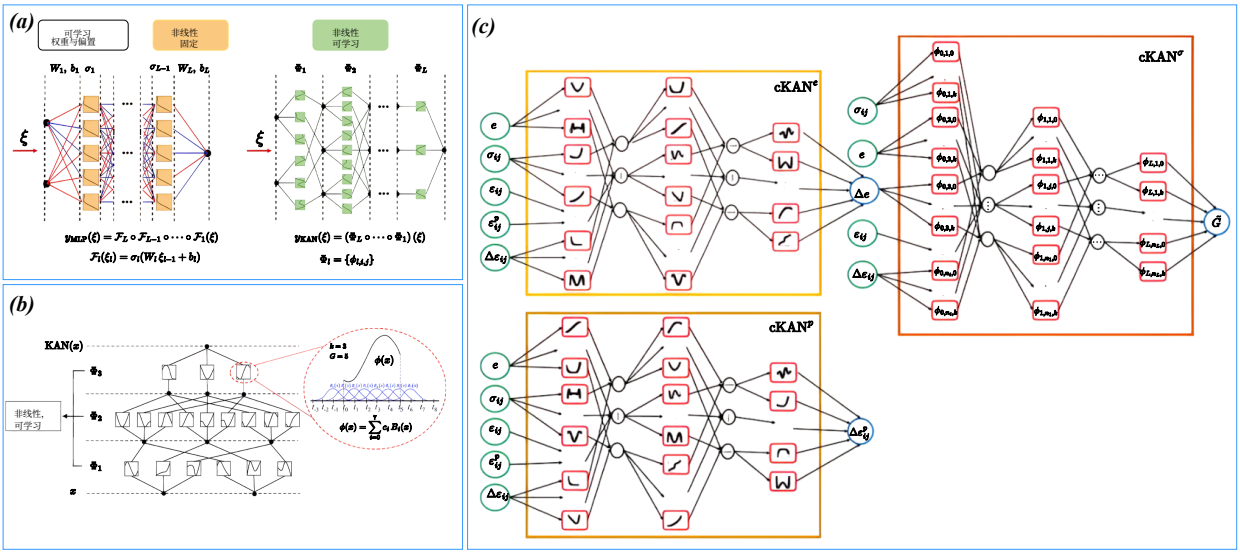


图 21： (a) 多层感知机和 Kolmogorov-Arnold网络架构的示意图 [346]。在多层感知机中，每一层都会将所有输入维度全连接并组合；而 KAN 会对每个输入维度分别应用一个一元函数，然后通过求和整合结果。图中，$\mathbf{W}_l$ 和 $\mathbf{b}_l$ 分别表示第 l 层的权重和偏置，σ 表示激活函数，而 $\mathbf{\Phi}_l$ 表示一个 Kolmogorov-Arnold网络层，即由一维函数构成的基体。(b) 三层 KAN 的架构，其中 B样条激活函数的阶数为三，使用五个区间 [357]。(c) 使用 KAN 进行弹塑性本构模型预测的架构，其中网络分别应用于弹性和塑性部分 ff [359]。弹性模型采用两个 KAN 模块：第一个模块以孔隙比、应力与应变张量、塑性应变和应变增量为输入，并预测孔隙比增量。随后将该模块的输出传递给第二个模块，由其预测切线剪切模量。对于塑性响应，KAN 模型使用相同的输入集，旨在预测塑性应变增量。

与多层感知机相比，KAN 框架能够提供更好的预测结果。此外，当在损失函数和架构中引入物理定律以增强 KAN 后，其性能进一步提升，尤其是在处理超出范围的数据和此前未见过的数据时。

4.7. 多模态融合模型

迄今为止，本综述涵盖了广泛应用于固体材料本构建模的多种深度学习方法，并特别侧重于旨在捕捉塑性变形行为的框架。本综述所考察的方法主要依赖于单一类型的数据表示，例如序列式、基于网格或图结构数据。然而，近期若干研究已探索通过适当的融合机制，在单一框架内组合多种数据类型。这种方法通常称为多模态性，由此产生的架构被称为多模态模型 [360]。每种模态都为底层物理现象提供互补视角，且往往在结构、统计特性和语义内容上有所不同。例如，空间模态可由微观结构图像构成，而时间模态可对应于在不同加载增量下记录的序列式场变量。多模态学习的核心目标是融入能够捕捉跨模态依赖关系的表征，以连贯方式对齐异构数据，并支持需要同时跨多种模态进行推理的任务。多模态框架依赖于多种技术，从每种模态中提取特征。因此，本节根据获取这些特征所采用的具体模型架构，对现有方法进行组织。

深度学习模型在表征学习和多模态融合方面往往表现更佳。它们还能够直接从原始数据中学习层次化表示，从而自动完成特征工程，而不必依赖人工设计的模态特定特征。一般而言，多模态融合策略分为四类，如图 22a 所示：早期融合、中间融合、后期融合和混合融合。在早期融合中，各模态的原始输入在进入模型的表示空间之前便被合并。在中间融合中，从各模态表示空间提取的特征会被合并，随后传递至决策模块。在后期融合中，各模态各自的输出或决策会被汇总，通常采用加权平均或多数投票的方式，以生成最终预测。混合融合则整合了上述三种策略的要素。

随着现代人工智能架构的发展，超越这一基本分类体系的更先进融合方法应运而生。这些方法依靠强大的表征学习技术来捕捉多模态特征，而不将各模态视为完全独立的数据流，因此融合的确切位置不再那么明确。近期提出的一种多模态融合模型分类体系，见 [361] 并如图 22b 所示，根据深度学习架构设计对融合方法进行分类。该领域内容广泛，超出了本研究的范围；不过，以下将讨论其中若干方案如何被应用于本构建模和材料表征文献，以融合不同的数据模态。

4.7.1. 基于编码器-解码器的融合

文献中采用的一种架构是基于编码器–解码器的融合方案，通常由两个主要部分组成，即编码器和解码器，如图 22c所示。编码器从输入数据中提取关键特征，并将其压缩为低维潜在表示，同时保留关键语义信息。随后，解码器利用输入的潜在表示生成预测结果作为输出。

在卷积神经网络和图神经网络部分（即第4.2 节和第4.5节）综述的若干研究中也采用了这种架构，通常用于微观组织图像数据。编码器–解码器框架中的融合可以在不同阶段进行：使用原始输入的早期融合、分层／特征级融合（如图 22c所示），或前文讨论的后期融合。

近期一项研究利用分层融合，从图像数据和序列数据中提取空间特征和时间特征，详见 [362]。该研究使用针对316L不锈钢的晶体塑性有限元模拟，考察多晶材料在单调拉伸加载和单轴循环加载下的塑性变形。作者提出了一种基于编码器–解码器架构的多模态特征提取框架，如图 22d所示。研究使用卷积神经网络从晶粒取向图像中提取空间特征。对于时间模态，研究考虑了两种数据：适用于单调加载、使用人工神经网络建模的历史无关数据，以及适用于循环加载、使用门控循环单元模型建模的历史相关数据。空间特征和时间特征经过分层融合后，传递至解码器进行预测。该多模态融合模型在预测历史无关和历史相关情形下的局部应力分布方面均表现出色，如图 22e所示。在晶体塑性领域， [363] 采用编码器–解码器架构，完全取代了晶体塑性有限元法的计算瓶颈，显著加快了用于预测变形梯度的仿真，同时还结合了岭回归模型 [364]。

4.7.2. 基于*GNN*的融合

众所周知，图神经网络适用于非欧几里得域，能够有效地利用图来表征数据，从而捕捉复杂的关系和相互依赖性 [365]。如第4.5节所述，图神经网络适用于微观结构表征，因为它们能够充分捕捉和提取空间晶粒特征及其与相邻晶粒的相互作用。这一能力也使图神经网络适用于多模态表征，尤其适合对材料微观结构与其宏观性能或响应之间的相互作用进行建模。上文提到的部分结合图神经网络的多模态融合技术包括：用于图数据的卷积层图卷积网络 [366]，以及为图结构数据引入注意力机制的图注意力网络 [367], 。

该研究 [368] 采用基于图神经网络的融合技术，通过整合三种模态来预测金属材料性能。如图 23a 所示，第一种模态由微观结构图像构成，研究使用名为 ResNet18 [222] 的 CNN 模型提取图像特征。第二种模态采用图卷积网络，提取由节点和边矩阵表示的晶粒级图特征。第三种模态对应工艺参数，并通过全连接网络进行表征。每个晶粒的图神经网络表征包括尺寸、形貌和位错属性；晶粒间关系则通过三种提出的邻接矩阵进行建模，这些矩阵能够定量捕捉晶粒间的拓扑相互作用。如图 23a 所示，这些模态采用特征拼接进行融合。经过这种中间层融合后，使用全连接网络预测材料的宏观性能，例如硬度。

近期另一项融合图特征和图像特征的工作见 [369], ，该研究引入卷积神经网络和图神经网络模型的集成，用于预测力学场，例如纤维增强复合材料微观结构中的应力分布。如图23b所示，卷积神经网络利用卷积层和ResNet模块提取微观结构图像特征，而图神经网络则用于表征复合材料中纤维的图结构。

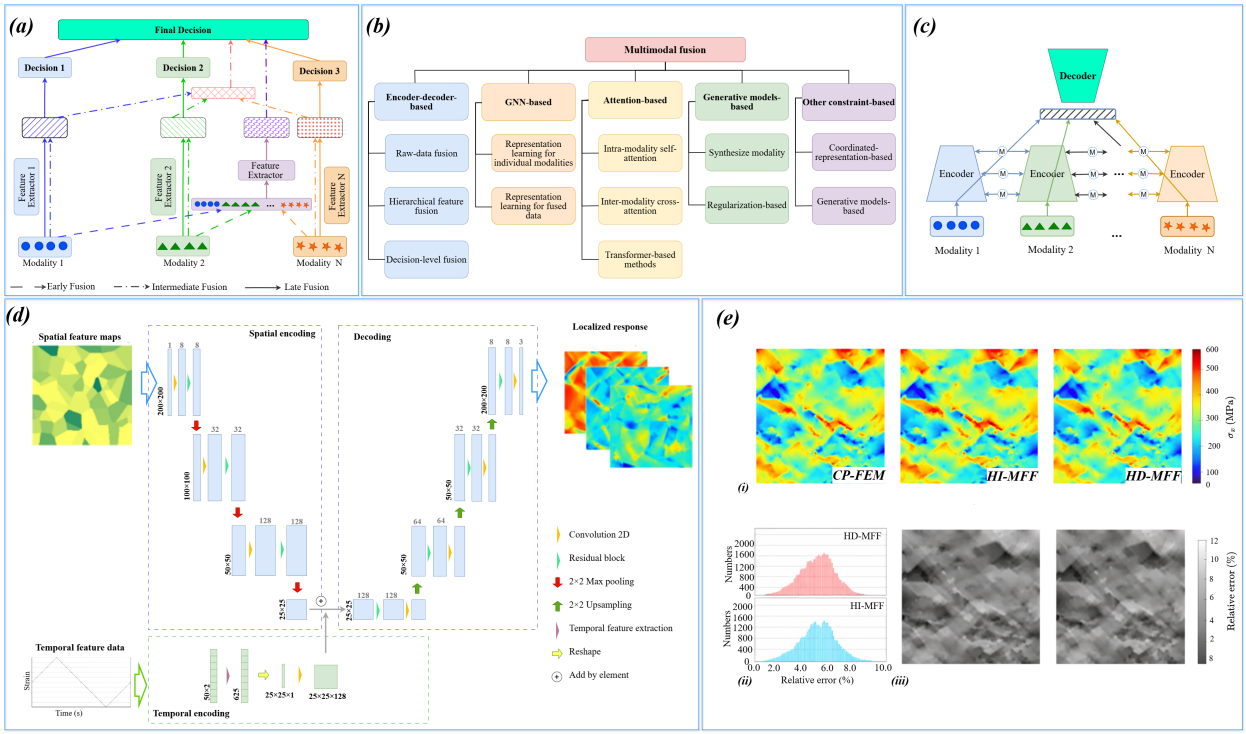


图 22： (a) 多模态融合方法的分类体系，包括早期融合、中间融合和后期融合。(b) 按深度学习架构原理划分的多模态融合模型分类体系。该分类体系包含五个主要模型族，多模态深度学习框架通常基于这些模型族构建 [361]。(c) 编码器–解码器架构中的分层特征融合方案，其中每种模态均经过编码并提取其特征，随后进行融合，再传递至解码器。(d) 文献 [362] 提出的多模态编码器–解码器模型。卷积神经网络从微观结构图像中提取空间特征，而人工神经网络和门控循环单元分别对历史无关和历史相关的应力–应变序列进行编码。在潜在表示空间中通过逐元素相加实现融合。(e) 单调（历史无关）和循环（历史相关）加载条件下预测的应力分布场，并与晶体塑性有限元模拟进行比较。相对误差图进一步展示了预测结果与真实值高度吻合 [362]。

图构建基于纤维之间的最近邻距离，重点关注纤维的位置及其间距。如图23b所示，卷积神经网络模块的输入是复合材料微观结构的二值表征，由一个 256×256 网格构成，其中基体相赋值为1，嵌入其中的纤维赋值为0。图神经网络捕捉纤维中心的坐标，并利用连接矩阵描述每根纤维的邻居。多模态融合不仅降低了数据需求，还提升了微观尺度分析中的应力场预测效果。

4.7.3. 基于*Transformer*的融合

Transformer的广泛成功促使其被应用于许多多模态学习范式中 [371]。在材料科学领域，尤其是在表征和塑性建模中，Transformer通常与图像数据相结合，以增强非局部注意力并捕捉微观结构属性之间的长程依赖。在其中一项应用中 [372], , 作者采用卷积神经网络从多传感器图像中提取特征，并将其与基于Transformer的注意力机制进行融合，以实现应力–应变预测，随后通过自适应优化策略进一步提升预测性能。类似地，该研究 [373] 将从晶粒演化的元胞自动机模拟中获得的图像数据，与从热压缩热机械测试中获得的应力–应变对相结合，并输入基于Transformer的注意力模型，以预测应力–应变行为。另一项研究 [374] 利用Transformer从各种微观结构及其组成部分中捕捉信息，开发了用于复合材料微观结构均匀化的代理模型。该模型能够预测给定微观结构及其嵌入纤维的与历史相关的均匀化应力–应变响应。研究采用卷积神经网络从非均质复合材料中提取特征，随后将这些特征输入受时序融合Transformer启发的门控残差网络 [375]。该门控残差网络融合

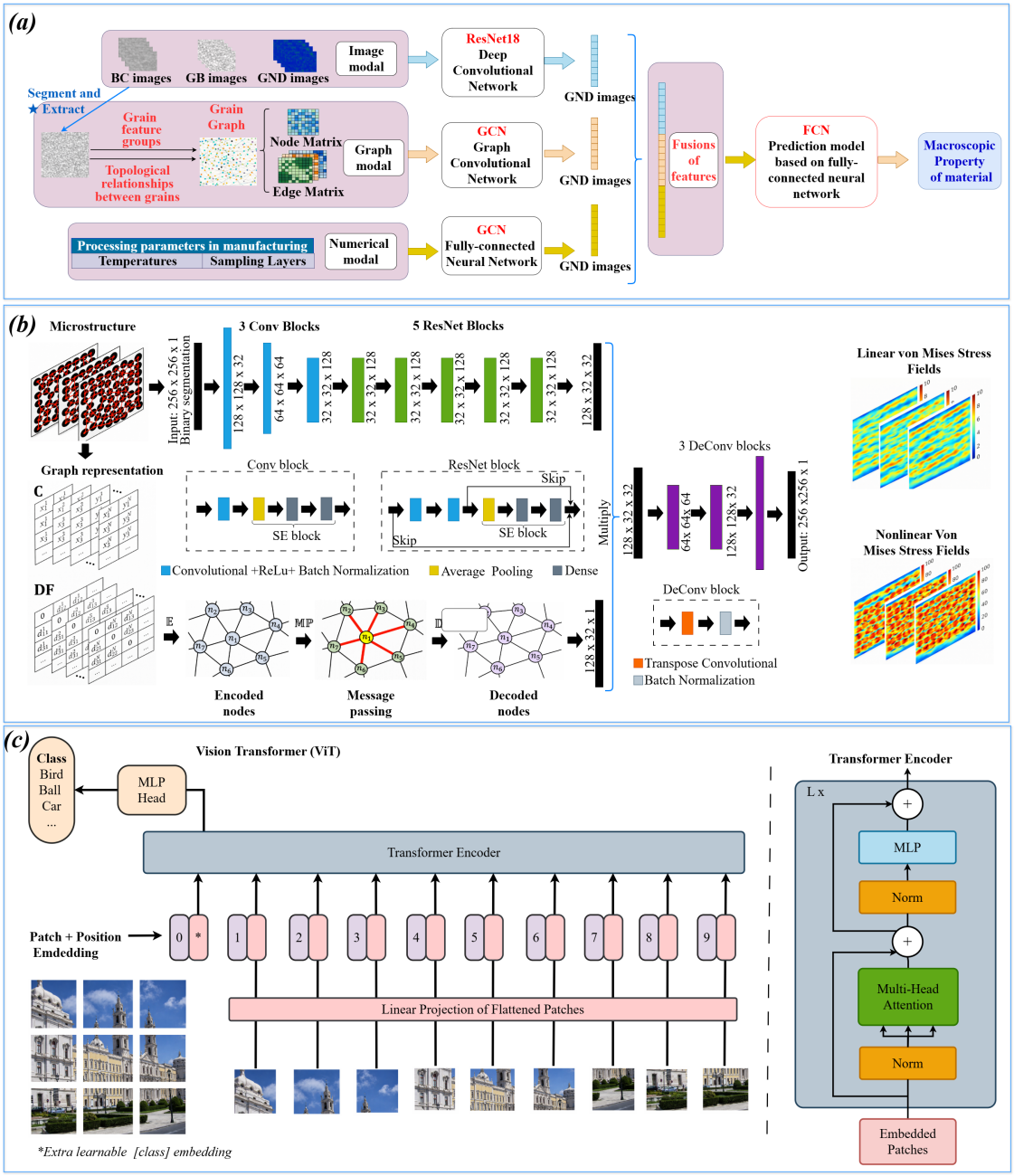


图 23： (a) 由卷积神经网络、图卷积网络和全连接网络组成的三模态融合架构示意图 [368]。微观结构图像作为基于 ResNet18 模型的卷积神经网络的输入。图卷积网络利用分割图像提取节点和邻接矩阵，而温度和采样层等制造工艺参数则作为全连接网络的输入。所有模态的特征拼接后形成融合表示，用于性能预测。(b) 用于纤维增强复合材料微观结构场预测的多模态融合架构 [369]。图像数据和图数据这两种模态分别输入卷积神经网络和图神经网络。提取出的特征表示复合材料图像中的纤维和基体特性，并通过逐元素乘法进行融合。该模型同时纳入卷积神经网络使用的复合材料二值表示，以及图神经网络的连接矩阵所编码的节点坐标和邻居距离。(c) 视觉变换器（ViT）的架构 [370]。输入图像被划分为固定尺寸的图像块，并通过线性投影分别嵌入。随后添加位置嵌入，并将生成的标记输入 Transformer 编码器，在其中应用注意力机制。

基于卷积神经网络提取的特征表征与材料非均质性数据相结合，实现了有效的多模态融合，从而提高了预测准确度。

多模态任务中Transformer的一种重要变体是视觉Transformer（ViT） [370], ，它将视觉数据与文本、图或传感器信号等互补模态共同处理 [376, 377]。其核心思想是将图像表示为图像块序列，使其与其他数据类型基于标记的结构相一致，从而使注意力机制能够在统一框架内学习跨模态交互，如图23c所示。这种设计使模型能够捕获图像中的长程依赖关系，同时整合来自其他模态的语义或结构信息。

一项近期研究 [378] 探讨了利用图像和表格数据进行基于Transformer的多模态学习，以预测热处理不锈钢的力学性能。所提出的多模态框架采用ViT架构，从微观结构图像中提取金相特征。输入的微观结构图像被划分为 224×224尺寸的图像块，其中每个图像块都包含晶界、相分布和碳化物形貌等金相特征。随后，这些图像块被展平为768维向量，并嵌入为词元，输入具有多层和多头注意力的Transformer中。Transformer输出所有图像块的隐藏状态，其中一个隐藏状态作为输入微观结构图像的全局表征。为实现多模态融合，研究采用另一个Transformer，将金相图像的隐藏表征与实验工艺参数的表格数据相结合。所提出的框架能够有效捕获跨模态关系，并预测硬度和磨损行为等材料属性。

对于非均质材料的本构建模，研究 [379]采用了由编码器和解码器组成的ViT。编码器从图像中提取微观结构特征，而以掩码Transformer实现的解码器则将从微观结构图像中提取的潜在几何特征与序列应变数据相结合，以预测应力响应。类似地，研究 [380]采用了相近的方法，使用ViT处理非均质材料，具体而言是二维纤维增强复合材料。该研究利用包含微尺度应变场高分辨率图像的大型数据集，来捕捉相应的应力场。

基础ViT是指大型预训练ViT，可作为通用骨干网络，适用于广泛的下游视觉任务。这些模型旨在从海量数据集中学习丰富且可泛化的视觉表征，随后可通过微调或基于提示的方法适配特定任务。近期，研究 [381] 探索了利用微观结构图像进行材料性能预测的基础ViT。在该研究中，使用了三种ViT，包括CLIP [382], DINOv2 [383]和SAM [384]。其中一项应用是根据仿真获得的数据预测两相微观结构的弹性模量：将仿真生成的三维微观结构图像划分为二维切片，并输入ViT以提取特征。该研究还利用文献中的实验数据，探究了镍基和钴基高温合金的硬度预测。这项工作为材料科学开辟了新途径，表明基础预训练ViT无需在领域特定数据上进行额外训练或微调，即可用于科学预测。

4.8. 总结

本节回顾了文献中应用于材料宏观尺度和微观尺度的各种深度学习方法。据我们所知，本节依据这些方法及其相应应用和变体进行分类。最常用的方法是人工神经网络，其应用包括屈服函数预测、传统本构模型的参数识别，以及作为各种塑性模型的代理模型，用于预测宏观尺度或多尺度分析中的材料响应。这些应用通常依赖非时序数据集进行单时间步预测，因此忽略了历史依赖效应，而这不适用于路径相关材料。这一局限促使人们采用循环神经网络及其变体；这类方法非常适合通过处理序列式应力-应变历史等时序数据来捕捉路径依赖，从而更准确地预测塑性材料响应。

对于基于图像的数据，图像特征提取至关重要，因此卷积神经网络得到广泛应用，并已用于微观结构表征，以及材料属性和响应的预测。我们还回顾了较新的先进方法，例如基于注意力机制的Transformer架构。这些架构能够捕捉短程和长程依赖关系，通常优于循环神经网络，尤其是在处理超长序列时；循环神经网络可能会受到内存限制的影响。此外，图神经网络在微观结构特征提取与表征方面展现出良好的性能，有助于有效衔接

多尺度材料分析中的不同尺度。KAN和多模态数据融合技术等新兴方法，也展现出进一步改进材料塑性变形分析的巨大潜力。

总体而言，深度学习方法在塑性分析方面展现出巨大潜力，因为它们能够纳入多种数据集，不受材料分析维度或尺度的限制。然而，这些方法往往存在可解释性有限、对物理原理的融入不足等问题，因此有必要探索下一节将讨论的替代方法。

5. 物理感知神经网络（PANN）

尽管近年来数据驱动机器学习和深度学习技术取得了令人瞩目的进展，但它们在计算力学和基于物理的分析中的应用仍然有限。这些模型擅长学习观测数据或计算数据中的映射关系；然而，它们通常是难以剖析的黑箱预测器，尽管取得了经验上的成功，却缺乏清晰的数学基础和可解释性。它们无法从复杂的高维系统中提取有意义且可解释的信息，再加上忽视底层物理定律，可能导致不合理或可疑的预测，并最终造成较差的泛化性能 [385–387]。由于完全依赖数据，传统机器学习/深度学习模型通常缺乏对其所建模系统支配性物理原理的内在理解。它们的预测能力与训练数据集的分布密切相关，而训练数据集通常仅涵盖特定的边界条件、材料类型和离散化方式。因此，对于未见过的几何形状、加载情景、材料或边界条件，它们无法做出可靠推断，因而对物理现象的泛化能力较弱。因此，这些模型往往难以进行外推，会违反基本的守恒原理，而且需要大量且昂贵的数据集；对于许多科学与工程应用而言，这类数据集实际上难以获取 [40, 388]。

纯数据驱动模型的这一不足，因科学领域及物理系统计算分析中的现实情况而进一步加剧：几乎不可能构建涵盖所有相关条件的完备数据集。因此，将先验知识融入数据驱动流程不仅合理，而且必不可少，有助于引导预测得出物理上可行的解。根据物理定律融入数据驱动计算的程度，这些方法可分为四类，如图 24a 所示。纯数据驱动方法（如前一节综述所述）完全不考虑底层物理定律，仅依据现有数据生成预测。与之相反，纯基于物理的模型假定所有控制定律和理论公式均已知，因此完全依赖这些原理，无需任何数据。其余的混合方法则代表介于两者之间的方案，将不同程度的数据与物理先验知识结合起来。这些方法将观测数据与控制方程无缝整合，尤其适用于数据集不足、物理规律仅部分已知或对底层工艺的认识不完整的问题。

将物理定律、约束或结构嵌入学习算法，已推动多个领域取得重大进展，包括计算力学 [385]，固体力学 [40]，流体力学 [386]，量子力学 [389]，扩散过程 [390]，电子学 [391] 以及材料建模与设计 [392]。在现有方法中，人工神经网络已被证明是整合此类先验知识最有效的框架，能够构建物理一致性更强、数据效率更高且泛化能力更好的模型。

为此，[393] 的一项开创性研究提出了物理信息神经网络（PINN）的概念，其灵感来自自动微分以及时空离散算子方面的进展 [394, 395]。其核心思想是将基于物理的约束直接嵌入神经网络，使训练过程得到的解天然满足控制物理定律。此后，该领域迅速发展，众多方法相继提出，旨在将物理原理融入深度学习架构。已有数篇全面的综述论文梳理了物理信息神经网络及相关方法的发展现状 [40, 385, 386, 388, 392, 396–399]。

然而，目前仍缺乏针对物理信息神经网络（PINN）背景下的本构建模、材料表征，尤其是塑性的详细文献综述。这一空白促使我们纳入本节，对这些主题进行深入探讨。在物理信息神经网络（PINN）文献提出的各种分类体系中，我们采用一项研究提出的通用且具有描述性的分类 [388]，，将物理增强神经网络（PANN）分为四种不同类型：物理引导神经网络（PGNN）、物理信息神经网络（PINN）、物理编码神经网络（PENN）和神经算子（NO），如图 24b 所示。

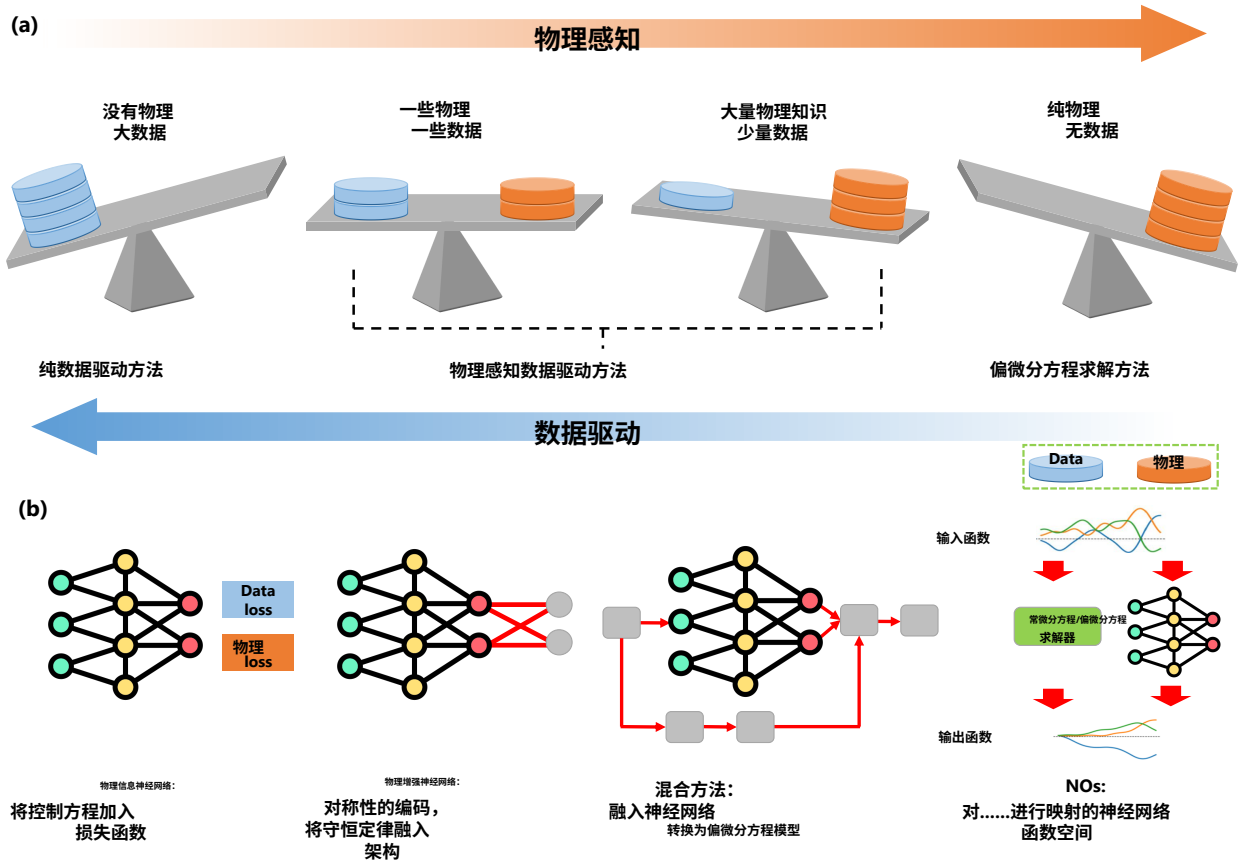


图 24： 数据驱动方法与基于物理的方法之间关系的示意图，展示了通过逐步将物理定律、约束和概念纳入问题求解过程中，从纯数据驱动方法（如深度学习）向完全基于物理的求解策略过渡的过程。

物理引导神经网络（PGNN）指传统的深度学习方法，其输入数据由物理模拟或实验测量生成。在这种设置下，深度学习框架由数据引导，而这些数据本身体现了物理概念和行为，并非任意或非结构化的数据集。对于其余三类，我们将在后续章节简要介绍其定义，并综述它们在材料建模与表征中的应用。值得注意的是，为了保持通用性和一致性，本节将这类更广泛的方法统称为物理感知神经网络（PANN），并据此为本节命名。

5.1. 物理信息神经网络（*PINN*）

为了在科学计算中描述物理现象，通常采用数学表述，并以强形式表示。这些表述由控制方程以及适当的初始条件和边界条件组成，它们共同施加约束，使解在整个定义域内都必须满足这些条件。控制关系通常采用线性或非线性常微分方程或偏微分方程（ODEs 或 PDEs）的形式。众所周知的例子包括拉普拉斯方程和泊松方程，以及波动方程等 [400]。在训练物理引导神经网络（即基于深度学习的框架）时，将这一广泛的理论框架作为辅助约束纳入其中，可以把有价值的物理知识嵌入学习过程中，从而提高模型的可靠性和一致性。

典型物理信息神经网络框架的示意图见图 25a。该框架通过在损失函数中引入惩罚项来施加已知的控制方程，从而在优化过程中抑制对物理约束的违反。将空间变量x 和时间t 等时空变量作为输入提供给模型，以预测控制偏微分方程对应的解场（例如u），从而实现对广泛物理

系统的近似。除融入物理知识外，其内部神经网络结构由隐藏层和激活函数组成，与物理引导神经网络模型中使用的标准深度学习架构相似。

生成预测结果后，结果会经过自动微分机制，该机制会计算相对于输入变量所需的时空导数。这些导数经过整合后生成基于物理的残差项，并纳入损失函数。总损失函数包含数据失配 $\mathcal{L}_{Data}$、偏微分方程残差误差 $\mathcal{L}_{PDE}$、边界条件偏差$\mathcal{L}_{BC}$以及初始条件 $\mathcal{L}_{IC}$的贡献。相应的权重为w_d、w_P、w_b和w_i，如图 25a 所示。这些权重可用于在训练过程中调整各项约束的相对重要性。通过在整个定义域内选定的配点处纳入强形式残差，我们确保学习得到的解满足控制方程[403]。

随后，计算出总损失后，将其与预先设定的容差阈值 ϵ进行比较。如果误差仍高于该阈值，则通过反向传播更新网络权重和物理系数，直至满足容差要求。由于物理增强型损失函数具有高度非线性且包含多项，物理信息神经网络的训练颇具挑战，可能导致收敛困难和数值不稳定性，体现出一种权衡关系 [385, 388]。下文将回顾物理信息神经网络在材料本构建模和表征中的应用，并在后续各节中根据损失函数所包含的项的类型进行分类，这些项用于在计算过程中施加物理约束。

5.1.1. 作为约束的本构关系

为在用于经典弹塑性的物理信息神经网络中施加基于本构模型的约束，可以将三个组成部分纳入损失函数，即屈服函数、流动法则和硬化定律。在一项研究中， [404], 采用人工神经网络，以当前应力和应变值以及应变增量作为输入，预测应力增量。为在架构中引入物理规律并构建物理信息神经网络，将屈服函数的残差纳入总损失项，从而对 J2 塑性和 Cam-Clay塑性的塑性一致性条件进行强制约束。所提出的架构在有限元法中实现，并应用于受拉三维杆件的仿真，成功准确地预测了场变量。

在另一项研究中， [405], 利用针对序列式应变张量数据设计的门控循环单元模型，将基于本构模型的附加项纳入物理信息神经网络的损失函数。附加损失项包括塑性功率条件、应力三轴度和 Lode参数。采用虚拟场方法定义本构模型，无需借助有限元法，从而提高计算效率 [406, 407]。门控循环单元中的残差连接用于捕捉历史效应并施加物理约束，使得无需带标签数据即可进行训练。训练后的门控循环单元模型被纳入一个框架，其中用户定义的子程序与有限元法耦合，并将计算得到的应力数据传输至 Abaqus 求解器 [408]。

图 25b 展示了 [401] 中提出的一种基于物理信息神经网络的学习方案架构，该方案面向弹塑性材料。该模型是一个受本构模型的物理概念约束的人工神经网络，这些物理概念称为 Karush-Kuhn-Tucker（KKT）条件，用于描述弹塑性行为。这些条件体现了屈服函数的凸性，并定义了三种基本的力学结构，用以连接屈服准则、流动法则和一致性要求，具体表示为

$$\begin{cases} f(\sigma, q) \leq 0 \\ \Delta\lambda \geq 0 \\ \Delta\lambda f(\sigma, q) = 0 \end{cases} \tag{21}$$

其中，$f(\sigma, q)$根据应力和内变量定义， λ 为塑性乘子。KKT条件意味着应力状态始终位于屈服面内或屈服面上。塑性乘子被限制为非负值，这意味着塑性流动只能随时间向前发生，绝不会反向。最后，屈服条件与塑性乘子相互耦合，以区分弹性和塑性状态。在 [401], 中，这些KKT条件被纳入损失项，表示为

$$\mathcal{L}_{cons} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \| \text{ReLu}(-\Delta\lambda_i) \| + \| \text{ReLu}(f_i) \| + \| \text{ReLu}(\Delta\lambda_i f_i) \| \tag{22}$$

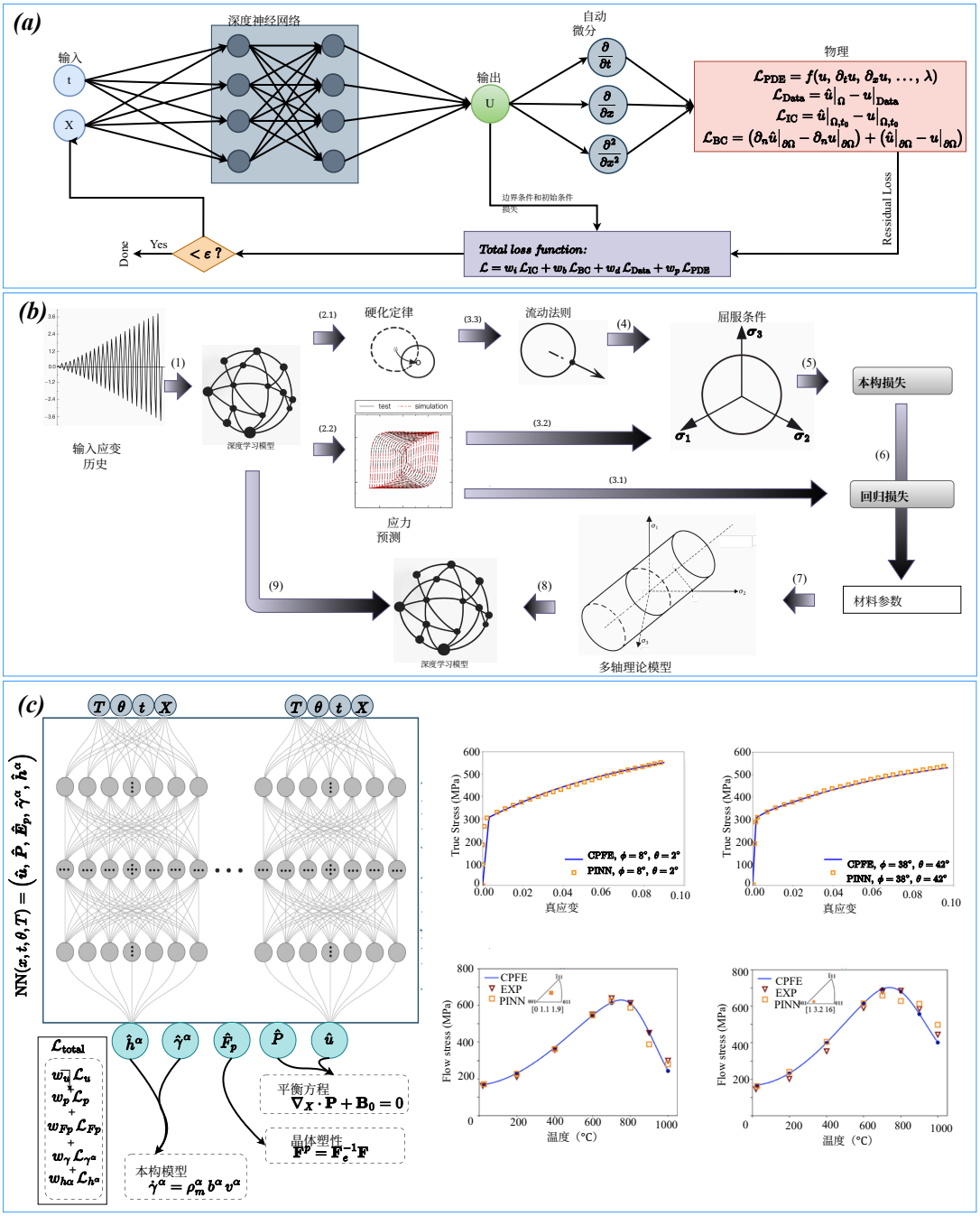


图 25： (a) 典型物理信息神经网络的示意图，其中包含深度学习模型，以及由数据损失、偏微分方程损失和初始及边界条件损失组成的损失函数；这些损失在模型中加以约束，以捕捉物理定律。(b) 基于晶体塑性残差的物理信息神经网络学习方案，其中约束的物理损失包括基于塑性的参数，如硬化定律、流动法则和屈服函数。本构损失与数据损失共同用于训练单轴情况的模型，再通过迁移学习将训练好的模型应用于多轴案例研究 [401]。(c) 文献 [402] 提出的物理信息神经网络框架，通过平衡方程、晶体塑性变形梯度以及剪切应变增量的本构模型等物理定律来捕捉力学性能。损失函数中考虑了多个损失项。该模型应用于幂律晶体塑性模型，在不同取向角下预测的应力-应变曲线与晶体塑性有限元法结果吻合良好。位错密度晶体塑性模型的物理信息神经网络模型，在一系列温度和滑移系条件下的预测结果也与晶体塑性有限元法结果及实验应力吻合良好。

如图 25b 所示，该模型先针对单轴情况进行训练，然后迁移用于多轴塑性情况。为捕捉土体材料的弹塑性， [409] 本研究在 PINN 损失函数中除应力张量外，还将孔隙比作为数据损失项纳入其中。此外，还将本构模型（CM）中的增量应变分解纳入损失函数，以表示物理方程的误差。如此一来，无需添加显式的塑性屈服函数或硬化规律，同时还能确保与现有实验数据相容。

对于疲劳等循环塑性应用， [410] 研究将人工神经网络输出对偏移塑性应变张量以及应变记忆面半径的导数纳入物理损失项；这两个参数用于定义循环滞回环。训练集由这两个参数、偏移背应力张量和累积塑性应变组成。为统一应力-应变滞回环，将拉伸和压缩分支的数据点旋转并平移，用于训练铜在完全反向应变控制加载下的循环硬化和非Masing行为。类似地，对于循环塑性， [411] 研究将嵌入 KKT 条件中的弹性和塑性定义纳入其中，并以冯·米塞斯塑性中的流动法则进行表述。为确保预测与偏量背应力行为相关的不确定性，将背应力张量的迹及相应的塑性应变纳入损失项。

晶体塑性（CP）本质上是通过施加离散剪切应变步，增量式求解应力–应变演化方程。为此，可在基于 CP 的材料建模中利用物理信息神经网络（ PINN ），以纳入滑移系的剪切应变。在其中一项研究中 [412], , 作者定义了一种与 CP 耦合的 PINN，用于捕捉面心立方材料中的晶粒级响应。输出为应力张量和剪切应变增量，并用于计算数据损失。对于物理损失，则将滑移抗力残差加入损失项。为扩充训练数据，作者考虑了滑移剪切的方向，以学习反向加载数据。此外，该模型还可通过迁移学习应用于任意路径加载问题。类似地，研究 [413] 采用一种基于人工神经网络（ANN）的 PINN，并加入内变量等额外的 CP 输入参数，以预测增量剪切应变。

如 [402]所示，PINN 可集成到晶体塑性有限元法（CPFEM）框架中，以预测大变形下晶体材料的行为。在这项研究中，作者选取了两种本构模型，由 PINN 构建代理模型，分别为幂律模型和位错密度模型。对于幂律本构模型，输入为时空变量和晶体学中的微观结构取向，网络输出包括位移、塑性变形梯度、第一类 Piola-Kirchhoff应力、柯西应力、真实应变、每个滑移系的塑性剪切应变率以及硬化参数。研究采用长短期记忆网络架构，以考虑材料响应的率相关性。对于位错密度模型，则考虑温度变化，并使用基于多层感知机（MLP）的 PINN 作为代理模型，如图 25c 所示。温度作为额外输入加入网络。该模型通过将平衡方程、晶体塑性关系以及剪切应变增量本构方程的残差纳入损失函数来施加约束。因此，网络的总损失可表示为

$$\mathcal{L}_{total} = w_{\mathbf{u}}\mathcal{L}_{\mathbf{u}} + w_{\mathbf{F}_P}\mathcal{L}_{\mathbf{F}_P} + w_{\mathbf{P}}\mathcal{L}_{\mathbf{P}} + w_{\gamma^\alpha}\mathcal{L}_{\gamma^\alpha} + w_{h^\alpha}\mathcal{L}_{h^\alpha} \tag{23}$$

其中， $\mathcal{L}_{\mathbf{u}}$ 是用于施加边界条件的位移损失， $\mathcal{L}_{\mathbf{F}_P}$ 表示塑性变形梯度损失，它通过防止材料发生体积变化来施加不可压缩条件， $\mathcal{L}_{\mathbf{P}}$ 是第一 Piola-Kirchhoff 和柯西应力损失，用于通过平衡内应力与外力来施加平衡条件， $\mathcal{L}_{\gamma^\alpha}$ 表示所有 18 个滑移系的滑移系损失， $\mathcal{L}_{h^\alpha}$ 是硬化损失，用于捕捉 PINN 模型中的复杂位错相互作用。如图 25c 所示，将两个 PINN 用作幂律模型和位错密度模型的代理模型时，其预测的应力结果均与 CPFEM 结果吻合良好。

各向异性塑性也可以通过利用物理信息神经网络应用进行研究。为此，该研究 [414] 探讨了将复合材料的微观结构表征作为非序列数据、将应力-应变曲线作为序列数据，并利用融合物理约束的门控循环单元对其进行处理，以构建物理信息神经网络。图像数据通过卷积滤波器进行嵌入，其中包含孔隙率、体积分数、纤维尺寸和温度信息，并通过跳跃连接传递至门控循环单元的输出端。随后，这两条数据流在融合基于物理的损失函数的多层感知机中进行组合。为捕捉复合材料的各向异性行为，物理损失包括三个不同方向上的应变损失、等容非弹性应变损失以及应变能密度损失，从而确保准确预测复合材料的行为。

5.1.2. 作为约束的热力学定律

材料变形过程本质上受到热力学第一定律和第二定律的约束。热力学一致本构建模的一项关键优势在于，包括屈服函数、流动法则和硬化定律在内的基本塑性关系，可以由两个热力学势能函数，即自由能和耗散势推导得到 [415]。在物理信息神经网络架构中，可以利用基于热力学的损失项来强制塑性功单调增加并保持热力学一致性，如 [416]所示。在这种方法中，将塑性耗散作为基于物理的正则化成分纳入损失项，并约束其保持非负，从而在不存在损伤和热传导的情况下满足热力学第二定律 [417]。

在一种更广泛的方法中，研究 [418] 通过将亥姆霍兹自由能、耗散率和熵纳入通用表述，引入了基于物理、由热力学一致条件推导出的损失项。深度学习方法的核心架构是循环神经网络，其中施加热力学约束可构建热力学一致的框架。在该框架中，循环神经网络描述受热力学第二定律约束的内部状态变量演化，而人工神经网络则根据应变、内部状态变量和温度输入预测亥姆霍兹自由能。

在 [419], 中，为了捕捉颗粒材料的弹塑性行为，采用门控循环单元推断更新后的塑性应变。随后，使用三个基于多层感知机的子网络预测弹性自由能、塑性功和耗散率，这些量都与热力学定律相关。该网络将这些热力学项的贡献纳入损失函数，从而确保塑性应变预测的一致性。最后，通过自动微分对总自由能关于应变求导，以获得应力。同样，研究 [420]在多层感知机的损失函数中，将亥姆霍兹自由能和耗散能作为基于物理的损失项；该多层感知机的输入是由LSTM网络预测的塑性应变。

5.1.3. 将偏微分方程作为约束

在一些用于计算力学研究的物理信息神经网络应用中，问题的控制方程以强形式甚至变分形式纳入损失函数，以确保物理容许性。核心思路是将控制方程的残差（例如动量残差）作为损失项的一部分，从而在数据驱动损失与基于物理的损失之间形成权衡。这种方法通过约束预测结果，使其保持物理一致性，并防止偏离容许解。

在一种此类方法中，研究 [421] 采用物理信息神经网络对颗粒材料进行建模。静水压力作用下，粒间接触和摩擦强化会使其刚度和抗剪强度增大。在其公式中，控制偏微分方程作为额外约束纳入物理信息神经网络的损失函数。如图 26a 所示，损失函数由虚功原理推导出的控制方程强形式构成，并包含二阶项，这有助于保持切线刚度矩阵的凸性。损失函数还纳入应力–应变对称条件，并在网络输出中明确施加应力–应变增量，以确保时间一致性。该模型采用双损失公式，将力–位移对和应力–应变对作为训练输入，从而增强人工神经网络的对称性。此外，该模型经过泛化，可捕捉与岩土材料相关的复杂非线性弹塑性行为，例如路径相关性、循环硬化效应和压力敏感性。

在[424, 425]中可以找到类似的方法，即将控制偏微分方程的残差纳入人工神经网络的损失函数。另一项研究 [426]将物理控制方程纳入神经网络的方法推广至分析非均质材料的微观结构演化。所提出的框架采用了一种网络架构，在人工神经网络之前增加了一个傅里叶特征层，并采用多输出方案和自适应学习策略。该架构通过将控制方程的强形式和弱形式均纳入损失函数，对传统物理信息神经网络进行了扩展，从而避免产生不符合物理规律的预测，同时利用计算域内的无标签数据。该框架应用于多种与时间相关的问题，包括多孔材料的弹性动力学、由相场方程描述的微观结构演化，以及 Eshelby夹杂问题。

近期一项研究 [427] 比较了两种将控制方程嵌入损失函数的方法：强形式配点法和 Deep Ritz方法，并分别用于正向问题和反问题。基于配点的强形式方法将数据点处的残差与

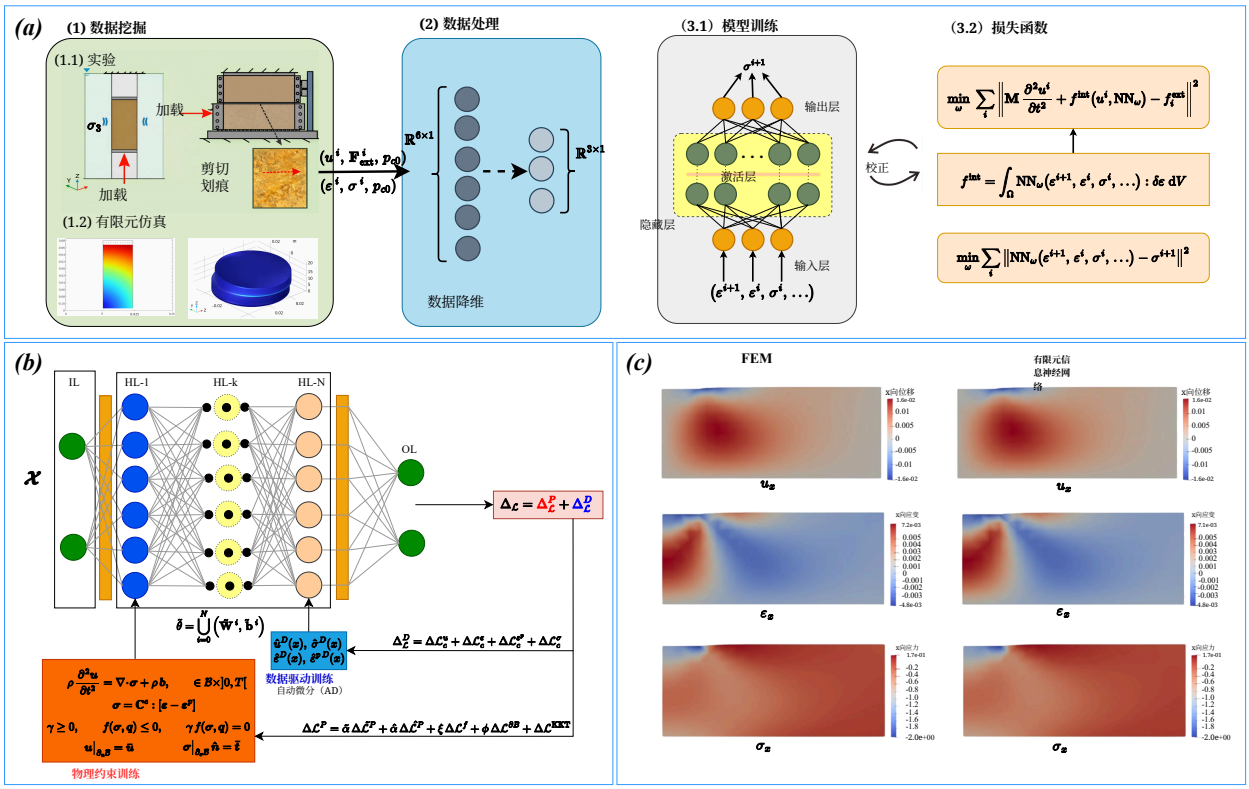


图26：（a）针对 [421]中本构建模所提出的物理信息神经网络框架。该工作流程包括数据挖掘阶段，从有限元模拟以及三轴试验和直剪试验结果中收集应力–应变或力–位移对；数据处理阶段，通过对称重排和沃伊特变换降低维度；以及模型训练阶段，其中损失函数纳入控制偏微分方程和本构关系。（b） [422]中提出的用于弹塑性的物理信息神经网络示意图。损失函数由数据损失和物理损失组成。数据损失考虑包括位移、弹性应变和塑性应变以及应力在内的场变量。物理损失由控制偏微分方程、本构关系、流动法则、互补条件以及边界条件和初始条件的残差组成。（c） [423]中报道的集成物理信息神经网络–有限元框架的模拟结果。x方向位移、应变和应力场的物理信息神经网络预测与有限元解之间的比较，证明了所提出的物理信息神经网络–有限元方法的鲁棒性和准确度。

控制偏微分方程的残差结合起来，并应用于线弹性和弹塑性分析。相比之下，瑞利–里兹法仅用于线弹性，并将损失函数表述为系统能量项与基于数据的项之和。结果表明，对于正向弹性问题，基于瑞利–里兹法的损失函数优于配点法；而对于反演分析，配点法的预测准确度更高。鉴于配点法在反问题中的优越表现，该研究采用此方法求解反弹塑性问题，并取得了令人满意的结果。此外，研究还探讨了以变分形式等替代方法取代控制方程的强形式 [428], ，其中损失函数纳入了一阶空间梯度，而非强形式所需的二阶导数。

5.1.4. 多重约束

PINN 在本构建模中的一些应用会将多个约束项同时纳入损失函数。这种更高程度的物理约束进一步引导网络预测，使其输出更加符合物理定律。然而，训练此类高度约束的网络通常会面临与收敛和优化稳定性相关的困难。为了解决冯·米塞斯塑性问题，该研究 [422] 开发了一种 PINN，将结合基于物理和数据驱动成分的多个损失项纳入其中，如图 26b 所示。对于基于数据的损失项，损失函数中包含多个弹塑性场变量，即位移、弹性应变、塑性应变和应力张量。多目标损失函数由控制偏微分方程残

差、 本构关系、流动法则、一致性条件和边界条件组成。研究通过两个基准案例评估所提出 PINN 的性能，结果表明其具有稳健的预测能力和可靠的整体性能。该研究 [429] 采用了类似的方法，将平衡方程、边界条件和本构关系纳入有限应变弹塑性问题的损失函数中。随后， [430] 的研究在上述物理因素之外进一步加入相容条件，并采用两阶段多目标优化框架。所提出的 PINN 针对单轴拉伸、剪切和拉伸–剪切耦合加载条件下的弹性、幂律塑性和超弹性问题进行了验证。

相比之下， [431] 针对非关联德鲁克–普拉格塑性模型开发了一种物理信息神经网络。损失函数中包含的物理约束包括本构关系、德鲁克–普拉格屈服函数、KKT一致性条件以及非关联流动法则。为保持本构模型中与压力依赖性相关的物理保真度，作者还将静水应力分量和偏应力分量的稳态条件纳入损失函数。

物理信息神经网络也被应用于含有未知属性嵌入区域的非均质材料的材料识别问题。在此上下文中， [432] 提出了一种物理信息神经网络框架，利用传统的艾里应力函数法强制满足热力学容许性和静力学容许性。该方法的一个局限在于所估计的本构场和应力场固有的光滑性。尽管艾里应力函数的弱不连续性有利于神经网络近似，但它们可能导致过于光滑的场预测。该方法通过对嵌入非均质试样中的均质尼龙和热塑性聚氨酯样本的识别进行了验证。

近年来， [423] 提出了一种结合有限元法和物理信息神经网络的混合框架，用于模拟弹性材料和弹塑性材料的行为。在该框架中，采用有限元法进行空间离散，而非使用配点。通过高斯积分方案和应变–位移矩阵构建弱形式控制方程，取代自动微分算子。基于物理的损失项包括平衡方程和边界条件。图图 26c 展示了所提出的框架对各种场变量的预测结果与有限元解的比较。该模型针对不同边界条件下的均质和异构问题进行了验证，包括集中力、分布力以及指定位移加载。表 7 概述了采用物理信息神经网络研究材料塑性变形的部分相关研究。

5.2. 物理编码神经网络（*PENNs*）

与物理信息神经网络不同，后者通过额外的基于物理的项对损失函数进行弱惩罚；物理编码神经网络（PENNs）旨在将物理定律等先验知识直接硬编码到人工神经网络的核心架构中。这一范式使学习方式从物理信息神经网络典型的基于实例的优化方案，转向物理编码神经网络中的持续学习框架 [388, 436]。此前，人们已通过若干概念探索了在神经网络架构中编码物理约束的方法，包括施加对称性[437], 、正性约束 [438], ，以及应用单调性或凸性要求 [439, 440]。其他方法则施加精确物理规律或概率约束，例如对网络权重的方差或均值施加约束，以改进不确定性量化 [441, 442]。

在计算力学中，两种突出的 PENN 方法是物理编码循环卷积神经网络 [443]和微分编程（DP） [387, 444], ，相关内容已在 [388]中得到全面综述。然而，基于本构建模和塑性的相关文献，并考虑到这两种方法在本综述范围内的局限性，本节分为以下两部分：首先，综述通过对称性或凸性等方式强制施加物理概念的方法；其次，介绍将塑性的精确物理规律直接嵌入人工神经网络架构的方法。

5.2.1. 对称性、凸性与混合架构

在对称神经网络架构中，输出在特定的输入对称变换下保持不变或呈等变性。这些网络将已知的物理或几何对称性直接编码到模型中，确保预测符合物理定律的基本一致性要求。在 [445], 中，为了对材料的本构行为进行建模，作者改进了人工神经网络的典型应用方式：通常直接预测应力作为输出。而他们开发了一种架构，以增量应力值为输入，预测切线刚度矩阵的 Cholesky因子。Cholesky分解是一种矩阵分解方法，可将

表 7： 塑性领域物理信息神经网络应用的不完全列表

应用	方法	参考文献
弹塑性	通过使用基于本构模型的约束（如屈服函数）预测 J2 和 Cam-Clay塑性	[404]
	在 GRU 的损失函数中纳入大量基于本构模型的约束，包括塑性功率、Lode参数和应力三轴度	[405]
	在损失项中纳入土体材料的孔隙比和增量应变分解，同时考虑应力张量	[409]
	开发两个独立的网络，一个 GRU 和一个多层感知机，其损失项基于弹性自由能、塑性功和耗散率	[419]
	在损失函数中施加模型偏微分方程，采用应力–应变和力–位移双重输入 data	[421]
循环塑性	将循环滞回环参数加入损失项，以预测循环塑性	[410]
CP	纳入应力张量残差、剪切应变增量残差和滑移抗力残差	[412]
	在考虑热效应的情况下，将滑移系残差纳入损失函数	[402]
各向异性塑-塑性	纳入各向异性参数，例如不同方向的应变率损失、等容非弹性损失，以及应变能密度损失	[414]
塑性 and 损伤	将弹性损失项、KKT条件损失项和损伤演化损失项纳入总损失	[433]
Drucker-Prager 模型	纳入各向同性、运动学和混合硬化及不等式约束的基于CM的损失函数	[434]
黏塑性	通过热力学定律强制满足单调性和凸性，以确定材料响应与晶粒尺寸的函数关系晶粒尺寸	[435]
Drucker-Prager 模型	结合本构关系、Drucker–Prager屈服函数、KKT条件和非关联性	[431]

对称正定矩阵表示为一个三角矩阵与其转置的乘积 [446]。通过预测切线刚度矩阵的 Cholesky因子，可确保对称性和半正定性，从而保证该方法适用于超弹性和关联弹塑性等本构模型。训练过程既可以直接基于应力-应变数据进行，也可以间接利用位移-载荷对数据进行。所提出的模型能够准确预测纤维增强板的响应。

本研究 [447]将这一基于人工神经网络的对称架构扩展到材料各向异性塑性的建模中。如图27a所示，所提出的框架以应变、应力及其增量值为输入，并预测下一时间步的应变和应力作为输出。内部架构由两个人工神经网络组成：一个用于屈服函数，另一个用于塑性模型。通过使用Cholesky分解法对切线刚度矩阵进行对称分解，塑性子网络的输出为Cholesky因子。随后，[448] 利用基于张量的输入定义（例如应力张量不变量和孔隙率）将对称性纳入网络，以模拟土体亚塑性并预测本构张量关系的系数。

PENN 的另一种应用是对热力学势进行编码，例如自由能和耗散势。 [451], 中提出了一种此类方法，其中基于这些势构建了一个有限应变塑性模型，包括各向同性硬化和运动硬化。在这些假设下，网络分别考虑各向同性分量和运动分量对自由能与耗散势的贡献，并为每个分量指定一个人工神经网络。对于弹性部分，采用超弹性Neo-Hookean自由能，这要求满足多凸性 [452, 453] 以确保热力学稳定性 [454]；因此，必须保证人工神经网络近似的凸性。所提出的模型还受到约束，以满足框架不变性和客观性；为此，能量和耗散势均以应力不变量

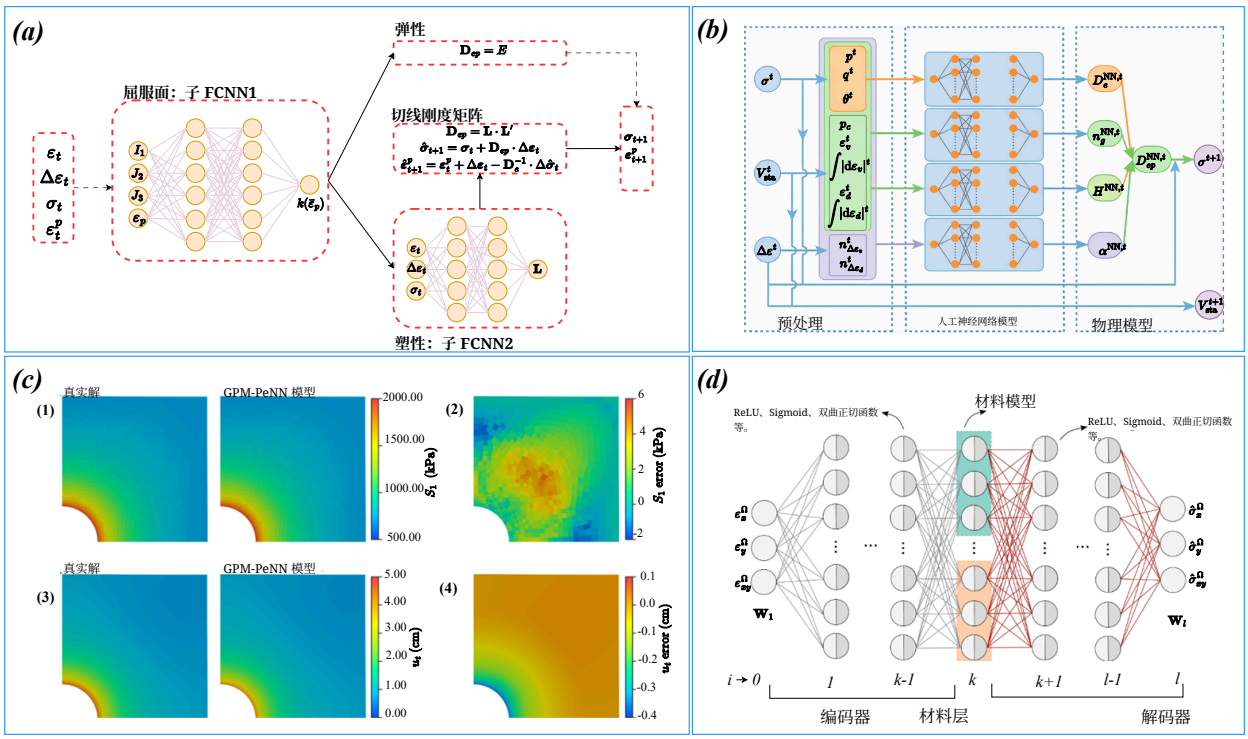


图27：(a) [447] 用于将对称性作为物理原理加以约束的所提框架示意图。给定输入变量后，使用人工神经网络预测屈服函数（YF），再将其输入塑性人工神经网络，以预测切线刚度矩阵的Cholesky分解。随后将所得塑性贡献与弹性部分结合，计算下一时间步的应力和应变。(b) 用于对地质材料广义塑性进行建模的PENN架构 [449]。输入包括三轴应力空间中的应力状态，以及预固结压力、体积应变、累积绝对体积应变增量、等效应变和累积绝对剪切应变增量等状态变量。采用四个子人工神经网络分别预测弹性刚度张量、塑性流动方向、塑性模量，以及控制加载与卸载行为的系数。(c) 使用(b)所示架构求解空腔膨胀问题的结果 [449]。将主应力和总位移的分布与真实值进行比较，结果表明所提模型具有准确的预测能力。(d) 所提的PENN框架 [450]。该架构由编码器、材料层和解码器组成。编码器将宏观应变输入转换为适用于材料层的表征。材料层明确引入代表性体积单元尺度的本构关系，网络作为其代理模型，并输出微观尺度应力张量。随后，解码器对这些代表性体积单元应力进行积分，以计算得到的宏观应力张量。

或应变不变量的形式表示。为满足热力学第二定律，耗散势必须非负；在人工神经网络表述中，除凸性外，还必须确保这一点。为满足上述多凸性和正性要求，所提出的人工神经网络被设计为输入凸神经网络（ICNN）[440]。ICNN架构采用非负权重以及单调、正且凸的激活函数，以保证网络输出的凸性和单调性。为进一步确保势函数为正，在各层中加入严格为正的偏置项。因此，网络架构中采用参数化激活函数 [455]，以维持这些必要性质。随后，[456]采用类似方法，使用ICNN对有限应变下的各向异性塑性进行建模。

混合架构也用于弹塑性领域，其中多个人工神经网络被整合到单一框架中，以充分表征弹性与塑性响应的分解。在此方面，[457] 考虑经典弹塑性，并将应变加性分解和非线性增量塑性等控制物理原理直接嵌入人工神经网络结构中。该研究考察了不同的子网络架构，包括串联与并联配置，并将其与所提出的架构进行比较；后者由两个并行式人工神经网络组成：一个专用于预测弹性响应，另一个专用于预测砂土的塑性应变增量。

[449]近期一项研究采用物理增强神经网络（PENN）对 [458] 地质材料的广义塑性进行建模。广义塑性是一种用于描述塑性行为的本构框架，它无需像经典弹塑性中那样显式使用屈服函数、塑性

势和硬化定律。相反，它直接将加载方向、塑性流动方向以及塑性模量定义为当前应力状态和材料历史的函数。广义塑性的增量形式与人工神经网络的前馈结构自然契合，这促使作者采用这种建模方法。如图27b所示，网络接收多个输入，包括当前应力状态、增量应变和选定的状态变量。对于每个输出预测，使用独立的人工神经网络预测弹塑性刚度张量的各分量。采用多个子网络有助于确保模型遵循底层物理规律，同时在损失函数中加入额外的惩罚项，以避免违反物理规律。图27c展示了所提出模型对空腔膨胀问题的预测性能，凸显了其鲁棒性和准确度。

5.2.2. 强制遵循精确物理规律

将物理规律嵌入人工神经网络有多种方式，目前尚无统一的标准方案或分类体系能够全面描述这些方法。在某些情况下，例如超弹性，研究 [207] 提出了一种框架：将右柯西–格林张量与材料属性向量一同作为输入提供给网络，以识别一组广义不变量，而应变能密度取决于这些不变量。随后，训练第二个子人工神经网络，学习每个不变量对应变能的影响。然后，通过额外的子人工神经网络将这些贡献组合起来，构建总应变能，再对其求导以获得应力响应。

将可微物理变量整合到网络结构和网络输出中的做法也推动了面向塑性的 PENN 方法的发展。例如，[450] 提出了一种将材料层直接嵌入网络的架构。如图27d所示，整体框架由编码器、材料层和解码器组成。该架构仿照标准数值求解程序（例如有限元法中采用的程序），其中编码器、材料层和解码器分别对应运动学关系、本构方程和平衡方程。编码器和材料层模拟微观尺度分析，而解码器则执行均匀化，将微观尺度预测与宏观尺度响应联系起来。为了充分捕捉塑性的路径相关行为，可以将长短期记忆网络或 GRU 网络等循环神经网络整合到该框架中。

在 [459], 中，热力学原理通过自动微分直接编码到人工神经网络架构中。所提出的PENN旨在纳入自由能与耗散率的导数，以及它们与应力和状态变量之间的关系。该框架被称为基于热力学的人工神经网络（TANN），可确保弹塑性材料建模的热力学一致性。该架构采用两个子人工神经网络，根据包括应变、应力、温度、应变增量以及当前运动学变量在内的输入数据，预测运动学内变量增量和温度。利用有限差分近似，得到更新后的温度和内变量速率，再通过第三个子人工神经网络计算更新后的能量势。最后，通过对更新后的能量势求导，预测应力和耗散速率。总体而言，TANN框架由三个子人工神经网络组成，分别用于预测内变量增量、温度增量和亥姆霍兹自由能。

随后，作者通过将降维与热力学一致性学习相结合，将 TANN 框架扩展至多尺度材料分析 [460]。在多尺度设置下，使用自编码器表示微观尺度内部状态变量：将高维微结构场数据降维至低维潜在空间，并在其中嵌入 TANN，以执行如前所述的热力学一致性预测。之后，作者提出了 TANN 的连续演化表述 [461], ，其中内部变量的演化方程以常微分方程的形式表示，而不是采用增量式离散时间形式。

5.3. 神经算子（*NOs*）

上述讨论的深度学习和 PANN 框架存在一个共同局限：它们旨在将网络输出映射到与一组特定输入条件相对应的解。因此，如 PINNs 或 PENNs 所示，它们只能在由边界条件和初始条件定义的特定时空域内求解问题。当这些条件发生变化时，必须重新训练模型，或使用迁移学习等技术对模型进行调整，以处理新的实例 [388]。

为克服这一问题，神经算子（NOs）应运而生 [462]。神经算子旨在学习算子，即无限维函数空间之间的非线性映射 [436, 462, 463]。在实践中，它们学习

从输入函数（例如初始条件、边界条件、偏微分方程的系数）到输出函数（例如偏微分方程解）的映射，使其能够近似求解结果，而无需反复求解控制方程，从而开创了代理建模的新范式。尽管神经算子与深度学习方法类似，需要大量训练数据并依赖带标签的输入–输出对，但在可解释性、泛化能力、持续学习和计算效率方面，它们优于传统深度学习模型、物理信息神经网络和 PENN [464, 465]。

与在离散化表示上运行的标准人工神经网络不同，神经算子被明确构建为学习连续函数，从而能够直接在无限维函数空间中工作。由于这种函数形式，它们无需事先掌握控制偏微分方程的解析知识，而是仅从数据中学习潜在关系。这一设计的一个关键结果是网格（栅格）独立性：在某一时空分辨率下采样的数据上训练得到的神经算子，无需重新训练即可在不同分辨率下进行评估 [465]。这种分辨率灵活性之所以自然产生，是因为神经算子学习的是算子，而非固定尺寸的向量映射。总体而言，神经算子展现出强大的泛化能力，并能提供快速的实时预测，因此非常适合对时间敏感的科学与工程应用 [388, 464]。

神经算子可大致分为三大类：深度算子网络（DeepONet） [436], 、傅里叶神经算子（FNO） [466], 以及图神经算子（GNO） [467, 468]。在本构建模与塑性的上下文中，DeepONet和傅里叶神经算子的应用最为普遍。因此，在以下各节中，我们将综述这些神经算子以及任何新提出的方法。

5.3.1. 深度算子网络（*DeepONet*）

DeepONet [436] 是一种神经网络框架，旨在学习函数空间之间的映射，而非传统的有限维映射，即 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$。DeepONet 将算子近似为

$$G : u \to v \tag{24}$$

其中 u 和v是函数的某些方面（例如，偏微分方程的解、积分变换、动力学映射等）。如图 28a 所示，DeepONet$G$ 接收输入函数 $u(x)$，并输出另一个函数 $v(y)$，即

$$v(y) = G(u)(y) \tag{25}$$

DeepONet 由两个相互作用的神经网络构成，分别称为分支网络和主干网络。分支网络负责解读输入函数。由于函数是无限维对象，网络无法直接接收函数。相反，如图 28a 所示，函数会在有限数量的点上进行采样，这些点称为传感器点。这些传感器点可以均匀分布、随机布置，也可以根据物理或几何因素进行选择。因此，分支网络只能通过这些样本感知输入函数的形状和行为。随后，根据问题的性质，使用各种深度学习架构（如多层感知机、卷积神经网络和图神经网络）在分支网络中处理采样值。分支网络的作用是将这些采样值转换为单个向量，以概括算子学习任务中输入函数的所有相关属性。我们可以将分支网络视为编码器：它将整个输入函数压缩为一组有限的、经过学习的系数，这些系数随后将决定输出函数的结构。因此，它可以描述为fficients that will later determine thestructureofthe output function. It can therefore be described as

$$b(u) = (b_1(u), b_2(u), ..., b_p(u)) \tag{26}$$

分支网络关注输入函数，而主干网络则聚焦于算子结果应在何处求值的输出坐标，如图 28a 所示。例如，如果算子的输出是应力场，那么每个输出点都有一个空间坐标；如果输出表示时间演化，那么坐标就包含时间。主干网络通过生成一个数值向量来捕捉输出空间的结构，该向量可解释为在给定坐标处求值的一组基函数。从本质上说，主干网络学习可能的输出函数的形状和模式。这些学习到的基形状灵活且完全由数据驱动。给定一个点 y，主干网络将其映射为一个向量：

$$t(y) = (t_1(y), t_2(y), ..., t_p(y)) \tag{27}$$

分支网络以学习到的系数的形式提供输入函数的信息，而主干网络以学习到的基函数值的形式提供可能输出形状的信息。算子在任意

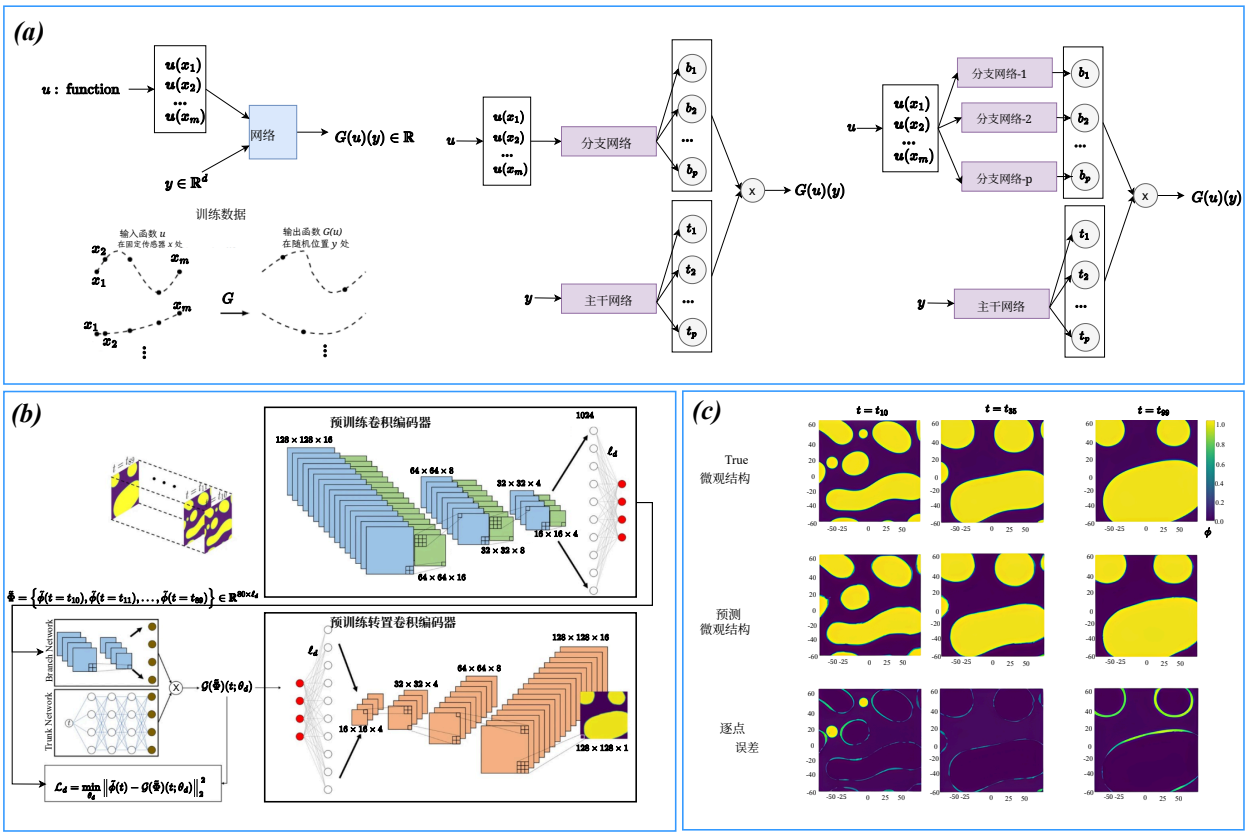


图 28： (a) 算子示意图 G，它接收输入函数 $u(x)$ 以及 y，并生成输出 $G(u)(y)$。训练过程示意图表明，输入函数被离散为固定数量的输入传感器，而输出传感器的数量和位置不受任何限制。DeepONet 的非堆叠架构由一个分支网络和一个主干网络组成，与之相对，DeepONet 的堆叠架构包含 p 个分支网络和一个主干网络 [436]。(b) DeepONet 与卷积自编码器结合的示意图 [469]。自编码器的编码器使用一系列卷积层（蓝色）和最大池化层（绿色）提取微观结构特征，并将高维输入空间映射到低维潜在空间。随后将此潜在表示输入 DeepONet 分支网络。对于主干网络，则提供 80 个时间步对应的微观结构信息。随后，使用此前作为自编码器一部分训练的卷积解码器，将 DeepONet 在潜在空间中的输出映射回高维解空间。(c) 使用 (b) 面板所述模型对不同时间帧的微观结构演化进行预测 [469]。与真实微观结构的对比表明，大尺度特征得到了准确预测，而误差图显示小尺度特征和尖锐界面未能得到充分捕捉。

坐标处的输出由这两部分信息组合确定。DeepONet将算子的输出表示为分支嵌入与主干嵌入的双线性组合，并以内积作为

$$G(u)(y) = \sum_{k=1}^{p} b_k(u) t_k(y) \tag{28}$$

其中p 是维度，通常称为潜在维度或基维度。这种结构明确划分了各项任务。分支网络负责全局处理：对整个输入函数进行解读。主干网络负责局部处理：描述输出函数在特定坐标处的数值。得益于这种分工，DeepONet 能够高效地在多个输出坐标处计算算子。研究 [436] 还证明，如果p 足够大，且分支网络和主干网络具有足够强的表达能力，那么这种架构可以逼近任意连续算子，这与算子通用逼近定理 [470]一致。

图 28a 展示了两种可实现的 DeepONet架构 [436]。非堆叠DeepONet由单个分支网络和单个主干网络组成，适用于单个学习基足以表征输出函数的情况。堆叠DeepONet使用多个并行排列的分支–主干对。它们组合后的输出形成更具表现力且更灵活的表征，

从而使该架构能够有效处理具有强非线性或多尺度行为的复杂算子，但其需要更多参数和更大的训练投入。

在材料表征和本构建模中，DeepONet 已展现出良好的应用前景。本研究 [469]旨在结合 DeepONet 与自编码器，学习材料的双相微观结构演化。如图 28b 所示，研究人员使用微观结构图像的动态演化数据训练卷积自编码器，以获得数据的低维潜在表示。随后，利用编码后的潜在空间数据训练 DeepONet，使其能够替代相场数值求解器，并显著加快分析过程。由于 DeepONet 预测的微观结构以潜在空间表示，因此接下来使用训练好的自编码器，通过转置卷积解码器将这些预测映射回原始数据空间。 图 28c 展示了微观结构随时间的预测演化。结果表明，所提出的 DeepONet 与自编码器组合能够预测大尺度特征；然而，在尖锐界面附近以及较小特征处仍存在明显误差。这说明，与通过完整数值模拟得到的真实微观结构相比，预测微观结构中的相浓度空间梯度不够尖锐。

在本构建模方面，研究 [471] 引入 DeepONet，用于建模涉及塑性变形的小应变问题中的冯·米塞斯应力分布。不同于许多仅针对一组固定输入参数（如边界条件、初始条件、加载条件和特定材料属性）预测解的深度学习方法，扩展后的 DeepONet 框架能够求解塑性变形问题，同时允许材料属性、加载条件以及随机变形路径函数发生变化，并将这些因素视为算子参数。在该模型中，输入传感器包含加载方向和大小，以及提供给分支网络的弹性模量和屈服应力。输出解是在一组传感器位置处计算得到的冯·米塞斯应力，这些位置提供给主干网络；整个模型采用非堆叠 DeepONet 架构。

研究 [472] 进一步拓展了 DeepONet 的应用，将其用于多晶材料的晶体塑性分析，以预测应力—应变响应。在主干网络中，采用卷积神经网络提取微观结构特征，而分支网络则纳入材料属性和边界条件。为生成训练数据集，将单一加载条件下的单晶响应作为分支网络的输入，并将相应的微观结构演化作为主干网络的输入。该框架仅基于一种材料和一种加载条件进行训练，却展现出很强的泛化能力，并通过迁移学习突破了以往因边界条件变化而产生的局限性。

近年来，研究人员在 [473] 多尺度框架下对黏弹性等随时间变化的材料行为进行了研究。在该框架中，运动学关系、本构关系以及基于常微分方程的控制方程等物理原理被直接纳入其中。这形成了一种混合物理信息神经网络与 DeepONet 的框架，能够对复杂的时变响应进行建模。

5.3.2. 傅里叶神经算子（*FNO*）

傅里叶神经算子（FNO） [466]的核心是直接近似一个与空间网格分辨率无关的无限维算子。FNO 利用傅里叶空间对整个定义域内的交互进行建模，这与卷积神经网络（CNN）不同，后者学习相邻网格点之间的局部相互作用。这一特性使 FNO 特别适用于理解长程依赖和光滑的全局结构，例如材料响应预测问题中遇到的这类结构。从本质上说，FNO 是一种神经算子，它利用傅里叶变换表示全局交互，在频率空间中应用可学习变换，并采用与分辨率无关的类卷积层。

图中展示了所提出神经算子的完整架构 [466] ， 图 29a 展示了该架构在各处均采用傅里叶层。该过程首先将输入函数（在网格上采样）映射到更高维的特征空间。此操作在保持空间分辨率不变的同时，增加了每个空间位置的通道数，使网络在应用全局交互之前能够表征更丰富的局部信息。该架构由多个傅里叶层组成，在每一层中，当前的函数表征都通过傅里叶变换从物理空间转换到频率空间。在频率空间中，函数由一组模态表示，每个模态对应一种特定的空间频率。低频模态捕捉大尺度、平滑的行为，而高频模态则表示精细尺度的细节。通过这种方式，傅里叶神经算子学习如何变换这些频率模态，而不是学习物理空间中的卷积。具体而言，对每个保留的傅里叶模态乘以一个可学习的复数权重。随后，仅保留固定数量的低频模态，而

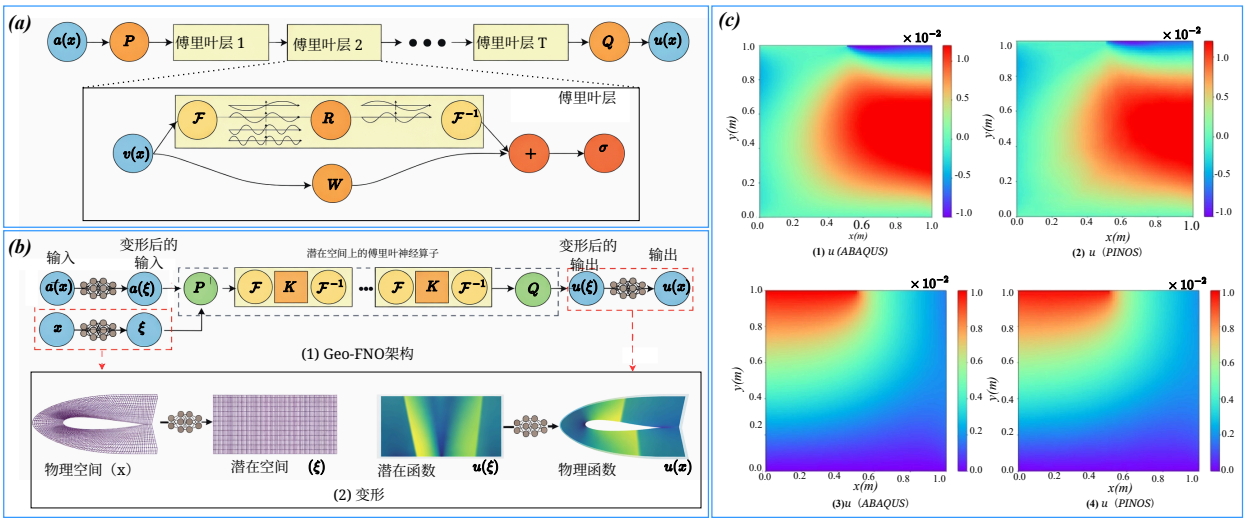


图 29：(a) [466]中提出的傅里叶神经算子（FNO）架构。输入被提升至更高维的通道空间，随后经过一系列傅里叶层，在其中应用带有激活函数的积分算子。由此得到的特征被投影回目标维度，从而获得输出。在每个傅里叶层中，首先进行傅里叶变换，随后进行线性变换以滤除高频模态。接着进行逆傅里叶变换，然后应用逐点线性变换和非线性激活函数。(b) 几何感知傅里叶神经算子（Geo-FNO）的示意图 [474]。该架构在网络的起始端和末端各包含一个变形模块。首先，模型将输入函数从不规则物理域变形至均匀潜在空间。经过 FNO 处理后，输出再从潜在空间反向变形回物理域。(c) PINOS 预测的位移场 [477]。将水平和垂直位移场与参考数值解进行比较，结果表明预测准确且预测能力强。

较高频率的模态则被舍弃。这有两个目的：降低计算成本，并起到正则化的作用，这反映了许多偏微分方程解都以低频结构为主这一事实 [474–476]。

如图 29a 所示，选取傅里叶模态后，应用逆傅里叶变换将表征映射回物理空间。由于傅里叶变换本质上具有全局性，因此得到的表征中，每个空间位置都包含来自整个定义域的信息。此外，为补充这种全局交互，还会在物理空间中应用逐点线性变换，这有助于保留细尺度信息并增强模型的表达能力。在每个傅里叶层的末尾，都会应用非线性激活函数，其结果将作为后续层的输入。上述过程可简洁地表示为

$$v_{k+1}(x) = \sigma\left(W u_k(x) + \mathcal{F}^{-1}(R \cdot \mathcal{F}(v_k)(\xi))(x)\right) \tag{29}$$

其中，$\mathcal{F}$ 表示傅里叶变换，R是频率空间中的可学习复权重，W 是逐点线性变换，σ 是非线性激活函数，而k 是层索引。通过堆叠多个傅里叶层，网络在频率空间的全局交互与物理空间的局部混合之间反复交替，使傅里叶神经算子能够学习函数之间复杂的非线性变换。

最后，网络将高维特征表征映射回所需的输出维度，从而生成输出函数。由于所有变换都是基于连续傅里叶模态而非离散网格点进行的，因此训练后的算子无需重新训练，即可在不同分辨率的网格上进行评估。这一特性称为离散化不变性，是傅里叶神经算子的关键优势。从本质上说，傅里叶神经算子学习如何变换输入函数的频率成分，以生成相应的输出函数；它不再学习局部滤波器，而是学习波之间如何相互作用。这使得模型能够准确、高效地对复杂物理算子进行建模，并具备强大的泛化能力。这一点在计算力学中尤为重要，特别是在本构建模和材料表征领域。

傅里叶神经算子的一个缺点是依赖快速傅里叶变换，因此受限于具有均匀网格的矩形区域。 [474], 对此限制进行了处理，作者提出了一种新框架，旨在

处理任意几何形状。所提出的几何感知傅里叶神经算子（Geo-FNO）以标准傅里叶神经算子为核心；然而，为了在 FNO 潜在空间中容纳定义于不规则几何形状中的输入，该方法将不规则输入域变形为均匀潜在网格，以便在其上应用快速傅里叶变换，如图 29b 所示。其核心思想是找到输入域与单位环面之间的一种微分同胚变形，该变形适用于所有输入空间。此外，作者还将基于物理的损失项纳入目标函数，以进一步约束学习过程。该框架应用于多种偏微分方程，包括弹性、塑性、纳维–斯托克斯方程和欧拉方程，涵盖正问题与反问题；结果表明，该模型的计算速度约快五倍。

随后，该研究 [478]利用傅里叶神经算子、小波神经算子和多小波神经算子来预测二维数字复合材料中的应变演化。训练后的神经算子能够预测未见边界条件下的应变场，其中傅里叶神经算子独特地展现出超分辨率能力，可实现多个尺度上的应变估计。借助训练后的模型，这些框架无需额外训练即可进一步应用于任意几何形状和更精细的区域分辨率。

物理信息神经网络与神经算子的结合，为准确预测实际问题中的偏微分方程提供了一种颇具前景的方法。在此背景下，该研究 [477] 引入物理信息神经算子求解器（PINOS），用于对静态和动态系统进行仿真。对于静态问题，PINOS采用最小功原理的弱形式；对于动态问题，则采用其强形式。PINOS的架构由一系列傅里叶卷积算子构成。首先，将由坐标和初始条件组成的输入提升至更高维的特征空间，然后传入傅里叶卷积算子，最后投影为位移场形式的解输出，如图29c所示；与数值参考结果相比，该方法展现出准确的预测能力。该方法通过一个运算层引入关键的物理信息组件，在此计算物理参数的导数和本构定律，以评估与控制方程、初始条件及边界条件相关的损失。最近， [479, 480], 作者结合使用傅里叶神经算子、物理信息神经网络和物理增强神经网络，开发了一种用于多晶材料应力场预测的无散神经算子。该方法将应力势编码进网络架构，从而针对材料中的各向同性弹性晶粒，基于应力势约束应力场无散。该研究 [481] 提出了对傅里叶神经算子的进一步改进：引入傅里叶层的增量形式，并使用积分算子对层间增量进行建模。这种形式非常适合识别非均质材料随时间变化的响应。

5.3.3. 其他神经算子

我们回顾一下，设计标准人工神经网络的常规方法是构建一系列模块，依次执行线性变换和非线性激活函数。类似地，神经算子的设计遵循相同原则，即将线性模块与非线性变换组合起来。不过，关键区别在于，神经算子中的线性模块由积分算子实现，而非定义在固定维度空间中的线性函数；具体形式取决于所选的核（即算子类型） [476]。

除上述卷积核外，文献还报道了材料建模中采用的其他几种算子形式。例如，文献 [482]采用积分神经算子，将两个算子结合起来：一个用于控制本构模型的演化方程，另一个表示基于神经算子的本构方程。第一个算子通过演化方程算子处理应力–应变数据以及初始和最终材料构型，从而得到连续的积分形式。相比之下，本构方程算子则明确保证塑性关系的热力学一致性。另一项研究 [483], 提出了一种混合方法，将数值求解器与基于 U-Net 的神经算子相结合。该框架进一步通过时间条件化得到增强，并应用于采用相场法模拟微观结构演化。

近期的尝试表明，利用神经算子进行塑性建模已取得显著进展。文献[484] 提出了一种用于路径相关本构建模的历史感知神经算子（HANO），可用于描述材料响应中的塑性变形等现象。与循环神经网络不同，HANO 避免使用隐藏状态变量，而是仅依赖应力–应变历史的短片段，从而解决自洽性问题。HANO 以傅里叶神经算子为骨干，实现了离散化不变学习。此外，HANO 融合了分层自注意力机制，以更好地捕捉全局和局部依赖关系，从而促进多尺度问题中的高效特征提取。

另一项研究 [485], 提出了一种温度感知循环神经算子（TRNO），用于对六方密排材料中的温度相关各向异性塑性进行建模。TRNO 在捕捉

表 8： 塑性领域中使用的神经算子（非详尽列表）

神经算子结构	目标	参考文献
DeepONet	学习非线性算子，以高效且具有较强泛化能力的方式映射不同函数空间	[436]
FNO	在连续傅里叶模态空间而非离散网格上学习算子，从而实现跨分辨率的强泛化 在不同分辨率之间的标准化	[466]
Geo-FNO	通过将输入物理域变形到均匀的潜空间 网格上，为任意几何形状学习傅里叶神经算子，并对输出应用逆变形	[474]
PINOS	使用静态问题的弱形式和动态问题的强形式将物理定律纳入傅里叶神经算子 用于动态问题	[477]
HANO	利用傅里叶神经算子，通过应力–应变历史的短片段捕捉路径相关塑性的历史感知神经算子 应力–应变历史	[484]
TRNO	用于时间分辨率无关且热敏感的各向异性塑性建模的温度感知循环神经算 子，适用于多晶材料	[485]
EquiNO	将平衡方程作为物理信息约束融入基于 DeepONet 的神经算子 用于多尺度模拟	[486]
SPiFOL	学习一种傅里叶空间框架，将微观结构信息映射为力学响应，同时 施加物理约束	[489]

路径依赖方面优于 GRU 和长短期记忆网络架构，因为这些循环模型受时间分辨率影响，而所提出的 TRNO 则以时间分辨率无关的方式运行。此外，TRNO 在多晶材料的温度相关建模方面表现出色，对各向异性塑性具有较强的敏感性，并且在各种加载工况和条件下（包括不同温度和时间分辨率）具有良好的泛化能力。TRNO 的架构由一系列全连接层构成，后接缩放指数线性单元（SELU）激活函数和连接门控机制。

多尺度问题的数值模拟通常计算成本高昂，因为需要在较大的时空范围内解析细尺度物理。神经算子通过学习输入与解场之间不受分辨率影响的映射，缓解了这一难题，使其能够跨尺度快速生成代理预测，而无需反复求解控制方程。因此， [486] 中的研究提出了一种用于多尺度模拟的物理信息神经算子。该方法基于 [487], 中为非均质微观结构提出的物理信息神经网络框架，作者利用 [488] 中介绍的分解技术，从高维应变场中提取关键特征用于训练，从而实现准确的应力场预测。此外，通过将线动量平衡等物理定律以及本构模型纳入基于物理的约束，所得架构被称为平衡神经算子（EquiNO）。即使训练数据有限，该架构仍表现出优异性能，并支持快速预测，有效降低了计算成本。

类似地，为了捕捉微观结构的力学行为， [489], 提出了谱域物理信息有限算子学习（SPiFOL），将基于物理的约束与神经算子相结合。SPiFOL是一种混合学习框架，将多层感知机与傅里叶神经算子相结合，根据微观结构信息预测全场力学响应。该模型通过学习从微观结构和施加的宏观变形到应变场或变形梯度场的映射，适用于小应变和有限应变分析；随后，利用相特定本构关系将这些场转换为应力场。此外，通过Lippmann–Schwinger算子直接在傅里叶空间中强制满足物理一致性，无需使用自动微分等辅助求解器。因此，该框架在保持多尺度模拟准确度的同时，显著降低了计算成本。随后， [490] 采用SPiFOL对金属材料进行数字化，从而提取微观结构拓扑和空间变化的性质分布，并学习从微观结构特征到相应力学场的映射。

总体而言，这些发现凸显了神经算子在复杂塑性行为建模中的重要性日益提升，并鼓励开展进一步研究。为便于快速查阅，表 8提供了使用神经算子进行材料建模和塑性研究的概览，但并未涵盖所有相关研究。

5.4. 总结

一种恰当的物理增强神经网络分类体系可根据物理定律的融入方式对模型进行分类。物理约束可以通过训练期间损失函数中的惩罚项以弱约束方式施加，从而形成物理信息神经网络。另一种方式是将物理约束显式硬编码到模型架构中，这类模型称为物理增强神经网络。神经算子则构成另一类模型，它们学习从输入函数到输出函数的映射，并直接在函数空间中运算。

在本构建模与材料表征的上下文中，物理信息神经网络可将各种物理约束作为损失项加以利用，例如本构关系、热力学定律、控制偏微分方程或其组合。相比之下，物理增强神经网络直接在网络架构中强制执行物理原理，例如通过施加屈服函数的凸性、切线刚度矩阵的对称性，或将控制偏微分方程或常微分方程嵌入模型结构。然而，神经算子的作用方式有所不同：它们学习函数空间之间的映射，通常使用与物理空间对齐的潜在表征，例如DeepONet中的分支-主干架构或傅里叶神经算子中的傅里叶模态表示，以及其他混合架构和特定问题的神经算子架构。

物理信息神经网络、物理增强神经网络和神经算子的共同特征使其有别于纯数据驱动模型（即作为传统机器学习和深度学习方法的物理引导神经网络），这些特征包括：对带标签数据的依赖性降低、外推能力增强、解的连续表征、学习与仿真之间的紧密耦合、解在不同问题实例间的可迁移性，以及高效的实时预测，尤其是在神经算子的情况下。

根据无免费午餐定理， [491], 任何单一的基于学习的方法都无法在所有问题类别中始终达到最优表现，物理信息神经网络、物理增强神经网络和神经算子也不例外。因此，这些方法都存在固有局限性。对于物理信息神经网络而言，由于依赖全连接架构和基于梯度的优化，收敛缓慢、梯度消失以及计算成本高等问题尤为突出，尤其是在大规模三维问题中 [492, 493]。物理信息神经网络通常也难以处理多尺度 [494], 高维[495], 和刚性 [496, 497]问题，因为它们难以捕捉低频和高频特征、处理不连续性，而且所需配点数量会呈指数级增长 [465, 498, 499]。此外，物理信息神经网络的训练对手动超参数调优和损失项权重的设置高度敏感，而目前尚无明确的指导原则。这种敏感性可能导致训练过程不稳定 [388, 493]。此外，物理信息神经网络针对特定解而设计，每遇到一组新的参数、边界条件或初始条件，都必须重新训练，这大大限制了其泛化能力 [388, 465]。

PENN 面临许多与训练相关的局限性，这些局限性与物理信息神经网络类似，包括稳定性、可扩展性、收敛性以及对样本尺寸和问题特定设置的依赖等问题。此外，由于 PENN 融入了持续学习机制，其训练可能尤其具有挑战性，因为连续深度网络的开发与优化仍然困难 [388]。此外，与物理信息神经网络相比，PENN 的架构更复杂，因此其设计并不简单。尽管如此，PENN 在数据匮乏场景中表现出色，具有更强的泛化能力，并且能够高效地将解迁移到不同的问题实例中。

此外，神经算子对数据需求量大，需要大量训练数据集 [488]。面对长时间跨度、高维输入和多样化数据集时，神经算子可能难以应对，有时会导致不稳定和过拟合 [500]。由于依赖傅里叶表示，傅里叶神经算子等架构在处理不连续函数时可能不可靠；而 DeepONet 和傅里叶神经算子通常都受限于简单几何形状和结构化网格 [488]。此外，模型参数的迅速增长会增加计算成本；随着训练数据增加，神经算子的收敛速度仍不理想，从而限制了其整体效率 [388, 501]。

6. 概 不确定性量化的概率方法 (UQ)

在前几节中，我们讨论了频率学派机器学习和深度学习方法（有时通过物理定律加以增强，即物理增强神经网络），以及这些方法在与塑性变形相关的本构建模和材料表征中的应用。这些方法旨在预测目标输出的确定性数值，但通常会受到不同程度的不确定性影响。人工智能驱动的材料塑性研究中的不确定性来源包括材料数据的变异性（偶然不确定性）和匮乏、物理规律不完整、模型（认知）不确定性（如架构、参数和训练的不确定性），以及在复杂加载路径下泛化能力有限 [502]。

清晰理解这些不确定性如何影响模型预测，对于评估模型可信度并实现塑性本构模型的可靠代理建模至关重要。然而，频率学派的人工智能方法依赖确定性假设，隐含地将模型和参数视为精确值，并忽视了现实世界的随机性

系统。在这些模型中，确定性预测通过最小化模型输出与带标签数据之间的差异，得出一个最佳拟合参数集。然而，事实上，对于复杂模型和含噪数据，许多不同的参数化方案都能同样良好地再现观测值 [503, 504]。

从概率视角来看，每种合理的模型–参数组合都有非零似然代表真实系统，而以往的方法忽略了这种多样性，因而给出的预测没有量化不确定性，而这对于全面的数据驱动分析至关重要 [505, 506]。因此，可以采用概率方法，利用根据现有数据推断出的概率分布或误差界，明确识别并量化模型输入和参数中的不确定性。这个过程称为不确定性量化（UQ），用于评估这些不确定性对模型预测的影响 [507, 508]。

贝叶斯推断（BI）是一种用于刻画不确定性的统计框架 [509]。它将先验信息与观测证据相结合，得到后验概率分布，并基于贝叶斯定理，表达式如下：

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)} \tag{30}$$

其中，θ 表示未知参数，$p(\theta)$是包含现有假设的先验分布，$p(D|\theta)$是似然，表示给定$p(\theta)$时观测数据出现的可能性，而$p(\theta|D)$是后验分布，用于量化观测数据后更新的知识。因此，贝叶斯推断给出的是完整的概率分布，而非单一数值的最佳估计。凭借数学严谨、易于实现以及能够融入先验知识等优势，贝叶斯推断在材料建模的不确定性量化分析中受到广泛关注[505, 510–520]。在实践中，贝叶斯不确定性估计需要计算高维积分，而使用标准技术通常难以处理这类积分 [521]。因此，抽样方法（如蒙特卡罗和马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法）成为首选方案 [522], as preferred solutions [523]。

贝叶斯推断为模型参数和预测的不确定性量化提供了一个框架。在此基础上，高斯过程（GP）提供了一种贝叶斯非参数方法，可直接在函数空间中量化不确定性，而非通过有限个参数进行量化。高斯过程已广泛应用于材料建模文献中，本节回顾的大多数研究都采用高斯过程方法进行不确定性量化。

6.1. 高斯过程（*GP*）

高斯过程（GP）将未知的输入—输出关系定义为函数上的概率分布。对于任意输入—输出对，输出观测值由联合（多元）高斯分布描述，从而形成一组随机变量，其中任意有限子集均服从多元高斯分布 [524]。在回归问题中，函数并非被直接观测，而是通过含噪测量值进行观测，可写为

$$\begin{cases} y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i \\ \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2) \end{cases} \tag{31}$$

其中，σ_n^2 是噪声方差或模型偏差。设$\mathbf{y(x^t)}$为训练数据集中的输出向量，$\mathbf{y(x^p)}$为待预测的输出向量，则联合高斯概率分布可写为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y(x^t)} \\ \mathbf{y(x^p)} \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{bmatrix} \mathbf{K(X,X)} + \sigma_n^2\mathbf{I} & \mathbf{K(X,X_*)} \\ \mathbf{K(X_*,X)} & \mathbf{K(X_*,X_*)} \end{bmatrix}\right) \tag{32}$$

其中，$\mathbf{X}$ 为训练数据集，$\mathbf{X}_*$ 表示模型进行预测时所针对的未见输入数据，$\mathbf{I}$为单位矩阵，$\mathbf{K}$ 为所考虑各点的协方差矩阵。高斯过程模型的预测由预测均值向量（即 $\mathbf{f}_*$）和协方差向量（即 $\mathbf{cov(f}_*)$）定义，表示为

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{f}}_* = \mathbf{K(X_*,X)}[\mathbf{K(X,X)} + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{y(x^t)} \\ \mathbf{cov(f}_*) = \mathbf{K(X_*,X_*)} - \mathbf{K(X_*,X)}[\mathbf{K(X,X)} + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{K(X,X_*)} \end{cases} \tag{33}$$

高斯过程的直观理解是，它表示能够解释观测数据的可能函数上的概率分布。高斯过程假设这些函数抽取自由均值函数定义的先验分布

以及在看到任何数据之前的协方差（核）函数。一旦高斯过程观测到数据，便将这一先验更新为与数据一致的函数上的后验分布，使得对于任意给定的输入点，高斯过程返回一个高斯分布，其中均值表示最可能的预测，方差表示相应的不确定性 [524, 525]。下文将讨论高斯过程在材料塑性变形中的应用，包括本构模型参数的识别、塑性代理模型，以及晶体塑性和微观结构信息驱动的材料行为。

6.1.1. 基于高斯过程的本构模型参数识别

在涉及本构模型参数识别的问题中，通常需要进行优化，但目标函数往往没有显式的解析形式。因此，直接求解此类问题并不可行，通常会采用基于元模型的优化，替代计算成本高昂的高保真模型，以识别最优模型参数 [526]。因此，该研究 [527] 将高斯过程纳入元建模框架，用于识别具有应变硬化特性的塑性模型参数。研究针对每个应变硬化参数引入 20–50 个随机实现，从而估计应力分布，并将其统计特征与实验测量进行比较，以确定最优参数值。

该研究 [528] 扩展了这一框架，不仅考虑模型参数中的不确定性，还考虑输入（应变）和输出（本构参数）中的不确定性，从而同时捕捉硬化线弹性模型中输入、输出和模型的不确定性。对于率无关塑性，该研究 [529] 采用基于高斯过程的代理建模，利用单轴拉伸实验识别应变硬化参数。为考虑应变率效应，该研究 [50] 将基于高斯过程的贝叶斯校准方法应用于率相关塑性模型，并整合单轴拉伸和压痕试验得到的力学响应。其模型考虑了五个本构参数，包括参考屈服强度、应变硬化指数、参考应变、参考应变率和速率敏感性，每个参数均定义在预设范围内。研究采用拉丁超立方抽样生成 250 组参数集，用于训练代理模型。预测参数与实验观测之间的高度吻合，凸显了整合多来源力学响应并开展高分辨率参数搜索对于可靠模型校准的重要性。

总体而言，晶体塑性模型广泛应用于多尺度分析，而高保真度仿真往往会产生高昂的计算成本。晶体塑性本构模型需要大量参数，而采用高斯过程能够提供一种稳健的方法，快速获得优化后的值 [530, 531]。对于参数超过八个的晶体塑性模型，高斯过程代理建模尤其有效，因为传统的试错法已难以实施 [532]。在此框架下，仅需进行 50 次初始仿真和 75 次优化迭代，即可建立并完善高斯过程代理模型。通过贝叶斯优化修改输入文件、运行新的晶体塑性模拟并更新代理模型，从而准确预测增材制造哈氏合金X的力学行为。同样，高斯过程代理模型与先进优化算法相结合，可为非晶材料晶体塑性分析中的参数校准实现组合贝叶斯优化策略 [533]。

为评估晶体塑性模型的参数对输出应力预测的影响，采用高斯过程代理模型进行敏感性分析，以降低计算成本 [534]。使用Nelder-Mead算法进行局部优化 [535], , 并使用差分进化算法进行全局优化 [536], 以识别最具影响力的参数。尽管直接计算Sobol指数 [537] 需要超过 65,000 次仿真，但采用高斯过程代理模型可大幅减少所需次数，使分析切实可行。对比研究表明，在塑性参数识别方面，高斯过程优于其他机器学习和深度学习方法 [538, 539]。

6.1.2. 基于高斯过程的*CM*代理模型

高斯过程作为代理模型应用于材料变形建模已被证明具有稳健性，在某些情况下，其表现优于其他频率学派机器学习和深度学习方法 [540]。如前所述，高斯过程可用作材料的本构模型，并且还具备量化模型不确定性的能力。因此，它们适用于广泛的塑性变形问题和材料的微观结构行为。

在此上下文中，th研究 [541]采用高斯过程来建模 A2-70 奥氏体不锈钢在温度变化下承受准静态和动态加载时的热黏塑性行为。该方法建立了三个输入变量（即应变、应变率和温度）与输出变量（即等效-

应力）之间的关系。基于高斯过程的模型在不同变形区间内均能准确预测应力。类似地，[542] 采用高斯过程作为 91 级钢热黏塑性本构模型的代理模型。

此外，研究 [51] 利用高斯过程结合拉丁超立方抽样，预测剪力键结构的延性变形极限状态。从更广泛的视角来看，[543] 着重于量化由微观结构特征和潜在微观机制引起的本构模型形式及参数的不确定性。为捕捉复杂的材料行为，作者制定了贝叶斯协议，利用微压痕试验的实验数据迭代更新模型形式和材料属性。在这一框架下，高斯过程被用作有限元仿真中的代理模型，以模拟 Ti-6Al-4V合金的循环塑性行为。

与同方差高斯过程不同，异方差高斯过程 [544, 545] 假设数据中的观测噪声并非常量，而是取决于输入变量。这通常通过引入一个额外的潜在函数来实现，该函数通常建模为高斯过程，用于控制依赖于输入的噪声方差。此外，在高斯过程中引入稀疏性，可以解决标准高斯过程模型可扩展性方面的局限性 [546]。稀疏高斯过程并不使用全部训练数据点，而是依赖一组精简的诱导点来概括潜在函数，从而显著降低计算成本。基于这些概念，该研究 [547] 采用异方差稀疏高斯过程对 6061铝合金的流动应力进行建模。所提出的模型以应变和温度为输入，以流动应力为输出，明确捕捉与温度相关材料行为有关的随机性。将所提出的方法与标准高斯过程、人工神经网络及传统唯象本构模型进行比较，结果表明其预测性能更优。

对于复合材料，均匀化会产生高维输入和输出空间，对标准高斯过程公式构成挑战。研究 [548] 提出了降阶函数型高斯过程模拟器，用于对含断裂的非线性塑性进行概率本构建模。该模型采用主成分分析降低输入和输出的维度。输入参数包括纤维的空间分布、纤维半径和纤维体积分数，输出空间则由应力–应变曲线构成。所提出的模拟器可提供降阶输入和输出表征的均值与标准差，并揭示每个测试样本的最大应变和应力。

高斯过程的应用还延伸至材料的晶体塑性建模。在其中一项研究中，[549]采用函数型高斯过程[550] 来预测代表性体积单元的应力–应变响应，从而建立微观结构形貌与宏观力学性能之间的联系。函数型高斯过程将输出建模为函数，而非标量，因此能够预测完整的曲线或场，而不是单个响应值 [551]。图 30a 展示了该研究所用函数型高斯过程框架的图示表示。该框架纳入力和位移等场变量，以及晶粒尺寸、形状和取向等微观结构形貌参数。模型使用来自 50 个不同微观结构代表性体积单元的数据进行训练，每个单元均包含 100 个晶粒；这些数据取自增材制造零件的晶体塑性模拟。图 30b 展示了函数型高斯过程对含 300 个晶粒的未见代表性体积单元的应力–应变曲线预测结果。与晶体塑性有限元模拟相比，结果显示该方法性能稳健，同时大幅缩短了计算时间。尤其是，所提出的函数型高斯过程可利用相对较小的数据集进行训练，并推广至晶粒数量多得多的代表性体积单元。

高斯过程在小型数据集上具有强大的不确定性量化能力，这促使研究人员通过引入额外的物理特征对其进行扩展。[555], 介绍了其中一种尝试：作者将物理约束，具体而言是单调性，纳入晶体塑性建模的高斯过程框架，以降低数据需求。结果表明，与标准高斯过程相比，单调高斯过程的后验方差显著降低。然而，当预测超出训练数据集的范围时，单调性约束的作用会减弱，这表明受物理约束的高斯过程在外推时无法保持性能优势，其表现与标准高斯过程相似。

如 [556] 所示，高斯过程在形状记忆合金单晶的各向异性塑性建模方面也表现出优异性能。在这项研究中，高斯过程使用不同驱动条件下、来自不同晶体取向的数据进行训练。输入由晶体塑性模拟的热机械响应构成，包括相变、应力和相变诱发塑性。训练后的模型能够有效预测各向异性行为，并准确捕捉此前未见过的晶体取向所对应的响应。

预测材料在增材制造等生产工艺或包括减材工艺在内的后制造工序中的塑性变形至关重要，因为工艺参数会强烈影响所形成的微观结构，进而影响材料属性，尤其是塑性等力学行为。高斯过程非常适合将工艺–结构–性能关系纳入材料建模。例如，

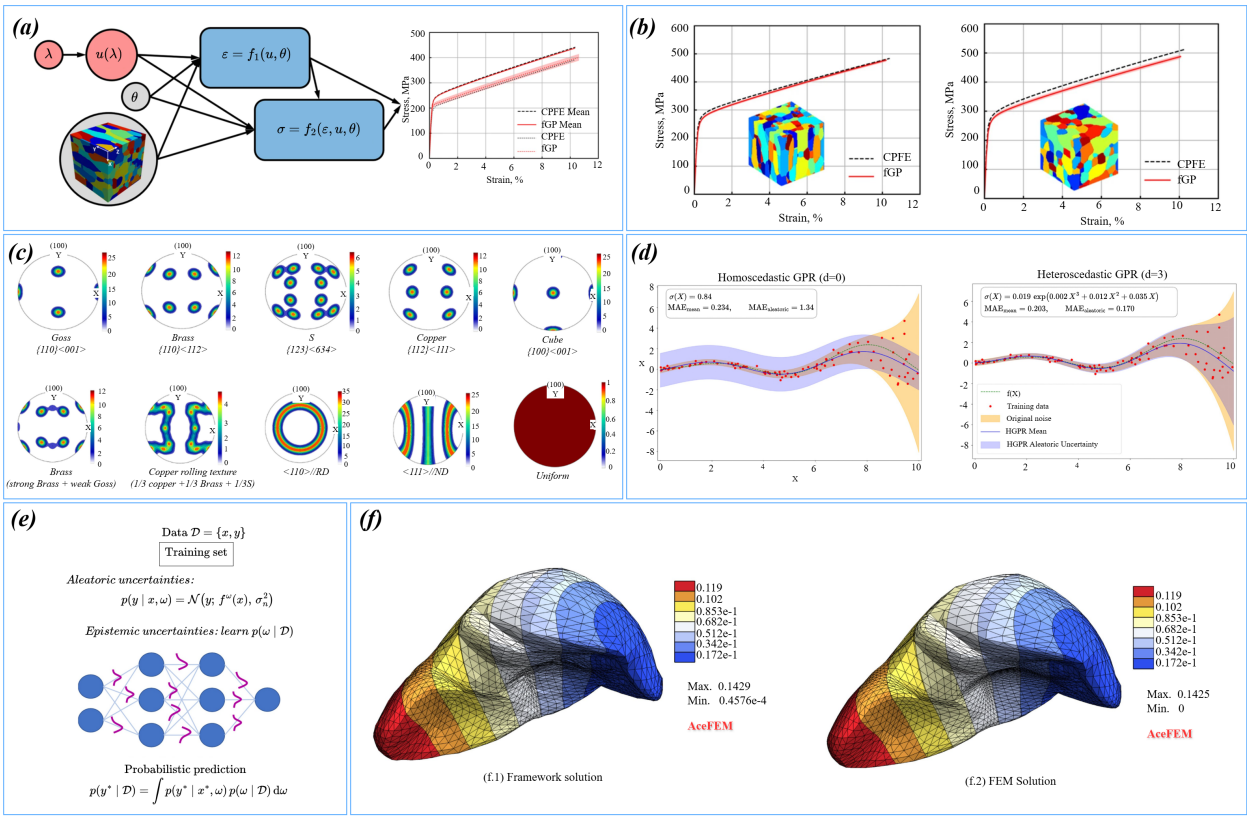


图 30：（a）表示文献 [549]中提出的函数型高斯过程的图形网络。该模型将加载参数（λ）、位移（$\mathbf{u}$）和本构模型（θ）以及微观结构形貌作为输入。预测输出为晶粒级应力和应变响应，以及它们在代表性体积单元上的均值。（b）利用（a）中的函数型高斯过程模型，对包含 300 个晶粒的未见代表性体积单元预测得到的应力–应变曲线 [549]。（c）文献 [552]中使用的织构组分。采用不同的织构组分生成取向分布函数，进而构建不同的微观结构，用于基于高斯过程自回归的微观结构演化预测。（d）使用同方差和异方差高斯过程得到的均值和方差预测 [553]。异方差高斯过程采用三次多项式噪声模型，从而提高了均值和方差预测的准确度。（e）用于考虑数据（偶然）和模型（认知）引起的不确定性的贝叶斯神经网络示意图。与将输入数据和模型参数视为固定值的传统人工神经网络不同，贝叶斯神经网络将这些量表示为概率分布，通常为高斯分布。（f）使用文献 [554]中提出的框架，得到肝脏在外力作用下的三维节点位移场。该模型将自编码器与高斯过程相结合，其中高斯过程在自编码器的潜在空间中运行，将力场映射为位移场。

该研究 [557] 采用多输出高斯过程整合来自多个来源的数据，包括通过取向成像显微术获得的微观结构定量表征，以及通过球形纳米压痕测得的力学性能。所提出的多输出高斯过程同时对微观结构的演化及其相关性能进行建模。

在一项相关工作中，该研究 [558] 在用于最优材料设计的贝叶斯优化框架内，融合了来自多个来源的信息，包括材料成分等工艺参数、微观结构描述符以及力学响应数据。在涉及微观结构分辨率的多尺度材料设计问题中，使用晶体塑性有限元法生成设计空间数据的计算成本很高。因此，需要采用代理建模方法，尤其是为了捕捉微观结构演化。在这方面，该研究 [552]探索了用于微观结构演化的高斯过程自回归模型。作者将高斯过程与时间序列自回归相结合[559], , 从而能够捕捉非线性系统动力学，并将该框架应用于受拉伸张量作用的面心立方多晶材料的微观结构演化建模。高斯过程自回归模型的输入数据由合成微观结构组成，如图30c所示，其中包括面心立方材料中常见的、具有不同形貌和织构的面心立方微观结构集。晶粒形貌由平均晶粒尺寸和平均长宽比等特征来表征。为降低时间序列微

观结构数据的维度，采用主成分分析获得候选微观结构集的低维投影。所提出的高斯过程建模、自回归与主成分分析相结合的方法，通过显著降低计算成本，在高效微观结构演化建模方面展现出巨大潜力。

近期，这项研究 [553] 采用异方差高斯过程，以考虑由测量误差或材料属性固有变异引起的异方差性。作者没有显式建模复杂的输入相关噪声结构，而是采用基于多项式的噪声模型来捕捉多孔材料有效应力预测中的不确定性。图30d展示了同方差和异方差高斯过程模型得到的均值与方差预测，其中采用三次多项式噪声模型的异方差高斯过程在一维数据集的均值预测和不确定性估计方面均表现出更高的准确度。图 30d

6.2. 贝叶斯神经网络（*BNN*）

科学与工程领域的不确定性量化对于确保预测附带置信度度量至关重要。这类问题通常涉及两种不确定性：偶然不确定性，源于固有的随机性和含噪测量；认知不确定性，则由有限数据和不完善的模型导致。后者通常可以通过收集更多数据来降低。除高斯过程外，贝叶斯神经网络（BNN）[560, 561] 还提供了另一种将不确定性量化纳入基于学习的模型的框架。贝叶斯神经网络是一种人工神经网络，其权重被建模为概率分布，而非固定值。这种贝叶斯表述使网络能够在给出预测的同时量化不确定性，从而捕捉有限数据和模型不确定性所导致的不确定性。贝叶斯神经网络的一般架构如图30e所示，其中表示了这两种不确定性。首先，偶然不确定性通过似然中的噪声项编码，如下所示：

$$p(y|x,\mathbf{w}) = \mathcal{N}(y|f_{\mathbf{w}}(x),\sigma^2(x)) \tag{34}$$

其中，$f_{\mathbf{w}}(x)$ 表示网络预测，$\sigma^2(x)$ 表示数据噪声，该噪声可以是常数，也可以由网络学习得到。其次，在贝叶斯推断框架 [562] 中，通过为模型参数$\mathbf{w}$ 指定概率分布来刻画认知不确定性。由此得到的权重后验分布为

$$P(\mathbf{w}|D) = \frac{p(D|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(D)} \tag{35}$$

最后，通过对权重后验分布进行边缘化，得到预测：

$$p(y^*|x^*,D) = \int p(y^*|x^*,\mathbf{w})P(\mathbf{w}|D)d\mathbf{w} \tag{36}$$

贝叶斯神经网络已应用于材料塑性领域以量化不确定性。一项相关研究 [563], 在开发用于均匀化和局部化复合材料的塑性代理模型时，明确考虑了偶然不确定性和认知不确定性。该模型涵盖五种输出，包括弹性刚度、泊松比、用于参数识别的有效塑性定律参数，以及纤维体积分数。该研究采用变分推断 [564] 而非马尔可夫链蒙特卡罗采样，通过近似后验分布而不是依赖精确的贝叶斯推断，报告称准确度、计算效率和可扩展性均有所提高。然而， [565], 中的研究对这一结论提出了质疑。该研究的作者比较了贝叶斯推断、变分推断和马尔可夫链蒙特卡罗方法，以估计贝叶斯神经网络参数的后验分布，从而预测与钢合金蠕变寿命相关的材料属性。研究发现，与其他方法相比，马尔可夫链蒙特卡罗方法得出的结果更为可靠。

贝叶斯神经网络也用于 [566] 预测具有多晶织构的单晶的 Hill 屈服函数塑性各向异性。作者采用变分推断，量化对 [567]提出的屈服函数六个各向异性常数进行估计时的不确定性。尽管卷积神经网络通常用于提取晶体学织构特征，本研究转而利用广义球谐函数 [568]作为织构表示的傅里叶基，随后通过对人工神经网络输出进行变分推断来量化不确定性。类似地， [569] 的研究将贝叶斯推断应用于织构优化，以提高铝合金的成形性。本研究以基于人工神经网络的替代模型取代晶体塑性模拟，从而加速织构优化，并在有限次数的试验中应用贝叶斯优化。所提出的方法最终确定了使铝合金板材呈现各向同性塑性的最佳体积分数分布。

对于结构的大变形分析，该研究 [570] 采用 U-Net架构，并使用由有限元模拟节点值获得的力–位移数据进行训练。为考虑不确定性，研究中纳入了贝叶斯推断。鉴于网络规模庞大且参数数量众多，马尔可夫链蒙特卡罗方法会变得极其缓慢且计算成本高昂。因此，采用近似后验分布进行贝叶斯推断，提供了一种实用且可扩展的替代方案。

除人工神经网络和卷积神经网络外，概率循环神经网络也已应用于历史依赖塑性问题。例如，研究 [571]采用贝叶斯循环神经网络 [572]构建多保真度框架，利用多种数据保真度：低保真度数据集生成效率较高，但噪声和误差较大；高保真度数据集则更准确，但获取成本较高。这些数据集由双相材料的代表性体积单元构成，其中包含弹性纤维和呈现硬化行为的塑性变形基体，且体积分数各不相同。

更广泛地说，将贝叶斯推断融入机器学习模型以实现不确定性量化，正受到越来越多的关注。例如，研究 [573] 提出了一种递归贝叶斯神经网络，用于地质材料在单调与循环加载条件下的本构建模。在这一框架中，网络将当前应力状态和应变增量作为输入，以预测后续应力状态。与长短期记忆网络等传统循环神经网络不同，后者将历史信息编码在隐藏状态中；递归形式则将预测的应力状态反馈至模型，以计算下一次预测。此外，模型在最终层加入了概率输出层，使用高斯分布对预测结果进行建模，从而明确量化不确定性。

近年来，通过 [554]中提出的统一框架，深度学习方法与高斯过程的结合得到了进一步发展。在这项工作中，作者将自编码器与高斯过程结合起来，为非线性固体力学构建代理模型。该框架的核心思想是利用自编码器将全场位移响应编码到低维潜在空间中。在该潜在空间内，训练高斯过程以学习概率力–位移关系。随后，解码器将潜在空间预测映射回物理空间，重建全场位移响应。对于未见过的力输入，高斯过程会估计潜在位移变量的分布，再通过解码得到相应的位移场及其不确定性估计。本质上，自编码器为高维位移场提供紧凑表征，而高斯过程则在这个降维空间中进行概率学习。如图 30f 所示，研究人员使用受外部体力作用的三维肝脏非线性仿真验证了所提出的框架，结果表明该框架能够准确预测位移场，并实现稳健的不确定性量化。

6.3. 小结

概率机器学习与深度学习方法在材料表征和本构建模的不确定性量化方面已展现出巨大潜力。本节综述了文献中报道的、用于量化材料建模中不确定性的常用方法。其中，高斯过程与贝叶斯神经网络是材料表征各尺度上最常采用的方法。这两种方法不仅提供预测，还给出不确定性估计，因而特别适用于材料建模中的不确定性量化，尤其是在低保真度或数据稀缺场景下。

高斯过程是基于核的非参数模型，通过其预测方差量化认知不确定性，因而适用于小数据问题。贝叶斯神经网络通过将权重建模为概率分布（通常为高斯分布）来扩展标准人工神经网络，从而能够对高维塑性问题（如各向异性、历史相关行为和多尺度分析）进行不确定性感知学习。这两种方法已成功应用于不同尺度和数据结构下的本构建模。

此外，多项研究采用贝叶斯推断或变分贝叶斯推断来估计不确定性并优化学习框架。为便于简要概览，表9总结了本节所讨论的概率方法的代表性应用。

7. 生成式人工智能方法

生成式人工智能是机器学习的一个子领域，旨在学习数据的底层概率分布，并随后生成在统计上与观测数据一致的新样本 [579, 580]。形式上，其目标是学习一个由 θ 参数化的模型，使得 $p_\theta(x) \approx p(x)$，从而能够生成新的样本 x'，这些样本呈现的统计属性与从真实数据分布中抽样所得的样本相似 [581]。

与判别方法（包括上文讨论的许多传统机器学习和深度学习方法）侧重于预测标签或响应不同，生成模型旨在表征完整的数据生成过程。这

表 9： 塑性领域概率人工智能应用的不完全列表

应用	方法	参考文献
参数识别	利用高斯过程从各种材料响应中生成应变和应变率硬化参数	[50]
	利用高斯过程为晶体塑性材料模型提出复合贝叶斯优化策略	[533]
	利用贝叶斯推断和马尔可夫链蒙特卡罗采样，识别316H不锈钢	[574]
	利用贝叶斯神经网络和晶体塑性，基于晶体学预测Hill屈服函数的各向异性常数多晶织构	[566]
本构模型代理模型	利用高斯过程预测钢的热黏塑性行为，以应变、应变率和温度作为输入，以应力作为输出	[541]
	使用异方差稀疏高斯过程捕捉6061铝合金的热塑性行为，并将其与标准高斯过程、人工神经网络和唯象本构模型进行比较	[547]
	开发多种机器学习方法（包括高斯过程），用于预测热塑性变形	[575]
	基于晶体信息引入高斯过程，以捕捉形状记忆合金的各向异性塑性响应	[556]
	将多源工艺–结构–性能数据融入高斯过程，以预测材料设计中的变形	[576]
	结合深度学习与贝叶斯推断，从纳米压痕实验中捕捉弹塑性性质	[577]
织构优化——tion	利用人工神经网络和贝叶斯推断优化晶体学织构，并估算其体积分数	[569]
工艺–性能模型	将高斯过程和人工神经网络结合起来，把增材制造工艺参数与屈服强度、抗拉强度和伸长率联系起来	[578]

使其能够在高维空间中进行合成、插值和概率推理 [582]。生成式人工智能的核心在于利用潜变量表示，并结合深度神经网络，在低维潜在空间与复杂的可观测数据之间建立映射。这些模型经过训练，以近似数据的似然或隐式分布，从而能够生成多样化的样本，同时保留数据固有的变异性和不确定性。

在材料科学与工程领域，生成式人工智能引起了广泛关注，并已应用于众多问题。许多综述论文调查了其在材料发现的生成式与逆向设计方法 [27, 583–586], 、无机材料设计 [587, 588], 以及晶体材料应用 [581, 589]中的应用。尽管这一领域相对年轻，但已受到广泛关注，并在持续快速发展。

在本文的研究范围内，本节介绍应用于本构建模和材料表征的生成式人工智能模型，重点关注塑性变形和微观结构演化。具体而言，我们综述生成对抗网络（GANs）、归一化流（NFs）、变分自编码器（VAEs）和扩散模型。每种方法在样本质量、可解释性和概率表征方面各具优势，以下各小节将讨论它们在生成微观结构和力学性能数据方面的应用。

7.1. 生成对抗网络（*GANs*）

生成对抗网络（GANs）是一种自监督或无监督学习技术，旨在通过两个神经网络（即生成器和判别器）之间的对抗训练方案来逼近数据分布 [590], 如图 31a 所示。生成器记作G_θ，作为映射网络，学习模仿真实数据的分布，并根据从先验分布中抽取的潜变量生成新的逼真样本，$z \sim p(z)$。判别器D_ϕ则充当二元分类器，其作用是区分真实数据样本与生成器生成的伪样本。

生成对抗网络的训练过程可表述为一个极小极大优化问题：生成器力求生成与真实数据无法区分的样本，而判别器则力求正确分类真实样本和合成样本。这种对抗交互推动两个网络同时改进，使生成器能够隐式地学习底层数据分布。支配这种对抗行为的目标函数可表示为

$$\min_{\theta}\max_{\varphi}\mathbb{E}_{x\sim p_{data}(x)}[\log D_{\varphi}(x)]+\mathbb{E}_{z\sim p(z)}[\log(1-D_{\varphi}(G_{\theta}(z)))] \tag{37}$$

其中，x 表示从真实数据分布中抽取的真实数据样本，例如通过实验测得的力学响应或材料微观结构；z表示从先验分布中采样得到的潜变量。参数 θ 对应于生成器网络的可学习权重和偏置，而 ϕ 表示判别器网络的可学习参数。当目标函数达到平衡时，生成器应已学会目标数据分布，从而能够合成与训练数据在统计上相一致的新样本。

生成对抗网络的核心思想是将分布学习构建为一种竞争博弈，从而建立一个能够学习生成逼真数据的模型。在这种博弈中，生成器通过欺骗判别能力不断增强的对手来提升自身性能。生成对抗网络尤其适用于高维数据生成；然而，其训练可能颇具挑战，因为训练不稳定性和模式崩溃等问题 [591, 592], 可能会妨碍收敛 [593, 594]。这些局限性在早期的生成对抗网络框架中尤为突出，促使研究者开发了众多变体，包括 Wasserstein生成对抗网络 [595], 条件生成对抗网络（cGAN） [596], 深度卷积生成对抗网络 [597], 和 InfoGAN [598], 等。不过，目前只有少数生成对抗网络变体被用于预测应力或应变等场变量，以及材料微观结构重构，接下来我们将对此进行讨论。

7.1.1. 用于场变量预测的生成对抗网络

对场变量（包括应力和应变）进行预测以评估力学响应，是生成对抗网络的关键应用之一，并已在多项研究中得到探讨 [602–605]。该过程通常从针对特定问题训练生成对抗网络模型开始，所用应力分布由有限元法生成，同时改变边界条件、加载和几何形状等参数。这一流程产生一个数据集，供生成对抗网络学习，并随后预测新情况下的应力分布。

例如，在 [606], 的早期工作中，作者生成细网格结构的有限元法数据集，用于预测二维应力分布。该数据集包含60种不同几何形状、10种载荷模式和8种边界条件模式，针对离散为 128×128 个四节点四边形单元的矩形区域，共产生38,400个训练实例。采用条件生成对抗网络（cGAN） [596]来预测冯·米塞斯应力场。与原始生成对抗网络不同，条件生成对抗网络将标签或输入变量等附加信息同时纳入生成器和判别器，使模型能够生成明确以给定输入或约束为条件的输出。与任意样本相比，这可带来更准确且面向任务的预测。

因此，条件生成对抗网络在场变量预测任务中展现出巨大潜力，尤其适用于要求输出满足特定问题条件的场景。这一能力推动了更多研究，包括将其应用于非线性材料行为和非均质性显著的场景。例如，[607] 采用条件生成对抗网络预测分层复合材料微观结构中的应力与应变张量。在该研究中，研究人员使用有限元法生成的二维复合材料随机几何形状和体积分数数据，训练条件生成对抗网络进行场预测。同样，研究 [608]将注意力机制融入条件生成对抗网络架构，以实现应力超分辨率。在该研究中，以复合材料螺栓连接结构数值模拟得到的粗网格应力数据作为输入，并预测细网格冯·米塞斯应力分布作为输出。

研究表明，基于视觉的人工智能方法在预测非均质材料中的应力场方面尤其具有鲁棒性。为此，研究 [609]比较了经典机器学习算法与基于视觉的方法在随机非均质材料应力场预测中的表现。经典方法采用结合随机森林和人工神经网络模型的正交分解，而基于视觉的方法则使用卷积神经网络和条件生成对抗网络。训练数据集由夹杂物或孔洞的位置和尺寸随机变化的材料构成。结果表明，卷积神经网络和条件生成对抗网络模型表现更优，凸显了它们在应力场预测方面的鲁棒性和有效性。

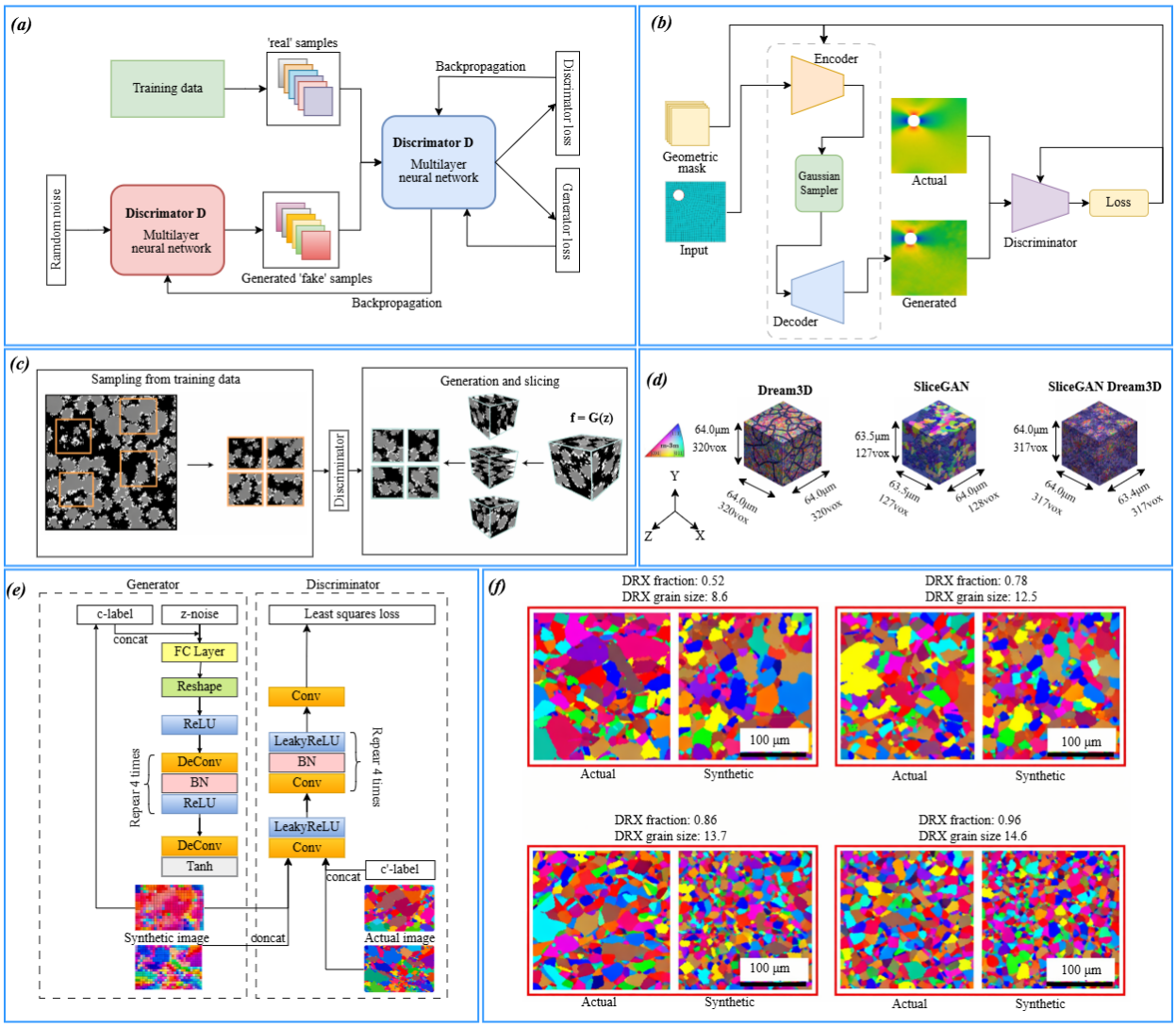


图 31： （a）GAN 的架构，由生成器和判别器组成。生成器生成伪样本，并将其与真实样本一同输入判别器，使判别器能够区分真实数据和伪数据。（b）所提出的生成式学习框架示意图 [599]。生成器采用类似 U-Net 的编码器–解码器架构，在编码器与解码器之间进行高斯采样。除接收真实应力场图像和生成的应力场图像外，判别器还接收几何掩膜作为输入，以引导、约束并调控生成过程。（c）SliceGAN 的训练过程 [600]。从训练数据中抽取真实图像，生成器生成三维伪图像。随后沿主轴对这些图像进行切片，为判别器创建兼容的二维数据集。（d）将（c）中 SliceGAN 生成的三维微观结构与计算工具 DREAM.3D 和集成模型的结果进行比较。图像表明，与单独使用任一方法相比，集成模型能够更好地捕捉超细晶粒。（e）所提出的 cDCGAN 的架构 [601]。生成器和判别器均融入了通过有限元法获得的、带标签且与历史相关的动态再结晶分数和动态再结晶晶粒尺寸信息。这些标签分别与生成器中的噪声向量以及判别器中的实际数据进行拼接。（f）基于（e）中模型，在演化过程中对实际微观结构和生成微观结构进行比较 [601]，所选取的为特定点。随着动态再结晶体积分数增加，会形成大量动态再结晶晶粒，而非简单的晶粒生长，证明了该生成式框架在捕捉微观结构演化机制方面的有效性。

上述用于场变量预测的生成对抗网络应用通常将图像同时用作输入和输出数据。然而，从力学角度来看，问题所涉及的显式物理现象通常未被纳入，因此这些模型在训练数据范围之外的外推性能较差。为解决这一局限，[599]的研究提出了一种基于生成对抗网络和图神经网络的生成式框架，以加速有限元分析。在该框架中，生成对抗网络学习底层数据分布，旨在实现外推

超出训练数据集范围。所提出的框架如图 31b 所示，由生成器和判别器组成。生成器采用与 U-Net 类似的编码器–解码器架构，并结合高斯平滑；判别器则采用 PatchGAN [610] ，基于局部数据块进行判别。这种局部评估增强了对生成器的反馈，从而带来更稳健的预测。本研究的重要意义在于其数据表示方式：对边值问题进行离散化和预处理，以提取节点信息，包括坐标以及每个节点对应的边界条件。输出为各节点的应力和应变分量，可直接传递给有限元后处理器。对于复杂结构，在生成对抗网络架构中嵌入图神经网络，以编码域信息。总体而言，该模型无需迭代求解本构方程和平衡方程，从而加速有限元分析。

对于科学问题，确保人工智能模型的物理一致性至关重要。这一要求促使人们将物理约束融入生成模型，这与第5节讨论的物理增强神经网络类似。近期的研究进一步将这一概念拓展至基于生成对抗网络的框架。例如，物理信息生成器生成对抗网络（PIG-GAN）[611]将物理知识嵌入生成器，而物理信息判别器生成对抗网络（PID-GAN）[612] 则将物理约束融入判别器。这些方法旨在降低对抗不确定性，同时保持对控制物理规律的保真度。另一种方法——微分方程生成对抗网络（DeqGAN） [613],通过引入基于物理的约束项，使生成对抗网络能够学习损失函数本身。在一项密切相关的研究中， [614] 研究者将物理规律直接融入生成对抗网络框架，以预测应力和应变分布。在该方法中，生成器充当物理信息神经网络，并使用定义域内的配点而非随机噪声作为输入，将其映射为应力场和应变场。这种设计在数据生成过程中强化了对物理定律的遵循。结果表明，该方法能够对含孔板的弹性问题做出准确且符合物理规律的预测。

生成对抗网络的应用还包括数据增强，尤其是在数据稀缺场景中，此时机器学习或深度学习模型拟用作代理预测器。在这类情况下，生成对抗网络用于增加可用数据，并提高基于机器学习的代理模型的鲁棒性。例如，在 [615], 中，作者旨在利用两阶段生成对抗网络框架，扩增用于高熵合金硬度预测的数据集。所提出的方法生成额外数据，以支持机器学习模型的训练。具体而言，第一阶段通过让生成器与判别器针对真实样本进行训练，使用生成对抗网络生成合成特征数据。第二阶段则使用一个独立的机器学习模型，为生成的特征生成标签。随后，将合成的特征–标签对与原始训练数据相结合，以训练最终的机器学习模型，从而获得更鲁棒的硬度预测。

随后的一些研究采用了类似的数据增强策略。在 [616], 中，研究人员使用生成对抗网络扩增镁合金在压缩载荷下各向异性变形的完整应力–应变流动曲线，并考虑了11种退火条件和三种加载方向。生成的数据随后用于训练门控循环单元网络，以预测材料响应曲线。类似地， [617]采用生成对抗网络生成额外数据，用于混凝土粘结结构的强度预测，随后将这些数据用于训练人工神经网络。最近， [618] 利用基于生成对抗网络的数据增强来扩充用于预测镁合金力学性能的训练数据集。增强后的数据用于训练KAN，以预测延性、屈服强度和极限抗拉强度。这些数据增强应用表明，生成对抗网络生成的样本与原始数据分布保持一致，并能有效改进下游机器学习模型的训练。

7.1.2. 用于微观结构重构的生成对抗网络

尽管用于表征材料微观结构特征的显微技术取得了显著进展，但由于成本高、可及性有限以及实际应用中的挑战，其应用仍受到限制。为了实现统计上稳健的分析，需要大量微观结构图像数据集，这进一步加剧了这些局限性 [619]。为应对这些挑战，基于实验获得的部分几何和形态学信息来生成合成微观结构的计算方法日益受到关注 [620–622]。在这些方法中，包括频率学派方法和概率技术在内的基于人工智能的方法已成为强有力的替代方案，能够根据真实材料的有限描述符合成具有代表性的微观结构样本。尤其是，生成对抗网络已有效应用于微观结构重构，为生成大规模微观结构数据集提供了一种可扩展且经济高效的手段。这些数据集被广泛用于材料塑性变形的研究与表征，有助于开展高通量材料分析 [621]。

利用各种新兴计算模型和工具（如 DREAM.3D），合成微观结构生成已得到广泛发展 [623], 元胞自动机 [624], 和 Neper [625], 等方法。在这些工具中，DREAM.3D 一直是最有前景的工具之一，能够生成颗粒形状相对简单的合成微观结构。然而，近期生成对抗网络的应用展现出了更强的能力。例如，在[626], 该研究中，作者基于沿正交平面获取的二维切片图像生成三维微观结构。研究对象为 AA7075-O铝合金，其微观结构含有多个颗粒，这些颗粒的形状、尺寸和颗粒–基体界面强度各不相同，使用传统计算工具难以再现这些特征。生成的微观结构与真实微观结构共同用于多尺度分析框架中的应力–应变响应预测。该框架纳入了颗粒诱发的空洞形核以及微观尺度上的应变局部化，从而形成集成式人工智能与有限元方法。结果表明，该方法与采用传统计算方法进行三维微观结构生成所获得的结果高度一致。本研究采用的生成对抗网络架构为 SliceGAN [600], , 它专为仅使用二维训练数据生成逼真的三维结构而设计，其方法是利用二维判别器的反馈来训练三维生成器，如图 31c 所示。生成器是一个三维卷积神经网络，以随机潜向量为输入，并通过一系列转置卷积层将其映射为三维体素化体积。与之相反，判别器以二维方式运行：SliceGAN 沿主轴从生成的三维体积中提取多个二维切片，并训练判别器区分真实二维图像与从生成体积中采样得到的二维切片。这样便避免了维度不匹配，因为判别器接收的真实输入和生成输入都是二维的。

使用二维电子背散射衍射图进行三维微观结构重构（如 SliceGAN）存在局限性：难以准确表示预先定义的颗粒尺寸和形貌，也难以再现电子背散射衍射扫描图中存在的超细晶粒。为解决这些问题，本研究 [627] 将基于生成对抗网络的三维微观结构生成与 DREAM.3D 工具相结合。该工具基于晶粒填充，并符合电子背散射衍射微观结构图中可获得的统计信息。该过程首先将电子背散射衍射图分为超细晶粒和粗晶粒。随后确定微观结构描述符，以表征二值微观结构，并将这些二值表示用于 SliceGAN 的训练集，以训练卷积神经网络判别器。最后，使用 DREAM.3D 晶粒填充算法处理生成的三维二值图像，从而获得最终的三维微观结构。如图 31d 所示，三种经评估方法生成的三维微观结构表明，结合两种方法能够提升细晶粒的生成效果。

相场法是一种微观结构建模方法，可在无需显式追踪界面的情况下模拟微观结构演化，例如相变、晶粒生长和凝固 [628]。研究 [629]利用相场建模生成微观结构图像，用于训练生成对抗网络，为有限元法分析提供了一种计算成本更低的数据增强方法。这凸显了生成对抗网络能够在极短时间内生成大量微观结构样本的能力，从而为各种应用提供丰富的数据集。然而，生成对抗网络生成的微观结构图像的可靠性仍存在争议，需要借助定量指标评估其准确度和物理一致性。研究 [630] 考察了生成的微观结构与原始数据在统计相似性和物理感知方面的差异。统计相似性通过结构相似性指数和信噪比等指标进行评估；物理感知则通过形态相似性进行评估，并利用降阶模型量化形态相似性，以预测宏观力学性能，再比较生成微观结构与原始微观结构对应的预测结果。该研究采用 StyleGANv2 [631], , 这是一种采用基于风格的生成器架构的生成对抗网络变体。与原始生成对抗网络直接将潜向量输入生成器、导致特征纠缠的做法不同，StyleGANv2 引入了映射网络，用于调制各个层，从而能够分别控制粗、中、细尺度特征。这一能力提升了图像质量和训练稳定性。同样，文献 [632] 对使用 StyleGAN 生成的三维微观结构与双相钢中实验观测到的微观结构进行了比较研究。

上述微观结构生成模型往往忽略基于时间序列的变形历史所产生的影响，尽管它在驱动微观结构演化方面至关重要。因此，若不将时变数据作为输入，使用生成式人工智能方法（尤其是生成对抗网络）预测微观结构演化便颇具挑战。为解决这一局限，该研究 [601]提出了一种新方法，用于建立变形历史数据与生成对抗网络潜向量之间的关联。该方法利用有限元法获取微观结构的动态再结晶分数和动态再结晶晶粒尺寸，并纳入应变、应变率和温度等与变形历史相关的变量。为此，研究采用 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov（JMAK）理论 [83] 作为经验模型，预测微观结构演化过程中的平均晶粒尺寸——

。所得动态再结晶分数和动态再结晶晶粒尺寸作为带标签数据提供给网络。本研究采用的生成对抗网络变体为条件深度卷积生成对抗网络（cDCGAN） [597], , 如图 31e 所示。该网络通过将辅助信息纳入对抗学习过程，实现可控且有针对性的生成。在此框架中，辅助信息由带标签的动态再结晶相关数据构成；如图 31e 所示，这些数据与生成器中的噪声向量以及判别器中的真实数据进行拼接。将变形历史纳入微观结构构建框架后，可生成更加真实的晶粒尺寸图像，如图 31f 所示，这表明基于生成对抗网络的方法在微观结构演化建模方面的能力有所提升。

此外，生成对抗网络已展现出对异构材料（如复合材料）进行合成微观结构重构的可行性。例如，[633]的研究将生成对抗网络应用于纤维增强陶瓷基复合材料，其中深度卷积生成对抗网络同时用作生成器和判别器。该深度卷积生成对抗网络属于一个旨在实现高保真度微观力学模拟的框架，可用于预测弹性性质和非弹性响应。对于含有各种填料的混杂复合材料， [634] 的研究将条件生成对抗网络嵌入计算框架中，以生成定制化微观结构及其对应的结构–性能关系，具体而言即应力–应变曲线。针对当前描述符的局限性，例如隐式优化（描述符充当判别器的标签）、忽略复杂形态特征的标量描述，以及使用维度相同的描述符，[635]的研究提出了一种统计感知生成对抗网络。在该模型中，生成器将切片描述符映射为三维微观结构，而判别器采用类 ResNet 描述符回归网络对二维切片进行评估，从而能够在训练过程中实现显式优化。

7.2. 归一化流（*NFs*）

归一化流（NFs）旨在通过一系列可学习变换 [636–638]，将简单的概率分布（如高斯分布）转换为目标数据分布，从而学习复杂数据。这些变换具有可微性和可逆性，使 NFs 能够显式地建模数据分布，并实现精确的对数似然评估和高效抽样。NFs 的核心思想是从易于抽样的分布（通常是高斯分布）出发，然后依次应用一系列小幅、可学习的变换。每个变换都会稍微调整分布的形状，使其逐渐匹配数据的结构，同时在每一步保持可逆性。

与其他生成式人工智能模型相比，归一化流在材料建模和微观结构生成中的应用仍相对有限，因此这一领域为进一步研究提供了广阔空间。近期研究已将归一化流应用于材料科学中的晶体结构生成，相关综述见 [581, 589]。在微观结构重建与表征方面， [639] 中的研究提出了一种主动学习框架，采用条件归一化流 [640] 进行微观结构逆向设计，大幅减少了训练所需的带标签数据量。尽管所提出的主动学习模型在带标签数据对的使用方面效率较高，但仍需要大量无标签数据。

对于多孔介质， [641] 中的研究将条件归一化流用作连续模型，以生成具有定制属性的微观结构，并将这些属性作为带标签数据提供给模型。在这种方法中，使用高斯分布将三维微观结构图像编码到潜在空间中。通过从高斯分布中抽样并应用属性引导的变换，可生成与特定目标属性相对应的新潜在表示，从而根据所需属性，将一个概率分布有效映射到另一个概率分布。

7.3. 变分自编码器（*VAEs*）

变分自编码器（VAEs）是一类人工神经网络，它们通过编码器将高维数据压缩到低维潜在空间中，再通过解码器重建数据，同时还能够生成新的样本 [642]。与经典自编码器不同，变分自编码器会对潜在空间施加概率结构。具体而言，编码器将输入映射为潜变量上的概率分布，解码器则根据从该潜在分布中抽取的样本重建输入，如图 32a所示。

在变分自编码器中，假设观测数据$\mathbf{x}$ 由从先验分布$p(\mathbf{z})$中抽取的潜变量$\mathbf{z}$生成，该先验分布通常选为标准正态分布。生成过程由似然模型$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$定义，该模型由参数为 θ的解码器参数化。由于真实后验分布$p_\theta(\mathbf{z}|\mathbf{x})$通常难以处理，因此引入由参数为 ϕ的编码器参数化的近似后验分布$q_\varphi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$。模型通过最大化边际对数似然的证据下界（ELBO）进行训练，其表达式为

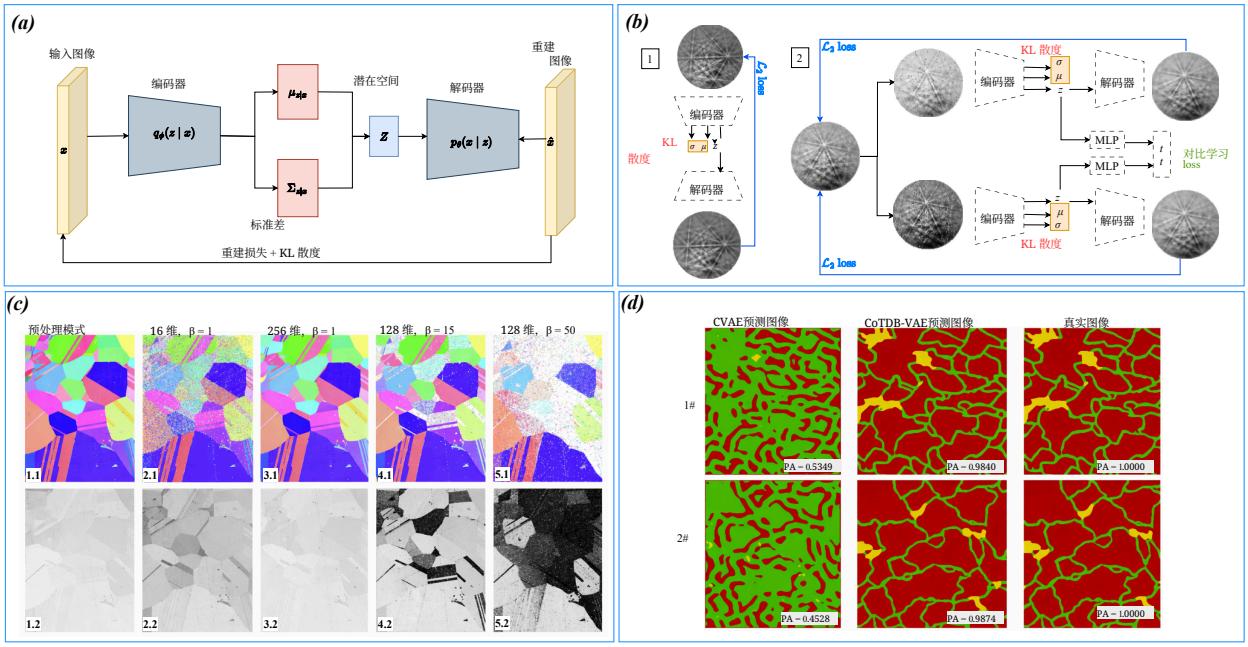


图 32： (a) 由编码器和解码器组成的变分自编码器（VAE）示意图。编码器将输入映射到概率潜空间（均值和方差），该空间捕捉用于表示变异性和抽样的压缩低维分布。解码器根据这些潜在样本重建原始输入。(b) [643]中使用的典型VAE架构和并行式VAE架构。并行式架构由两个VAE组成，并在多层感知机之间定义对比损失，以稳定潜在空间。(c) 基于(b)中模型的索引结果 [643]。随着潜在空间维度增加，重建质量有所提升，维度为256时性能最佳；然而，增加 β 则呈现相反的效果。(d) 对比 [644] 中所提出模型与传统VAE的重建结果。传统VAE重建的图像存在一定模糊，而所提出的模型重建质量更高，特征保持也更准确。

$$\mathcal{L}_{ELBO}(\mathbf{x}) = \mathbb{E}_{q_\varphi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}[\log p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})] - KL(q_\varphi(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p(\mathbf{z})) \tag{38}$$

目标函数由两个损失项组成。第一项，即重建损失，促使模型捕获准确复现输入数据所需的关键信息。第二项为 KL散度，它约束潜在表示遵循预先设定的先验分布。这两项共同促成平滑且结构化的潜在空间，从而能够从潜在空间中进行更真实的抽样。

变分自编码器已被应用于材料科学领域，用于性能预测和微观结构重构，这与基于生成对抗网络的方法类似。例如， [645]中的研究采用卷积变分自编码器 [646] 来预测合金在四点弯曲下的应力状态。无标签实验数据（如变形试样的图像）以及由有限元模拟获得的带标签合成数据（包括变形和应力场）分别作为无标签数据集和带标签数据集纳入模型。该模型采用最大差异法在两个数据集上进行训练，与仅使用带标签数据训练相比，预测准确度有所提高。为进一步增强变分自编码器框架， [647]中的研究在变分自编码器将微观结构映射为潜在表示之后引入了注意力机制。随后，该潜向量被用于序列到序列架构中，以考虑应力-应变数据中随时间变化的变量。

微观结构实现与重建是文献中广泛探索的变分自编码器应用之一。变分自编码器可用于学习材料及相结构晶粒图像中复杂晶粒的紧凑潜在表示，从而生成具有可调特征（如晶粒尺寸和取向）的新微观结构。在一种此类方法中，该研究 [648] 使用变分自编码器生成基于合成数据训练的逼真多晶晶粒结构。所开发的模型能够高效生成具有可控属性（如晶粒尺寸和数量）的新微观结构，从而补充基于物理的晶粒生长模型，并捕捉材料表征与微观结构生成所需的关键特征。

与潜在空间相关的一个关键挑战是，它们由具有强梯度的人工神经网络定义 [649]，这可能导致潜在空间中的微小扰动产生截然不同的微观结构。为解决这一问题， [650]中的研究结合了生成对抗网络和变分自编码器，由 β-VAE [651]提供潜在空间。β-VAE引入了一个参数 β，用于权衡 重建质量与潜在空间正则化，从而构建更平滑、表现更稳定的潜在空间。这有助于提高可解释性并建立结构–性能关联，同时生成对抗网络组件则增强了生成真实性。所提出的模型能够处理小型数据集，因为其中集成了可微分的数据增强方案，因此即使只有一张图像，也能准确重建和生成二维微观结构。

准确预测力学性能对于充分捕捉微观结构的异构特征及其对塑性变形机制的集体影响至关重要 [627]。为此， [643] 中的研究采用结合对比学习的变分自编码器，对衍射（菊池）花样进行编码 [652] ，将其映射至潜在空间，从而在保留微观结构信息的同时捕捉空间异质性。该方法能够对代表性区域的潜在特征进行映射，从而识别关键的微观结构变化，并获得更准确的表征，用于预测力学性能。如图 32b 所示，除标准变分自编码器外，还采用并行变分自编码器架构，通过引入对比损失来稳定潜在空间，同时保持重建质量，从而提高对采集噪声的鲁棒性。此外，将同一输入经过多种基于噪声的数据增强后重建为原始花样，以促使模型学习噪声不变表示。结果表明，变分自编码器的重建质量高度依赖于潜在空间的维度。低维潜在空间会导致重建效果较差，而较高维度的潜在空间则能显著提高重建质量，如图 32c 所示。

对微观结构的研究能够深入揭示材料属性，而建立相关模型对于准确预测力学性能至关重要。在这方面，研究 [653] 提出了一个变分自编码器框架，利用高温合金显微图像的小型数据集，从实验微观结构图像中学习有价值的表征。该框架提取的潜在特征相比基于卷积神经网络的方法，能够更好地预测屈服强度。同样，对于力学性能预测， [654] 中的研究通过将高分辨率变形场编码到潜在空间，利用局部实验测量的塑性数据训练变分自编码器。由此，模型能够捕捉塑性变形中的非均质性，而这种非均质性会显著影响力学性能。

为了提升多尺度模拟中的性能预测， [655] 引入了变分自编码器，以捕捉微观结构不确定性下非均质微观结构的空间相关性和有限尺寸效应。连接微观结构与材料属性的潜在表征可作为微观尺度求解器的高效代理模型。通过扩展变分自编码器，可在潜在空间中实现性能–结构–工艺相关性映射，正如 [656], 中的研究所探讨的，该研究利用高通量相场生成的微观结构进行训练。能够捕捉空间相关性并预测微观结构属性的模型可以生成新颖的微观结构，从而实现稳健的逆向设计。此外，该模型通过拉东–尼科迪姆定理 [657] 纳入不确定性量化，以便在输入分布发生变化时降低实验成本。

为进一步拓展变分自编码器的应用，该研究 [644] 通过开发生成式预训练基础模型，解决钢的成分-工艺-微观结构-性能预测问题。CoTDB-VAE将微观结构图像编码到潜在空间中，然后通过逆信息释放方法生成新图像。将这些生成的图像与成分和工艺数据结合后，输入多模态网络，以预测屈服强度、抗拉强度和伸长率等力学性能。CoTDB-VAE是一种用于显微组织分析的增强型VAE，它在密集块结构中集成了上下文Transformer，并采用深度可分离卷积。上下文Transformer在保留局部特征的同时捕获长程依赖，密集块有助于实现高效的特征传递并缓解梯度消失，而深度可分离卷积则减少了模型参数。传统VAE和所提出的CoTDB-VAE重建的微观结构图像如图32d所示，结果表明，后者具有更高的重建质量和更准确的特征提取能力。

7.4. 扩散模型

另一类生成模型是扩散模型（受 [658] 启发），其通过逆转逐步加噪过程来学习生成数据。其核心思想依赖于两个机制：前向过程和反向过程。在前向过程中，噪声会逐步、分阶段地少量添加到数据中，直至数据完全变得随机且无意义。该过程简单直接，不需要进行学习。

核心挑战在于从纯噪声开始逆转这一过程，并学习如何逐步去除少量噪声，以恢复有意义的数据。在训练过程中，模型会接收经过人工加噪的真实数据，其任务是预测应去除噪声中的哪些成分，从而随着时间推移提升去噪能力。扩散模型的各种变体已在扩散模型中得到探索， [659–662]。这些模型已在多种数据类型上成功训练，例如图像、 [663], 分子构象 [664], 和点云 [665], ，在生成高分辨率和高质量输出方面通常优于生成对抗网络 [659]。

作为生成模型，扩散模型通常应用于材料科学中的场分布预测和微观结构重构任务。在一项针对场变量预测的独特应用中，为了根据结构信息预测二维应力分布，该研究 [666] 提出了一种条件扩散框架，旨在解决典型扩散模型在无界预测任务中的局限性。扩散模型通常针对有界数据进行设计，例如取值范围固定的图像；但在无界预测任务中，输出可以取任意值。该研究首先使用扩散模型生成归一化应力场，随后通过视觉Transformer预测真实应力范围，从而能够准确地将数值缩放回原始范围。这种方法提升了性能，并且在不同分辨率的数据集上都具有良好的泛化能力。

扩散模型在微观结构重构中的应用相对较新，大多数研究都是近期开展的。一项此类研究 [667], 使用真实显微图像数据，通过大型和小型数据集验证了扩散模型在微观结构重构中的应用。结果与真实数据相似，展现出高度多样性，且描述符误差较低，表明扩散模型具有更高的训练稳定性，模式崩溃现象也更少。不过，由于迭代采样过程，推断速度较慢。为了进一步提升性能，该研究 [668] 提出了一种双层概率生成框架：第一层使用由高斯随机场控制的潜变量，根据低阶统计量对整体结构进行条件约束；第二层则使用具有空间局部依赖的基于分数的扩散模型来细化局部细节。

扩散模型的性能也已在 [669], 中得到验证：研究将其应用于 AZ80镁合金在此前未见过的加工条件下的微观结构生成，涵盖广泛的制造参数。通过将某些条件留作测试，模型能够成功预测训练数据之外的真实微观结构，凸显了其捕捉加工参数与微观结构演化之间复杂的物理驱动关系的能力。作者随后将这一方法扩展到 [250]中的应力–应变曲线预测。关于扩散模型在随机材料 [670]和非晶材料 [671]中的类似应用也已有报道。

近期研究致力于增强这些微观结构重建方法。例如， [672]将扩散模型与针对双相钢微观结构的多保真度训练策略相结合。针对将基于低保真度数据训练的预训练模型应用于高保真度数据时准确度降低的问题，研究采用少量高保真度数据进行低秩适配（LoRA） [673] 微调，从而获得与目标属性相符的更准确预测。为应对数据稀缺， [674] 提出了一种概念导向合成数据生成方法，通过调整噪声水平实现可控训练，并突出有意义的模式。利用这些合成数据，该研究整合了先进的图像处理、扩散模型和编码器-解码器架构，以改进自动化微观结构提取，展现出高准确度的微观结构表征能力。

7.5. 大语言模型（*LLMs*）与智能体人工智能

作为近期科学人工智能进展的核心驱动力，大语言模型（LLMs）是大规模预训练自然语言模型，它们利用基于Transformer的架构，在多样化的文本语料库上训练，从而学习语言的统计结构 [675–677]。得益于其规模和训练方式，大语言模型能够生成高质量文本 [678], 实现跨语言泛化 [679], 进行多任务学习 [680], 并开展长上下文推理 [681, 682],, 从而支持传统对话系统之外的应用。在材料科学领域，大语言模型带来了材料设计、性能预测、过程–性质优化和自动化实验室等新兴范式 [30, 32, 683]。从根本上说，大语言模型是数据驱动的神经知识库，能够通过下一词元预测响应提示，检索并重组已学习的模式。然而，处于预训练形式的大语言模型存在局限性，因此人们持续研究微调、对齐和持续学习等后训练技术，包括基于人类反馈的强化学习和工具增强训练 [684]。

大语言模型通常采用两阶段范式进行训练：先在未标注数据上进行大规模自监督预训练，再针对特定任务或定义域的数据集进行监督微调。这种方法能够

学习可迁移的表征，并将其适配到下游任务中，BERT 等模型已证明了这一点 [677], GPT [685], 和 DALL·E [686],则将这一范式扩展到了文本和多模态场景。

大语言模型会根据先前的上下文，以概率方式预测下一个词元，从而按序生成文本；这种机制能够生成流畅、连贯且似然较高的输出。尽管这种方法有助于确保一致性和语言质量，但其灵活性和创造力可能有限，也无法充分捕捉人类偏好的多样性与不确定性。因此，通常需要采用后处理和增强技术，包括提示工程 [687]方法，例如少样本学习 [688], 思维链推理 [689], 和指令微调 [690]。另一种主要方法是检索增强生成（RAG）[691], ，它引入外部知识来源来支持生成、减少幻觉，并提高知识密集型定义域中的准确度。对齐技术作为另一种方法，有助于确保大语言模型的输出符合人类的值、目标和事实准确性，同时尽量减少有害或误导性内容 [692]。此外，大语言模型还可扩展为人工智能智能体，突破静态生成的局限；这些智能体能够自主规划、采取行动，并与外部工具、环境、数据来源乃至其他智能体进行迭代交互。通过整合大语言模型推理、记忆、决策、工具调用和反馈机制 [693–695]，此类智能体能够实现多步骤问题求解和目标导向行为。

在材料科学应用中，通过融入领域知识、物理约束和科学定律，可以进一步增强这些方法，从而提高由大语言模型驱动的系统的可靠性和有效性。基于大语言模型的人工智能智能体能够自主规划实验、分析数据并优化工艺—性能关系。通过结合领域知识、物理约束和迭代反馈，这些智能体有助于建立更高效、可扩展且可靠的工作流，用于材料发现和科学创新 [696]。

大语言模型的应用，尤其是在我们关注的领域，即材料塑性变形和微观结构表征方面，仍然有限，因为这仍是一个新兴领域。不过，据作者所知，大语言模型已应用于材料性能预测和信息提取等领域，也涉及其他材料科学研究主题。

一项早期研究 [697], 提出了 AlloyBERT，该模型采用基于预训练 RoBERTa [698]和 BERT [677] 构建的 Transformer编码器模型，根据文本输入预测弹性模量和屈服强度等性能。为预测完整的弹性常数张量，研究 [699] 提出了 BOTS。这些大语言模型通过提示工程和知识融合进行训练，用于预测完整的弹性常数张量及相关性能，其预测准确度优于以往模型。

不同于纯文本模型，该研究 [700] 提出了一种框架，将大语言模型的嵌入与图神经网络中具备结构感知能力的嵌入相结合，以提高预测能力和可解释性。图神经网络嵌入用于捕捉结构特征，而大语言模型嵌入则从文本表征中提供语义理解；随后将这两种嵌入拼接，用于下游性能预测。为评估大语言模型的能力，该研究 [701]使用三个领域特定数据集，在开源 DeepSeek-R1 [702]和商业版 OpenAI-o1 [703]上执行问答和性能预测任务。从真实到对抗性的文本扰动表明，当示例相似时，大语言模型能够利用少样本上下文学习来预测结构-性能关系；但当示例不同或超出分布时，则会出现模式崩溃和泛化能力有限的问题。

研究还 [704] 评估了经过微调的 LLM-Prop，结果显示，使用更短的提示时，其性能有所提升。据报道，LLM-Prop 能够胜过针对该任务进行微调的领域特定 BERT 和 MatBERT 模型 [705] [706]。近期，一项研究 [707] 推出了 LLM4Mat-Bench，这是一个用于评估大语言模型预测晶体材料属性能力的大规模基准数据集，包含来自公共材料数据库的近 200 万个样本。该基准涵盖多项任务，例如根据成分、晶体信息文件和文本描述预测弹性、热力学及电子性质。它可用于评估不同尺寸的大语言模型，例如 MatBERT[705], Gemma [708], LLaMA [709], Mistral [710], 和 LLM-Prop，并通过标准化的数据划分以及零样本和少样本提示，实现结果的可复现性。大语言模型还可用于从文献中自动提取数据；例如，一项研究 [711]使用 LLaMA 3.1 [712] 构建了一个综合数据集，其中包含成分、加工参数和力学性能。

近年来，智能体方法也引起了广泛关注，其应用涵盖由大语言模型驱动的材料科学研究。一项此类研究 [713] 介绍了 MatAgent，这是一种用于材料性能预测的智能体，它将大语言模型与第一性原理计算相结合。与仅依赖机器学习近似的典型智能体方法不同，MatAgent 利用第一性原理方法的准确度和适用性，同时使用大语言模型

进行自动化、推理和用户交互，从而获得更可靠且更高效的性质预测。智能体还可用于从文本、表格和题注中提取数据，正如 [714], 所展示的，该研究以极低成本将这种方法应用于约 10,000 篇全文文章。

在一种最新的方法中，研究 [715]提出了一种名为 GenCANNs 的大语言模型驱动框架。该框架基于先前的基于大语言模型的智能体系统和代码生成技术，可自动为材料建模设计、配置并校准特定任务的本构人工神经网络。它将大语言模型接口的易用性与本构人工神经网络针对特定任务的准确度相结合，从而能够生成高性能、针对特定材料的模型。该框架融合了智能体范式，通过大语言模型规划、编写和执行代码，并自动构建神经网络，为各种材料进行应力预测。

7.6. 总结

在材料与塑性变形分析领域，生成式人工智能模型已应用于基于图像的数据生成、场变量预测以及微观结构重构，展现出巨大潜力。生成对抗网络能够生成清晰的高分辨率输出，但可能出现模式崩溃和训练不稳定。归一化流可实现精确的似然估计和可逆映射；然而，对于高维数据（如具有非常细小晶粒的微观结构），其受到架构约束的限制。变分自编码器训练稳定，且能提供有意义的潜在表示，但生成的输出往往较为模糊。扩散模型擅长生成高保真度、多样化的样本，并能捕捉微观结构数据中复杂的物理驱动关系；但在推断过程中计算开销较大。扩散模型在文献中属于相对较新的研究主题，在准确度、多样性和训练稳定性之间实现了最佳平衡；而生成对抗网络、变分自编码器和归一化流则可根据应用和数据特征发挥互补优势。大语言模型在性能预测和数据提取等任务中的应用是一个迅速兴起的研究领域，并由此推动了用于自动化下游任务的智能体流水线。与本节讨论的其他生成式人工智能方法不同，大语言模型在塑性和微观结构领域的应用仍处于起步阶段，但预计这些先进应用未来将不断发展。不过，一些视觉-语言融合模型已用于本构建模，我们将在第4.7节中进行综述。

总体而言，这些方法为预测任务展现了广阔前景，例如对力学响应进行建模，以及为计算分析或监督学习任务进行数据增强。为了更好地展示这些生成式人工智能方法的多种应用，表10简要总结了本节讨论的应用。

8. 讨论与未来方向

上一节对应用于塑性和材料表征的人工智能方法进行了全面综述，展现了这一研究领域日益增长的关注度。然而，复杂算法以及大规模、高维数据的应用也带来了若干挑战和局限性 [493, 723–725]。应对这些挑战，首先需要确定适当的评估指标，其次需要确定模型开发与部署的最佳实践。本节总结了定性和定量评估的评估指标，概述了部署的最佳实践，并简要展望了该领域的未来方向和潜在研究途径。

8.1. 性能评估

要评估人工智能驱动的方法在塑性和材料表征中的性能，需要一套连贯且无偏的参数指标。近期研究已针对各种机器学习算法[726–728], 深度学习方法 [729], 以及新兴的智能体人工智能框架 [730]提出了此类指标。然而，在本文所关注的领域中，由于缺乏标准化测试和公认的评估标准，很难客观地比较不同方法或评估其可靠性。

为建立一套指导性能评估的结构化框架，所提出的指标应包括预测质量（例如准确度和精确度）、对基本物理和力学原理的符合程度、对建模人员和决策者的可解释性，以及超越训练数据进行泛化的能力。其他实际考量也可纳入评估，例如对数据噪声和数据稀缺的鲁棒性，

表10：生成式人工智能方法在塑性中的应用非详尽列表

模型	应用	参考文献
GANs	基于节点信息的应力场预测，以加速有限元计算	[599]
	融合物理信息生成对抗网络的场变量预测，其中生成器嵌入物理	[614]
	用于训练材料性能预测模型的数据增强	[616]
	基于微观结构图像并使用条件生成对抗网络的热应力预测	[716]
	使用SliceGAN从二维电子背散射衍射图像进行三维微观组织生成	[626]
	使用条件深度卷积生成对抗网络并结合带标签的变形历史数据（如动态再结晶）生成微观结构演化	[601]
	晶粒尺寸和动态再结晶体积分数	
	使用图生成对抗网络预测非均质材料的场变量	[717]
NFs	结合带标签数据对的微观结构逆向重构	[639]
VAEs	通过解耦潜在变形机	[653]
	机制	
	使用力学和热场变量作为输入进行力学性能与应力预测	[718]
	使用在合成数据上训练的变分自编码器提取晶粒结构特征	[648]
	通过并行变分自编码器和对比学习，将微观结构的衍射图样编码至潜在空间	[643]
扩散模型	先使用扩散模型，再使用视觉Transformer预测二维应力场	[666]
	将真实显微图像作为扩散模型的输入进行微观结构重构	[667]
	使用变分自编码器引导扩散模型进行微观结构重构	[719]
	使用低秩适配方法微调Stable Diffusion，以增强微观结构重构	[720]
LLMs	开发基准数据集，以评估现有大语言模型对材料属性的预测能力，例如	[707]
	如弹性、热力学和电子性质	
	引入 LLM-Mambaformer，这是一种结合 Mamba [721] 与 Transformer 架构的混合模型，用于	[722]
	预测晶体材料属性	
	用于设计、配置和校准材料建模本构模型的智能体框架	[715]

计算成本，以及对模型参数的稳定性 [41]。综合来看，这些指标不仅反映人工智能模型的表现优劣，也体现其效率、可靠性和物理意义。

所提出的通用评估框架还支持评估人工智能在本构建模与塑性领域的其他相关方面，包括对目标现象的保真度、预测的置信度与不确定性、数据需求、仿真框架中的数值行为、不同数据来源与实现之间的可复现性，以及总体可信度 [41]。对于特定应用，明确定义这些指标对于透明、客观且以应用为导向地评估人工智能模型及其在材料建模与分析工程实践中的适用性至关重要。

在工程应用中，评估的另一个重要方面是验证与确认，它们对模型性能提供更高层次的评估。验证确保模型被正确表述并按预期运行，而确认则评估其表征真实物理现象的准确程度 [731, 732]。在人工智能驱动的本构建模中，由于许多人工智能模型的黑箱特性和高度复杂性，验证与确认比传统方法更具挑战性 [733, 734]。尽管总体验证与确认工作流程与经典本构建模和仿真相似，即定义问题、收集数据、校准模型并测试预测，但人工智能模型还需要对物理一致性 [735], 鲁棒性 [736], 过拟合 [737, 738], 以及超出训练数据的泛化 [739]进行额外检查。对于确认，需要独立实验和数字孪生来评估预测能力和数值行为 [41]。

8.2. 塑性领域人工智能的最佳实践

8.2.1. 数据集适用性

由于人工智能模型在很大程度上依赖数据，可用数据集的质量和数量对模型性能至关重要，因此需要大量领域专业知识来选择合适的数据类型和表征。在第2节所讨论的各种来源中完成数据集的选择与生成之后，必须特别注意确保数据集准确、完整，并能在不同尺度上代表目标材料的塑性响应，在某些情况下还能代表材料的工艺–性能–响应关系 [740]。这通常涉及系统的数据预处理 [741], , 例如去除离群值，并在必要时进行数据增强或从文献中进行数据提取 [742]，以改善对代表性不足条件的覆盖。

对于机器学习和深度学习等纯数据驱动模型，尽管它们擅长捕捉相关性和趋势，却无法从根本上解释其背后的物理机制，因此需要专家监督提供审慎支持。为评估模型可靠性，可以采用多种实用策略，例如交叉验证 [743],，即将数据集划分为多个训练子集和测试子集。这有助于评估模型对数据选择的敏感性，并确保预测结果的一致性。还可以通过向输入数据引入扰动并监测由此产生的输出变化 [744]来分析模型稳健性。此外，也是最重要的一点是，需要运用专家知识来验证预测的材料响应是否符合已知的物理行为以及文献中先前报道的发现。

8.2.2. 人工智能模型选择

为塑性问题选择合适的人工智能模型，取决于任务、数据集和期望的输出 [745]。当有充足数据时，可根据数据类型采用不同模型。对于规模较小、维度较低且多模态性有限的数据集，适合采用支持向量机和决策树等经典机器学习方法。如果方程发现至关重要，则建议使用符号回归。

对于大规模高维数据，例如具有多个影响变量和带标签应力-应变数据的黏塑性或热黏塑性材料，可采用深度学习方法。人工神经网络适用于简单的输入/输出向量。短序列数据，例如历史依赖塑性中产生的数据，可用循环神经网络或一维卷积神经网络处理，而长序列则最适合用Transformer建模。基于图像的数据，例如来自微观结构表征的数据，可用卷积神经网络处理。当数据包含相连实体或图状关系时，例如材料微观结构中的晶粒，图神经网络较为适用。

对于多模态数据集，优先采用多模态融合方法。若需要纳入物理定律以约束模型，建议使用物理增强神经网络。可采用概率方法（如高斯过程和贝叶斯神经网络）来量化模型不确定性。对于数据增强，生成式人工智能方法（包括用于表征学习的变分自编码器）可有效扩充微观结构数据集。大语言模型还可支持智能体方法，以自动化工作流并从科学文献中提取数据。

这种系统化方法通过将算法选择与数据类型及任务相匹配，帮助人们应对人工智能领域的挑战，因此尤其适用于材料的本构建模和表征。

8.2.3. 局限性

根据模型的选择，总会存在需要权衡的局限性。经典机器学习模型往往受限于对精心设计特征的依赖，难以捕捉材料行为中固有的高度非线性交互，因此不适用于多尺度分析。深度学习模型能够以高维表示复杂的材料行为；然而，它们往往如同不透明的系统，难以验证其预测是否遵循基本物理定律。物理定律可以通过物理增强神经网络加以融入；然而，这类模型仍然需要大量计算，且如果嵌入的物理假设不完整或不准确，误差可能会不断传播。生成式人工智能方法可用于合成合理的微观结构演化过程，或扩充稀缺的数据集，但可能会复现训练数据中细微的偏置、生成不符合物理规律的微观结构，或忽略关键的缺陷模式。在人工智能智能体应用于材料建模与表征的新兴时代，不同方法的这些局限性凸显了专家判断仍不可或缺，以确保预测的可靠性和可解释性。

8.3. 未来方向

这些研究标志着人工智能推动材料建模与表征研究开辟了一个新方向。我们认为，材料塑性与微观结构表征领域中人工智能应用的未来，可以沿着三条主要路径显著发展。

首先，拓展和开发先进的深度学习方法，以捕捉塑性与材料表征中影响参数之间复杂的高维关系，将是一个重要方向。在宏观尺度上，应变、应变率、应力和温度等各类状态变量会显著影响材料响应。在此背景下，基于特定加工条件下产生的这些状态变量来预测材料行为的映射模型至关重要。能够捕捉长程依赖关系的先进架构（例如基于变换器的模型）尤其适用于循环塑性和疲劳分析。此外，KAN 等相对较少受到探索的新型模型预计也将在这一研究领域受到关注。在纳入代表性体积单元的多尺度分析中，图像和表格/序列数据兼备；图神经网络展现出巨大潜力，能够同时捕捉相邻晶粒之间的相关性以及代表性体积单元响应，从而提供更全面的表征。对于由序列式应力-应变数据与二维或三维微观结构演化图像组成的数据集，还可以利用多模态融合技术进一步增强这些方法。

其次，人们对物理感知模型的兴趣日益浓厚，例如 PINN、PENN 和神经算子。迄今为止，文献中主要应用了人工神经网络和部分循环神经网络，通常处理由相应曲线导出的表格型或序列式应力-应变数据。将基于偏微分方程的定律纳入损失函数，或将其编码为函数算子，这类做法大多仅限于多层感知机，因而限制了物理感知方法在基于晶粒的数据和微观结构效应方面的全面性。未来方向包括嵌入基于晶粒建立的微观尺度定律，例如霍尔-佩奇关系 [746], 取向差能、泰勒硬化定律 [747], 以及 Kocks–Mecking 位错演化定律 [748], 等。将物理知识融入微观结构表征有助于构建更稳健的模型。通过按照微观尺度的基础物理定律对晶粒演化进行建模，模型便能具备微观尺度的物理感知能力，进而与受偏微分方程约束的物理感知宏观尺度响应预测相结合。

第三，生成式人工智能，尤其是以智能体形式运用大语言模型，预计将发挥变革性作用。大语言模型的能力不断增强，使其越来越适合用于自动化材料研究的各个环节，尤其是从迅速增长的科学文献中提取和综合知识 [34, 749]。大语言模型擅长从海量出版物和专利中提取科学数据与知识，其处理能力远超人类。此外，大语言模型还能在统一的计算环境中运行，通过生成输入、管理仿真以及对结果进行后处理，并借助智能体编排来增强建模与仿真工作流。它们可以充当集中式智能体，协调从文献中进行全面的知识提取、数据收集、模型开发和部署流程，并根据用户定义的目标（如性能或计算效率）开展工作。智能体人工智能是跨学科领域中最受瞩目的研究方向之一，旨在提升自主性，涵盖从知识检索和特征生成到假设构建，最终实现材料表征与分析的完全自主执行 [34]。

9. 结论

总之，本综述全面概述了人工智能应用于材料塑性与表征领域的最新进展。文章重点从模型架构及其在材料塑性中的应用角度，构建清晰且系统的人工智能方法分类体系，同时阐明这些方法在深化我们对人工智能与塑性之间相互作用的理解方面所发挥的作用。我们系统综述了从经典方法到新兴方法的广泛人工智能技术，并讨论了它们在塑性研究范围内的应用。然而，所获得的见解同样广泛适用于材料科学中人工智能的其他领域，例如材料设计、发现和表征。基于对相关文献全面且批判性的综述，结合对材料塑性中人工智能驱动方法的系统分类，并明确考虑塑性变形背后的微观组织机制及其在宏观材料响应中的表现，我们得出以下一般性结论：

1. 本构建模和材料塑性所需的数据集通常采用状态变量的数值表格格式，例如应力–应变数据，或采用基于像素的格式，包括状态变量的空间分布和微观结构图像。此外，还可以提供序列时变数据，这对于材料响应取决于增量加载的材料尤为有用。这些数据类型可以在特定人工智能框架中进行融合和利用。数据来源多种多样，其中数值与计算模拟是生成用于训练人工智能模型的训练数据最广泛使用的手段。

2. 人工智能方法在本构建模和材料表征中的应用包括材料响应预测，即获得应力等状态变量；以及材料性能预测，即估算屈服强度或弹性刚度等性能。此外，在多尺度材料分析中，利用基于像素或图的人工智能方法，开展基于晶粒演化的微观结构表征。这些应用可作为代理模型，纳入数值模拟或实验研究中。多模态方法在统一框架下连接微观结构贡献与宏观材料响应。

3. 从频率学派方法到概率方法的人工智能方法均可用于塑性本构建模和材料表征。所采用的人工智能技术范围广泛，包括机器学习和深度学习等监督学习方法，以及用于不同材料尺度上的预测、微观结构重构和潜在特征表示的无监督学习与生成式人工智能方法。将物理原理融入纯数据驱动模型，可提高预测能力以及与材料行为内在物理规律的一致性。此外，在预测任务中融入概率方法和贝叶斯方法，可以实现不确定性量化。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在任何已知的经济利益冲突或个人关系，这些因素可能会影响本文所报告的研究工作。

参考文献

[1] J.-C. Tolédano，《固体塑性的物理基础》，世界科学出版社，2011年。[2] E. A. de Souza Neto、D. Peric、D. R. Owen，《塑性计算方法：理论与应用》，约翰·威立父子公司，2011年。[3] J. C. Simo、T. J. Hughes，《计算非弹性》，施普林格，1998年。[4] T. Belytschko、W. K. Liu、B. Moran、K. Elkhodary，《连续体与结构的非线性有限元》，John wiley & sons，2014年。[5] G. A. Holzapfel，《非线性固体力学：工程科学的连续体方法》（2002年）。[6] D. Hull、D. J. Bacon，《位错导论》，第37卷，爱思唯尔，2011年。[7] W. D. Callister Jr、D. G. Rethwisch，《材料科学与工程：导论》，John wiley & sons，2020年。[8] S. L. Wong、M. Madivala、U. Prahl、F. Roters、D. Raabe，《一种用于孪生与相变诱发塑性的晶体塑性模型》，《材料学报》118（2016年）140–151。[9] P. Radanliev，《人工智能：回顾过去，展望下一次范式转变》，Journal of Experimental & Theoretical Artificial Intelligence 37（7）（2025年）1045–1062。[10] M. I. Jordan、T. M. Mitchell，《机器学习：趋势、观点与前景》，《科学》349（6245）（2015年）255–260。[11] D. Pandey、K. Niwaria、B. Chourasia，《机器学习算法：综述》，Mach. Learn 6（2）（2019年）。

[12] I. H. Sarker, 《机器学习：算法、现实世界应用与研究方向》, SN Computer Science 2（3）（2021年）160。[13] G. Sastry、L. Heim、H. Belfield、M. Anderljung、M. Brundage、J. Hazell、C. O'keefe、G. K. Hadfield、R. Ngo、K. Pilz等, 《计算能力与人工智能治理》, arXiv预印本 arXiv:2402.08797（2024年）。[14] H. Peng、C. Ding、T. Geng、S. Choudhury、K. Barker、A. Li, 《新兴人工智能/机器学习加速器评估：IPU、RDU以及英伟达/AMD图形处理器》, 载于：第15届ACM/SPEC国际性能工程会议论文集，2024年，第14–20页。[15] F. Pierron、M. Grédiac, 《迈向材料测试2.0：基于全场测量识别本构参数的测试设计综述》, 《应变》57（1）（2021年）e12370。[16] M. A. Sutton、F. Hild, 《数字图像相关的最新进展与展望》, Experimental Mechanics 55（1）（2015年）1–8。[17] J. Fish、G. J. Wagner、S. Keten, 《材料的介观与多尺度建模》, Nature Materials 20（6）（2021年）774–786。[18] S. J. Prince, 《理解深度学习》, 麻省理工学院出版社, 2023年。[19] E. Alpaydin, 《机器学习导论》, 麻省理工学院出版社，2020年。[20] K. Guo、Z. Yang、C.-H. Yu、M. J. Buehler, 《人工智能与机器学习在机械材料设计中的应用》, Materials Horizons 8（4）（2021年）1153–1172。[21] S. Badini、S. Regondi、R. Pugliese, 《释放人工智能在材料设计中的力量》, 《材料》16（17）（2023年）5927。[22] M. Cheng、C.-L. Fu、R. Okabe、A. Chotrattanapituk、A. Boonkird、N. T. Hung、M. Li, 《人工智能驱动的材料设计：简评》, arXiv预印本 arXiv:2502.02905（2025年）。[23] J. Huang、K. Liew、A. Ademiloye, 《人工智能在材料建模与设计中的应用》, Archives of Computational Methods in Engineering 28（5）（2021年）3399。[24] X. Bai、X. Zhang, 《人工智能赋能的材料科学》, Nano-Micro Letters 17（1）（2025年）1–30。[25] E. Chávez-Angel、M. B. Eriksen、A. Castro-Alvarez、J. H. Garcia、M. Botifoll、O. Avalos-Ovando、J. Arbiol、A. Mugarza, 《人工智能在材料科学与材料设计中的应用》, Advanced Intelligent Systems（2025年）2400986。[26] X.-Q. Han、X.-D. Wang、M.-Y. Xu、Z. Feng、B.-W. Yao、P.-J. Guo、Z.-F. Gao、Z.-Y. Lu, 《人工智能驱动的材料逆向设计：过去、现在与未来》, Chinese Physics Letters 42（2）（2025年）027403。[27] H. Park、Z. Li、A. Walsh, 《生成式人工智能是否已解决材料逆向设计问题？》, Matter 7（7）（2024年）2355–2367。[28] J. Song、J. Lee、N. Kim、K. Min, 《人工智能在创新超材料设计中的应用：全面综述》, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing 25（1）（2024年）225–244。[29] C. Suh、C. Fare、J. A. Warren、E. O. Pyzer-Knapp, 《材料基因组的演进：机器学习如何推动新一代材料发现》, Annual Review of Materials Research 50（1）（2020年）1–25。[30] G. Lei、R. Docherty、S. J. Cooper, 《大语言模型时代的材料科学：观点》, Digital Discovery 3（7）（2024年）1257–1272。[31] G. Wang、J. Hu、J. Zhou、S. Liu、Q. Li、Z. Sun, 《用于材料科学的知识引导的大语言模型》, Review of Materials Research（2025年）100007。

[32] S. Yu, N. Ran, J. Liu, 《大语言模型：材料科学研究的变革者》, Artificial Intelligence Chemistry 2 (2) (2024) 100076。[33] Q. Liu, M. P. Polak, S. Y. Kim, M. A. A. Shuvo, H. S. Deodhar, J. Han, D. Morgan, H. Oh, 《超越设计师的知识：通过大语言模型生成材料设计假设》, 《材料学报》 (2025) 121307。[34] Z. Pei, J. Yin, J. Zhang, 《用于材料发现与可持续性的大语言模型：进展、挑战与机遇》, Progress in Materials Science (2025) 101495。[35] P. Zhang, Z.-Y. Yin, Y.-F. Jin 等, 《土壤本构建模中机器学习应用的最新综述》, Archives of Computational Methods in Engineering 28 (5) (2021) 3661–3686。[36] R. Lourenço, A. Andrade-Campos, P. Georgieva, 《机器学习技术在金属成形工艺材料本构建模中的应用》, Metals 12 (3) (2022) 427。[37] A. E. Marques, T. G. Parreira, A. F. Pereira, B. M. Ribeiro, P. A. Prates, 《机器学习在板材本构建模中的应用：综述》, International Journal of Solids and Structures 303 (2024) 113024。[38] A. Hussain, A. H. Sakhaei, M. Shafiee, 《基于机器学习的材料非线性本构建模：综述》, Mechanics of Advanced Materials and Structures (2024) 1–19。[39] D. Nath, D. R. Neog, S. S. Gautam 等, 《机器学习和深度学习在有限元分析中的应用：全面综述》, Archives of computational methods in engineering 31 (5) (2024)。[40] H. Hu, L. Qi, X. Chao, 《用于计算固体力学的物理信息神经网络（PINN）：数值框架与应用》, Thin-Walled Structures 205 (2024) 112495。[41] J. N. Fuhg, G. A. Padmanabha, N. Bouklas, B. Bahmani, W. Sun, N. N. Vlassis, M. Flaschel, P. Carrara, L. De Lorenzis, 《固体数据驱动本构定律综述》, arXiv预印本 arXiv:2405.03658 (2024)。[42] P. Xu, X. Ji, M. Li, W. Lu, 《材料科学中的小数据机器学习》, npj Computational Materials 9 (1) (2023) 42。[43] A. Bandi, P. V. S. R. Adapa, Y. E. V. P. K. Kuchi, 《生成式人工智能的力量：需求、模型、输入输出格式、评估指标与挑战综述》, Future Internet 15 (8) (2023) 260。[44] M. Goyal, Q. H. Mahmoud, 《使用生成式人工智能生成合成数据的技术：系统综述》, Electronics 13 (17) (2024) 3509。[45] S. L. Lohr, 《抽样：设计与分析》, Chapman and Hall/CRC, 2021。[46] B. Durakovic, 《实验设计的应用、概念与实例：最新进展》, Periodicals of Engineering and Natural Sciences 5 (3) (2017) 421–439。[47] J. N. Fuhg, C. Böhm, N. Bouklas, A. Fau, P. Wriggers, M. Marino, 《模型与数据驱动的本构响应：在多尺度计算框架中的应用》, International Journal of Engineering Science 167 (2021) 103522。[48] N. N. Vlassis, W. Sun, 《用于可解释弹塑性模型及水平集硬化的热力学信息神经网络 Sobolev训练》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 377 (2021) 113695。[49] K. Crombecq, E. Laermans, T. Dhaene, 《用于基于仿真的建模的高效空间填充与非坍缩序贯设计策略》, European Journal of Operational Research 214 (3) (2011) 683–696。[50] B. Battalgazy, D. Khatamsaz, Z. Ghasemi, D. D. Mallick, R. Arroyave, A. Srivastava, 《基于贝叶斯的方法：利用多样化材料响应进行本构模型选择与校准》, 《材料学报》287 (2025) 120796。

[51] X. Zhu, C. Xing, H. Wang, J. Zhong, Y. Zhang, 《基于分位数回归机器学习技术的整体式外部剪切键概率延性变形极限状态预测》, 《工程结构》317 (2024) 118610。[52] J. N. Fuhg, N. Bouklas, R. E. Jones, 《通过张量基神经网络从数据中学习超弹性各向异性》, 《固体力学与物理学杂志》168 (2022) 105022。[53] X. Lu, D. G. Giovanis, J. Yvonnet, V. Papadopoulos, F. Detrez, J. Bai, 《一种基于神经网络的数据驱动计算均匀化方法：用于石墨烯/聚合物纳米复合材料的非线性各向异性电响应》, Computational Mechanics 64 (2) (2019) 307–321。[54] M. Stein, 《使用拉丁超立方抽样的仿真的大样本性质》, Technometrics 29 (2) (1987) 143–151。[55] D. W. Abueidda, S. Koric, N. A. Sobh, H. Sehitoglu, 《用于塑性与热黏塑性的深度学习》, 《国际塑性学杂志》136 (2021) 102852。[56] M. B. Gorji, M. Mozaffar, J. N. Heidenreich, J. Cao, D. Mohr, 《循环神经网络在路径相关塑性建模中的潜力》, 《固体力学与物理学杂志》143 (2020) 103972。[57] M. Mozaffar, R. Bostanabad, W. Chen, K. Ehmann, J. Cao, M. Bessa, 《深度学习预测路径相关塑性》, 《美国国家科学院院刊》116 (52) (2019) 26414–26420。[58] H. J. Logarzo, G. Capuano, J. J. Rimoli, 《智能本构定律：通过机器学习进行非弹性均匀化》, Computer methods in applied mechanics and engineering 373 (2021) 113482。[59] H. Liu, Y.-S. Ong, J. Cai, 《支持复杂工程设计仿真的全局元建模自适应采样综述》, 《结构与多学科优化》57 (1) (2018) 393–416。[60] J. N. Fuhg, A. Fau, U. Nackenhorst, 《克里金法自适应采样方法的最新进展与比较综述》(2021)。[61] K. Arulkumaran, M. P. Deisenroth, M. Brundage, A. A. Bharath, 《深度强化学习：简要综述》, 《IEEE信号处理杂志》34 (6) (2017) 26–38。[62] Y. Li, 《深度强化学习：概述》, arXiv预印本 arXiv:1701.07274 (2017)。[63] T. Tiong, I. Saad, K. T. K. Teo, H. bin Lago, 《采用鲁棒深度确定性策略梯度的深度强化学习》, 载于：2020年第2届国际电气、控制与仪器工程会议（ICECIE），IEEE，2020年，第1–5页。[64] D. Mašín, 《亚塑性土体行为建模》, 岩土力学与岩土工程系列丛书, © 施普林格自然瑞士股份公司，https://doi. org/10 1007 (2019) 978–973。[65] A. Niemunis, 《土体扩展亚塑性模型》, 第34卷，维也纳基础工程与土力学研究所，2003。[66] I. F. Collins, 《土壤和砂土的弹塑性模型》, 《国际机械科学杂志》47 (4-5) (2005) 493–508。[67] S. Reese, P. Wriggers, 《一种表现出塑性变形的类橡胶聚合物材料模型：计算方面及与实验结果的比较》, Computer methods in applied mechanics and engineering 148 (3-4) (1997) 279–298。[68] S. Farshbaf, N. Dialami, M. Cervera, H. Bakhshan, T. Navid Chakherlou, 《通过设计改进提升增材制造负泊松比结构的力学性能：实验与数值分析》, 《增材制造进展》(2025) 1–22。

[69] H. Bakhshan, E. Oñate, J. M. Carbonell i Puigbó, 《切削加工过程中金属和合金本构建模综述》, Archives of Computational Methods in Engineering 31 (3) (2024) 1611–1658。[70] Y. Lin, X.-M. Chen, 《金属和合金热加工实验结果及本构描述的批判性综述》, 《材料与设计》32 (4) (2011) 1733–1759。[71] J. C. Simo, C. Miehe, 《有限应变下的关联耦合热塑性：公式推导、数值分析与实现》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 98 (1) (1992) 41–104。[72] S. Farshbaf, N. Dialami, M. Cervera, 《受拉伸和压缩作用的内凹超材料及六边形蜂窝晶格结构的大变形与屈曲分析》, 《材料力学》210 (2025) 105457。[73] D. J. Steinberg, S. Cochran, M. W. Guinan, 等, 《适用于高应变率的金属本构模型》, Journal of applied physics 51 (3) (1980) 1498。[74] M. Calamaz, D. Coupard, F. Girot, 《用于钛合金 ti–6al–4v 切削锯齿形切屑形成二维数值模拟的新材料模型》, International Journal of Machine Tools and Manufacture 48 (3-4) (2008) 275–288。[75] T. Shirakashi, K. Maekawa, E. Usui, 《低碳钢在高温和高应变率下的流动应力。I：快速加热和冷却系统冲击压缩试验中增量应变法的适用性》, Bulletin of the Japan Society of Precision Engineering 17 (3) (1983) 161–166。[76] W. Wu, D. Kolymbas, 《亚塑性：过去与现在》, 《颗粒材料本构建模》（2000）。[77] W. Wu, E. Bauer, 《一种简单的砂土亚塑性本构模型》, International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 18 (12) (1994) 833–862。[78] L.-E. Lindgren, K. Domkin, S. Hansson, 《基于物理的 AISI 316L 塑性模型中的位错、空位和溶质扩散》, 《材料力学》40 (11) (2008) 907–919。[79] D. Wedberg, A. Svoboda, L.-E. Lindgren, 《金属切削模拟中高应变率现象的建模》, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 20 (8) (2012) 085006。[80] H. Bakhshan, E. Oñate, J. Carbonell, 《采用粒子有限元法和均匀场分布对切削过程中 Ti6Al4V 合金微观组织演化进行建模》, Journal of Manufacturing Processes 131 (2024) 73–92。[81] Y. Estrin, L. Tóth, A. Molinari, Y. Bréchet, 《适用于大应变变形所有硬化阶段的基于位错的模型》, 《材料学报》46 (15) (1998) 5509–5522。[82] P. Follansbee, U. Kocks, 《基于将机械阈值应力用作内状态变量的铜变形本构描述》, Acta Metallurgica 36 (1) (1988) 81–93。[83] M. Fanfoni, M. Tomellini, 《Johnson-Mehl-Avrami-Kohnogorov 模型：简要综述》, Il Nuovo Cimento D 20 (7) (1998) 1171–1182。[84] Z. Pan, D. S. Shih, A. Tabei, H. Garmestani, S. Y. Liang, 《考虑材料微观组织演化的 Ti-6Al-4V 切削力建模》, The International Journal of Advanced Manufacturing Technology 91 (5) (2017) 2673–2680。[85] G. Liu, D. Zhang, C. Yao, 《耦合微观组织演化增量模型的修正本构模型及其在钛合金 Ti–6Al–4V 切削中的应用》, Journal of Materials Processing Technology 297 (2021) 117262。[86] R. Yadav, N. Chakladar, S. Paul, 《基于动态再结晶的 Ti-6Al-4V 微切削本构流动模型》, Journal of Manufacturing Processes 77 (2022) 463–484。

[87] R. Liu, M. Salahshoor, S. Melkote, T. Marusich, 《用于 SS304 非弹性变形和微观组织演化的统一内变量材料模型》, Materials Science and Engineering: A 594 (2014) 352–363。[88] M. Saez-de Buruaga, P. Aristimuño, D. Soler, E. D'Eramo, A. Roth, P. Arrazola, 《基于微观组织的流动应力模型：预测铁素体–珠光体钢的可加工性》, CIRP年鉴 68 (1) (2019) 49–52。[89] Z. Yao, G.-Y. Kim, Z. Wang, L. Faidley, Q. Zou, D. Mei, Z. Chen, 《铝的声软化与残余硬化：建模与实验》, 《国际塑性学杂志》39 (2012) 75–87。[90] H. Bakhshan, J. Carbonell, E. Oñate, 《用于超声振动辅助镦粗过程中金属塑性行为的改进 Johnson–Cook 模型》, Journal of Manufacturing Processes 121 (2024) 361–373。[91] A. Siddiq, T. El Sayed, 《通过晶体塑性有限元法研究超声辅助变形过程中金属的声软化》, Mate- rials Letters 65 (2) (2011) 356–359。[92]H. Bakhshan, E. Oñate, J. Carbonell, 《用于 Ti6Al4V 合金超声辅助加工的微观组织集成声塑性本构模型》, CIRP制造科学与技术杂志 57 (2025) 14–31。[93] X. Jia, K. Hao, Z. Luo, Z. Fan, 《金属材料塑性变形行为：本构模型综述》, Metals 12 (12) (2022) 2077。[94] S. N. Melkote, W. Grzesik, J. Outeiro, J. Rech, V. Schulze, H. Attia, P.-J. Arrazola, R. M'Saoubi, C. Saldana, 《金属切削建模所用材料和摩擦数据的进展》, CIRP年鉴 66 (2) (2017) 731–754。[95] I. Steinwart, A. Christmann, 《支持向量机》, 施普林格科学与商业媒体, 2008。[96] A. J. Smola, B. Schölkopf, 《支持向量回归教程》, 《统计与计算》14 (3) (2004) 199–222。[97] B. Schölkopf, 《距离的核技巧》, 《神经信息处理系统进展》13 (2000)。[98] R. Sangeetha, B. Kalpana, 《支持向量机适用核函数的比较研究与选择》, 载于：信息与通信技术进展国际会议, 施普林格, 2010, 第549–553页。[99] L. Dyckhoff, N. Huber, 《纳米多孔金属多轴屈服行为的数据驱动建模》, International journal of mechanical sciences 259 (2023) 108601。[100] J. N. Fuhg, A. Fau, N. Bouklas, M. Marino, 《利用数据增强唯象屈服函数：挑战与机遇》, 《欧洲力学杂志A辑：固体》99 (2023) 104925。[101] W. Zhao, J. Liu, Y. Chen, 《采用多输出支持向量回归进行材料行为建模》, 《应用数学建模》39 (17) (2015) 5216–5229。[102] A. Hartmaier, 《金属塑性的面向数据本构建模》, 《材料》13 (7) (2020) 1600。[103] R. Shoghi, A. Hartmaier, 《基于微观力学模拟数据的多晶金属塑性与应变硬化机器学习本构模型》, 《机器学习：科学与技术》5 (2) (2024) 025008。[104] R. Shoghi, A. Hartmaier, 《各向异性塑性机器学习屈服函数的最优数据生成策略》, 《材料前沿》9 (2022) 868248。[105] J. Schmidt, S. R. Kalidindi, A. Hartmaier, 《基于支持向量分类的织构相关屈服准则》, 《国际塑性学杂志》188 (2025) 104311。

[106] R. Shoghi、L. Morand、D. Helm、A. Hartmaier，利用动态停止准则，通过查询委员会优化支持向量分类的机器学习屈服函数，《计算力学》74 (2) (2024) 447–466。[107] S.-H. Song，316L不锈钢热变形建模中本构方程、神经网络与支持向量回归的比较研究，《材料》13 (17) (2020) 3766。[108] Y. Cao、J. Cao、L. Wang、C. Song、F. Li、P. Zhang，基于支持向量回归算法的热轧过程中Zircaloy-4高温变形本构模型，Journal of Materials Engineering and Performance 31 (12) (2022) 10237–10247。[109] M. Murugesan、J.-H. Yu、K.-S. Jung、S.-M. Cho、K. S. Bhandari、W. Chung、C.-W. Lee，采用监督式机器学习方法对中碳钢热变形行为进行建模，steel research international 94 (2) (2023) 2200188。[110] H. Zhao、Z. Huang、Z. Zou，利用支持向量机模拟地质材料的应力—应变关系，Mathematical Problems in Engineering 2014 (1) (2014) 482672。[111] Y. Zhang、J. Qiu、Y.-g. Zhang、R. Liao，采用支持向量机（SVM）建立单调加载条件下的砂土本构模型，Arabian Journal for Science and Engineering 47 (4) (2022) 4421–4435。[112] D.-G. He、Y. Lin、J. Chen、D.-D. Chen、J. Huang、Y. Tang、M.-S. Chen，阶梯式应变速率下时效态镍基高温合金两阶段热成形过程中的微观结构演化与支持向量回归模型，《材料与设计》154 (2018) 51–62。[113] F. Liu、C. Yang、Z. Liao、H. Wu，ZK60合金热拉伸过程中的流动应力预测与微观结构演变机制，《材料前沿》10 (2024) 1334815。[114] H. Borchani、G. Varando、C. Bielza、P. Larranaga，多输出回归综述，Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery 5 (5) (2015) 216–233。[115] I. Syarif、A. Prugel-Bennett、G. Wills，采用网格搜索和遗传算法优化SVM参数以提升分类性能，TELKOMNIKA (Telecommunication Computing Electronics and Control) 14 (4) (2016) 1502–1509。[116] Z. Che、C. Peng，改进支持向量回归以预测低合金钢的力学性能并进行比较分析，Mathematics 12 (8) (2024) 1153。[117] G. F. Li、Y. Jiang、L. F. Fan、X. Xiao、X. K. Zhang、D. Wang，采用基于优化的支持向量回归参数搜索对25CrMo4钢进行高温压缩本构建模，AIP Advances 13 (10) (2023)。[118] S. Marsland，《机器学习：算法视角》，Chapman and Hall/CRC，2011。[119] L. Rokach、O. Maimon，决策树，载于：《数据挖掘与知识发现手册》，施普林格，2005，第165–192页。[120] L. Breiman，随机森林，Machine Learning 45 (1) (2001) 5–32。[121] J. H. Friedman，贪心函数逼近：梯度提升机，Annals of Statistics (2001) 1189–1232。[122] T. Chen、T. He、M. Benesty、V. Khotilovich、Y. Tang、H. Cho、K. Chen、R. Mitchell、I. Cano、T. Zhou 等，XGBoost：极端梯度提升，R软件包版本0.4-2 1 (4) (2015) 1–4。[123] S.-S. Lim、H.-J. Lee、S.-H. Song，热变形过程中Ti-6Al-4V的流动应力：决策树建模，Metals 10 (6) (2020) 739。

[124] S. Poluru、A. Jaimin、N. R. Kotkunde、S. K. Singh、A. Kumar、A. Panchal、P. Gnanasambandam，经高温高应变速率试验的92W-5Co-3Ni合金的本构建模与显微组织分析，《材料与设计》(2025) 114035。[125] S.-H. Song，随机森林在建模304不锈钢于700 °C–900 °C变形过程中的流动应力方面的应用，《材料》14 (7) (2021) 1812。[126] C. Tan、C. Li、Z. Liu，机器学习在人工骨用多孔钛材料本构关系预测中的应用，Metals 14 (6) (2024) 634。[127] M. G. Farid、H. Abedi、R. Ghasempour、A. Taylor、S. Khoddam、P. Hodgson，通过机器学习和深度学习预测304L不锈钢的高应变速率变形行为并构建加工图，Journal of Materials Research and Technology 36 (2025) 7507–7518。[128] T. Pan、C. Song、Z. Gao、T. Xia、T. Wang，利用机器学习算法预测Ni-Cr-Mo钢热压缩过程中的流动应力，Processes 12 (3) (2024) 441。[129] K. Harikrishna、A. Nithin、M. Davidson，评估用于预测烧结Al–Zn–Mg合金热变形流动应力的机器学习模型，Journal of Engineering Materials and Technology 147 (2) (2025) 021006。[130] M. Bai、X. Wu、L. Cao、S. Tang、Y. Qiu、Y. Zhou、X. Lin、Z. Zhang，Al–Zn–Mg–Cu合金热变形过程中的数据驱动应力预测与微观结构表征，Metals and Materials International (2025) 1–21。[131] D. Reimann、K. Nidadavolu、H. ul Hassan、N. Vajragupta、T. Glasmachers、P. Junker、A. Hartmaier，利用微观力学模拟训练的机器学习算法对宏观材料行为进行建模，《材料前沿》6 (2019) 181。[132] A. Eghtesad、Q. Luo、S.-L. Shang、R. A. Lebensohn、M. Knezevic、Z.-K. Liu、A. M. Beese，利用机器学习识别通过基于位错密度的晶体塑性仿真预测的细观应力和应变热点，《国际塑性学杂志》166 (2023) 103646。[133] S. Lu、X. Zhang、Y. Hu、J. Chu、Q. Kan、G. Kang，基于机器学习的晶体塑性模型本构参数识别，《材料力学》203 (2025) 105263。[134] M.-r. Fan、Z.-a. Luo、Y.-h. Liu、Y.-y. Feng，30MnB5V钢的热变形行为：唯象本构模型、集成学习算法、热加工图与微观结构演化，Journal o

f

材料研究与技术 32 (2024) 2675–2690。[135] A. Kedharnath、R. Kapoor、A. Sarkar，使用机器学习预测钽钨合金的流动应力，《机器学习：科学与技术》5 (4) (2024) 045007。[136] D. P. Solomatine、D. L. Shrestha，Adaboost. rt：一种用于回归问题的提升算法，载于：2004年IEEE神经网络国际联合会议（IEEE Cat. No. 04CH37541），第2卷，IEEE，2004年，第1163–1168页。[137] J. Lizarazu、E. Harirchian、U. A. Shaik、M. Shareef、A. Antoni-Zdziobek、T. Lahmer，利用机器学习算法根据微观组织特征预测增材制造低碳钢的应力-应变曲线，《工程学成果》20 (2023) 101587。[138] J. Decke、A. Engelhardt、L. Rauch、S. Degener、S. V. Sajadifar、E. Scharifi、K. Steinhoff、T. Niendorf、B. Sick，使用机器学习方法预测AA7075合金的流动应力行为，《晶体》12 (9) (2022) 1281。[139] N. Makke、S. Chawla，利用符号回归进行可解释的科学发现：综述，《人工智能评论》57 (1) (2024) 2。

[140] G. Kronberger、B. Burlacu、M. Kommenda、S. M. Winkler、M. Affenzeller，《符号回归》，Chapman and Hall/CRC，2024。[141] D. Versino、A. Tonda、C. A. Bronkhorst，塑性变形的数据驱动建模，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 318 (2017) 981–1004。[142] E. Kabliman、A. H. Kolody、J. Kronsteiner、M. Kommenda、G. Kronberger，符号回归在塑性变形本构建模中的应用，《工程科学应用》6 (2021) 100052。[143] G. Bomarito、T. Townsend、K. Stewart、K. Esham、J. Emery、J. Hochhalter，利用符号回归开发可解释的数据驱动塑性模型，《计算机与结构》252 (2021) 106557。[144] H. Park、M. Cho，基于数据驱动屈服函数的多尺度本构模型，《复合材料B辑：工程》216 (2021) 108831。[145] N. Talebi、K. A. Meyer、M. Ekh，利用神经网络和符号回归进行循环域塑性建模，《计算机与结构》321 (2026) 108086。[146] J. R. Koza，遗传编程作为通过自然选择对计算机编程的方法，《统计与计算》4 (2) (1994) 87–112。[147] Y. Mei、Q. Chen、A. Lensen、B. Xue、M. Zhang，基于遗传编程的可解释人工智能：综述，《IEEE进化计算汇刊》27 (3) (2022) 621–641。[148] G. Kronberger、E. Kabliman、J. Kronsteiner、M. Kommenda，利用遗传编程扩展基于物理的本构模型，《工程科学应用》9 (2022) 100080。[149] D. M. de Oca Zapiain、J. M. D. Lane、J. D. Carroll、Z. Casias、C. C. Battaile、S. Fensin、H. Lim，通过使用遗传编程进行符号回归，为β-锡建立数据驱动强度模型，Computational Materials Science 218 (2023) 111967。[150] D. Birky、J. Emery、C. Hamel、J. Hochhalter，学习含噪数据集的隐式屈服面模型并量化不确定性，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 436 (2025) 117738。[151] M. Flaschel、S. Kumar、L. De Lorenzis，在没有应力数据的情况下发现塑性模型，npj Computational Materials 8 (1) (2022) 91。[152] M. Flaschel、S. Kumar、L. De Lorenzis，利用EUCLID自动发现广义标准材料模型，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 405 (2023) 115867。[153] H. Xu、M. Flaschel、L. De Lorenzis，利用EUCLID发现非关联压力敏感塑性模型，《工程科学高级建模与仿真》12 (1) (2025) 1。[154] Y. LeCun、Y. Bengio、G. Hinton，深度学习，《自然》521 (7553) (2015) 436–444。[155] F. Murtagh，用于分类和回归的多层感知机，《神经计算》2 (5-6) (1991) 183–197。[156] S. E. Dreyfus，人工神经网络、反向传播和Kelley-Bryson梯度过程，《制导、控制与动力学杂志》13 (5) (1990) 926–928。[157] J. Schmidt、A. Biswas、N.Vajragupta、A.Hartmaier，织构依赖各向异性材料行为的数据导向描述，Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 30 (6) (2022) 065001。[158] J. N. Fuhg、L. van Wees、M. Obstalecki、P. Shade、N. Bouklas、M. Kasemer，基于晶体塑性仿真进行机器学习，预测凸且依赖织构的宏观屈服，Materialia 23 (2022) 101446。[159] C. Settgast、G. Hütter、M. Kuna、M. Abendroth，一种利用神经网络仿真泡沫材料均匀化不可逆弹塑性变形和损伤的混合方法，《国际塑性学杂志》126 (2020) 102624。

[160] C. Ghnatios、O. Cazacu、B. Revil-Baudard、F. Chinesta，一种利用模型降阶技术与不变量神经网络描述各向异性屈服面的新方法，《固体力学与物理学杂志》184（2024年）105542。[161] D. J. Cruz、M. R. Barbosa、A. D. Santos、S. S. Miranda、R. L. Amaral，机器学习在弯曲工艺与材料识别中的应用，Metals 11（9）（2021年）1418。[162] H. Swift，平面应力下的塑性失稳，《固体力学与物理学杂志》1（1）（1952）1–18。[163] H. Aguir、H. BelHadjSalah、R. Hambli，基于人工神经网络–遗传算法方法的弹塑性行为参数识别，《材料与设计》32（1）（2011）48–53。[164] Q. T. Pham、H. S. Le、A. T. Nguyen、X. Xiao、Y.-S. Kim、V. D. Nguyen、H. S. Tran、X. Van Tran，一种基于机器学习的方法，用于识别铝板在渐进成形工艺过程中的塑性流动，The International Journal of Advanced Manufacturing Technology 120（5）（2022年）3559–3584。[165] D. Yao、Y.-c. Duan、M.-y. Li、Y.-p. Guan，基于BP神经网络与遗传算法的耦合黏塑性-损伤本构参数混合识别方法，《工程断裂力学》257（2021年）108027。[166] J. Ghaboussi、D. A. Pecknold、M. Zhang、R. M. Haj-Ali，神经网络本构模型的自适应渐进训练，《国际工程数值方法杂志》42（1）（1998）105–126。[167] C. Settgast、M. Abendroth、M. Kuna，利用神经网络对开孔泡沫结构塑性变形行为进行本构建模，《材料力学》131（2019年）1–10。[168] T. Furukawa、M. Hoffman，采用神经网络材料模型的精确循环塑性分析，《边界元工程分析》28（3）（2004）195–204。[169] M. Teranishi，基于回映算法的单轴循环塑性神经网络本构模型，《力学研究通讯》119（2022年）103815。[170] J.-L. Chaboche、G. Rousselier，论塑性与黏塑性本构方程——第一部分：基于内变量概念建立的规则（1983）。[171] D. Huang、J. N. Fuhg、C. Weißenfels、P. Wriggers，一种基于本征正交分解的机器学习塑性模型，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 365（2020）113008。[172] D. P. Jang、P. Fazily、J. W. Yoon，面向J2塑性的基于机器学习的本构模型，《国际塑性学杂志》138（2021年）102919。[173] A. Zhang、D. Mohr，利用神经网络表征具有各向同性硬化的冯·米塞斯塑性，《国际塑性学杂志》132（2020）102732。[174] P. Fazily、J. W. Yoon，面向板料成形中各向异性塑性的机器学习驱动应力积分方法，《国际塑性学杂志》166（2023年）103642。[175] M.-S. Kim、T. Lee、Y. Kim，一种采用Haigh–Westergaard坐标与数据增强的神经网络集成弹塑性本构模型，《工程科学与技术：国际期刊》69（2025年）102104。[176] Y. Zhang、Q.-J. Li、T. Zhu、J. Li，利用神经网络与全场数据学习塑性本构关系，《极端力学快报》52（2022年）101645。

[177] M. Kroon，一种利用神经网络对黏塑性以及各向同性与定向材料硬化进行建模的欧拉框架，《国际工程数值方法杂志》126（17）（2025年）e70083。[178] T. Furukawa、G. Yagawa，利用神经网络进行黏塑性隐式本构建模，《国际工程数值方法杂志》43（2）（1998）195–219。[179] S. Jung、J. Ghaboussi，在自学习模拟中表征率相关材料行为，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 196（1-3）（2006）608–619。[180] A. Tsoi，神经网络方法在钢板轧机屈服强度建模中的应用，《神经信息处理系统进展》4（1991）。[181] P. D. Hodgson、L. X. Kong、C. H. Davies，采用唯象模型与人工神经网络模型相结合预测钢的热强度，Journal of Materials Processing Technology 87（1-3）（1999）131–138。[182] J. Liu、H. Chang、T. Hsu、X. Ruan，利用BP人工神经网络预测高速钢热变形过程中的流动应力，Journal of Materials Processing Technology 103（2）（2000）200–205。[183] Y. Sun、W. Zeng、Y. Zhao、Y. Qi、X. Ma、Y. Han，利用人工神经网络建立Ti600合金的本构关系模型，Computational Materials Science 48（3）（2010年）686–691。[184] H.-Y. Li、X.-F. Wang、D.-D. Wei、J.-D. Hu、Y.-H. Li，改进Zerilli–Armstrong模型、阿伦尼乌斯型模型与人工神经网络模型预测T24钢高温变形行为的对比研究，Materials Science and Engineering: A 536（2012）216–222。[185] R. Bobbili、B. Ramakrishna、V. Madhu、A. Gogia，高温高应变率压缩条件下7017铝合金流动应力的预测，《防务技术》11（1）（2015）93–98。[186] X. Li、C. C. Roth、D. Mohr，基于机器学习的温度与速率相关塑性模型：在双相钢断裂实验分析中的应用，《国际塑性学杂志》118（2019年）320–344。[187] V. Tuninetti、D. Forcael、M. Valenzuela、A. Martínez、A. Ávila、C. Medina、G. Pincheira、A. Salas、A. Oñate、L. Duchêne，评估前馈反向传播人工神经网络在应变率敏感力学建模中的适用性，Materials 17（2）（2024年）317。[188] P. Opˇela、I. Schindler、P. Kawulok、R. Kawulok、S. Rusz、M. Sauer，描述热态流动应力演化的人工神经网络模型的浅层学习与深度学习：对比研究，《材料与设计》220（2022年）110880。[189] H. Shang、P. Wu、Y. Lou、J. Wang、Q. Chen，基于机器学习的5182-O铝合金应变率与温度对应变硬化耦合效应建模，Journal of Materials Processing Technology 302（2022年）117501。[190] X. Li、C. C. Roth、C. Bonatti、D. Mohr，考虑动态应变时效的速率与温度相关硬化反例训练神经网络模型，《国际塑性学杂志》151（2022年）103218。[191] L. Fangpo、L. Ning、R. Xiaojian、Q. Song、L. Caihong、W. Jianjun、X. Yang、W. Bin，高强度高韧性海洋工程钢热变形流动应力的阿伦尼乌斯本构方程与人工神经网络模型，《材料技术》38（1）（2023年）2264670。[192] C. Zhang、Q. Shi、Y. Wang、J. Qiao、T. Tang、J. Zhou、W. Liang、G. Chen，面向高温下IN718合金流动应力预测的优化人工神经网络，Materials 16（7）（2023年）2663。[193] J. Xu、C. Sun、H. Liang、L. Qian、C. Wang，铁锰铬基合金热变形行为本构模型：物理模型、人工神经网络模型、模型优化、参数评估与校准，Metals 15（5）（2025年）512。

[194] A. S. Ebrahim, Q. Zhang, J. Ha，人工神经网络增强的塑性建模与1级商业纯钛的韧性断裂表征，《国际塑性学杂志》179 (2024) 104044。[195] D. Z. Huang, K. Xu, C. Farhat, E. Darve，利用深度神经网络从间接观测中学习本构关系，计算物理学杂志416 (2020) 109491。[196] D. S. Broomhead, D. Lowe，径向基函数、多变量函数插值与自适应网络，技术报告（1988）。[197] M. Huang, J. Jiang, Y. Wang, Y. Liu, Y. Zhang, J. Dong, Z. Tong，揭示粉末冶金体心立方/B2 Al1.8CrCuFeNi2高熵合金的热变形行为与微观结构演化，并预测流动应力，合金与化合物学报972 (2024) 172828。[198] J. Ghaboussi, D. E. Sidarta，用于本构建模的新型嵌套自适应神经网络（NANN），《计算机与岩土工程》22 (1) (1998) 29–52。[199] D. Sidarta, J. Ghaboussi，基于非均匀材料试验的地质材料本构建模，《计算机与岩土工程》22 (1) (1998) 53–71。[200] Q. Fu, Y. M. Hashash, S. Jung, J. Ghaboussi，实验室试验与土体本构建模的结合，《计算机与岩土工程》34 (5) (2007) 330–345。[201] G. J. Yun, J. Ghaboussi, A. S. Elnashai，一种用于材料滞回行为的新型神经网络模型，《国际工程数值方法杂志》73 (4) (2008) 447–469。[202] D. Penumadu, R. Zhao，利用人工神经网络（ANN）研究砂与砾石的三轴压缩行为，《计算机与岩土工程》24 (3) (1999) 207–230。[203] M. Su, N. Guo, Z. Yang，一种用于复杂土体行为本构建模的多保真神经网络（MFNN），International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 47 (18) (2023) 3269–3289。[204] B. Liu, N. Kovachki, Z. Li, K. Azizzadenesheli, A. Anandkumar, A. M. Stuart, K. Bhattacharya，一种基于学习的多尺度方法及其在非弹性冲击问题中的应用，《固体力学与物理学杂志》158 (2022) 104668。[205] U. Ali, W. Muhammad, A. Brahme, O. Skiba, K. Inal，人工神经网络在多晶金属细观力学中的应用，《国际塑性学杂志》120 (2019) 205–219。[206] O. Ibragimova, A. Brahme, W. Muhammad, J. Lévesque, K. Inal，一种基于ANN的新型面心立方材料晶体塑性模型及其在非单调应变路径中的应用，《国际塑性学杂志》144 (2021) 103059。[207] K. Linka, M. Hillgärtner, K. P. Abdolazizi, R. C. Aydin, M. Itskov, C. J. Cyron，本构人工神经网络：通过深度学习实现预测性数据驱动本构建模的一种快速通用方法，计算物理学杂志429 (2021) 110010。[208] W. Dai, H. Wang, Q. Guan, D. Li, Y. Peng, C. N. Tomé，利用人工神经网络研究多晶金属的细观力学行为，《材料学报》214 (2021) 117006。[209] D. S. Bulgarevich, M. Watanabe，基于晶体塑性仿真和机器学习的应力–应变曲线预测，《科学报告》14 (1) (2024) 29492。[210] A. Nascimento, S. Roongta, M. Diehl, I. J. Beyerlein，一种基于机器学习的模型，用于根据晶体塑性仿真预测屈服面，《国际塑性学杂志》161 (2023) 103507。[211] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville, Y. Bengio，深度学习，第1卷，麻省理工学院出版社，剑桥，2016。

[212] S. M. Azimi, D. Britz, M. Engstler, M. Fritz, F. Mücklich，利用深度学习方法进行先进钢材显微组织分类，《科学报告》8 (1) (2018) 2128。[213] T. M. Ostormujof, R. P. R. Purohit, S. Breumier, N. Gey, M. Salib, L. Germain，利用深度学习自动分割EBSD图中的相：双相钢微观组织案例研究，《材料表征》184 (2022) 111638。[214] C. Kunselman, V. Attari, L. McClenny, U. Braga-Neto, R. Arroyave，针对歧义显微组织进行类别分配的半监督学习方法，《材料学报》188 (2020) 49–62。[215] J. P. Papa, R. Y. Nakamura, V. H. C. De Albuquerque, A. X. Falcão, J. M. R. Tavares，用于自动表征工业材料金相图像中石墨颗粒的计算机技术，《Expert Systems with Applications》40 (2) (2013) 590–597。[216] G. Roberts, S. Y. Haile, R. Sainju, D. J. Edwards, B. Hutchinson, Y. Zhu，利用深度学习对先进钢材STEM图像中的缺陷进行语义分割，《科学报告》9 (1) (2019) 12744。[217] K. Kaufmann, C. Zhu, A. S. Rosengarten, D. Maryanovsky, T. J. Harrington, E. Marin, K. S. Vecchio，利用机器学习确定电子衍射中的晶体对称性，《科学》367 (6477) (2020) 564–568。[218] S. Masubuchi, E. Watanabe, Y. Seo, S. Okazaki, T. Sasagawa, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Machida，结合光学显微镜的深度学习图像分割，用于自动搜寻二维材料，《npj二维材料及其应用》4 (1) (2020) 3。[219] S. P. Mishra, M. Rahul，卷积神经网络用于微观结构识别的详细研究，《材料化学与物理》308 (2023) 128275。[220] K. Simonyan, A. Zisserman，用于大规模图像识别的超深卷积网络，arXiv预印本arXiv:1409.1556 (2014)。[221] C. Szegedy, W. Liu, Y. Jia, P. Sermanet, S. Reed, D. Anguelov, D. Erhan, V. Vanhoucke, A. Rabinovich，通过卷积不断深入，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2015，第1–9页。[222] K. He, X. Zhang, S. Ren, J. Sun，用于图像识别的深度残差学习，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2016，第770–778页。[223] J. Long, E. Shelhamer, T. Darrell，用于语义分割的全卷积网络，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2015，第3431–3440页。[224] O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox，U-Net：用于生物医学图像分割的卷积网络，载于：国际医学图像计算与计算机辅助干预会议，施普林格，2015，第234–241页。[225] S. Breumier, T. M. Ostormujof, B. Frincu, N. Gey, A. Couturier, N. Loukachenko, P. Aba-Perea, L. Germain，利用深度学习发掘EBSD数据，实现贝氏体、铁素体和马氏体分割，《材料表征》186 (2022) 111805。[226] J. Yeom, T. Stan, S. Hong, P. W. Voorhees，通过在相场仿真数据上训练的卷积神经网络对实验数据集进行分割，《材料学报》214 (2021) 116990。[227] I. D. Khurjekar, B. Conry, M. S. Kesler, M. R. Tonks, A. R. Krause, J. B. Harley，利用卷积神经网络对织构显微组织进行自动化高精度分类，《材料前沿》10 (2023) 1086000。[228] C. Herriott, A. D. Spear，利用机器学习和深度学习方法预测增材制造金属中与显微组织相关的力学性能，Computational Materials Science 175 (2020) 109599。

[229] X. Qin, H. Zhai, L. Wang, S. Xia, B. Jiang, Q. Wang, 一种用于预测镁合金力学性能的新型多模态特征融合卷积神经网络, Materials Letters 370 (2024年) 136863.[230] D. Ren, C. Wang, X. Wei, Q. Lai, W. Xu, 通过多模态数据挖掘建立双相钢的定量成分-微观组织-性能关系, 《材料学报》 252 (2023年) 118954.[231] J. N. Heidenreich, M. B. Gorji, D. Mohr, 利用卷积神经网络对结构-性能关系进行建模：基于微观结构图像的屈服面预测, 《国际塑性学杂志》 163 (2023年) 103506.[232] A. Gollapalli, A. K. Singh, 面向镍基和钴基高温合金微观结构-性能关系的新型可解释深度学习框架设计, Computational Materials Science 253 (2025年) 113854.[233] P. Gavallas, G. Stefanou, D. Savvas, C. Mattrand, J.-M. Bourinet, 基于卷积神经网络预测复合材料由微观结构导出的随机性能场, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 430 (2024年) 117207.[234] J. R. Mianroodi, N. H. Siboni, D. Raabe, 向人工智能教授固体力学——非均质材料的快速求解器, npj Computational Materials 7 (1) (2021年) 99.[235] O. Ibragimova, A. Brahme, W. Muhammad, D. Connolly, J. Levesque, K. Inal, 基于卷积神经网络的晶体塑性有限元框架以预测金属中的局部变形, 《国际塑性学杂志》 157 (2022年) 103374.[236] A. Yamanaka, R. Kamijyo, K. Koenuma, I. Watanabe, T. Kuwabara, 估算板材双轴应力-应变曲线的深度神经网络方法, 《材料与设计》 195 (2020) 108970.[237] M. S. Khorrami, J. R. Mianroodi, N. H. Siboni, P. Goyal, B. Svendsen, P. Benner, D. Raabe, 用于黏塑性多晶材料应力场代理建模的人工神经网络, npj Computational Materials 9 (1) (2023年) 37.[238] Y. Ma, C. Deng, Z. Sun, B. Gong, Y. Liu, 通过卷积神经网络预测双相钢中的序列应力-应变场, Materials Today Communications (2025年) 112645.[239] A. L. Frankel, R. E. Jones, C. Alleman, J. A. Templeton, 利用深度学习预测少晶粒晶体的力学响应, Computational Materials Science 169 (2019年) 109099.[240] X. Shi, Z. Chen, H. Wang, D.-Y. Yeung, W.-K. Wong, W.-c. Woo, 卷积长短期记忆网络：一种用于降水临近预报的机器学习方法, 《神经信息处理系统进展》 28 (2015).[241] A. Frankel, K. Tachida, R. Jones, 采用混合神经网络模型预测经历弹塑性变形的多晶材料应力场演化, 《机器学习：科学与技术》 1 (3) (2020) 035005.[242] C. Yang, Y. Kim, S. Ryu, G. X. Gu, 利用卷积神经网络预测复合材料微观结构的应力-应变曲线, 《材料与设计》 189 (2020) 108509.[243] Z. Ding, H. R. Attar, H. Wang, H. Liu, N. Li, 融合卷积神经网络与本构模型以快速预测纤维增强聚合物的应力-应变曲线：一种可泛化方法, 《材料与设计》 241 (2024年) 112849.[244] I. Saha, A. Gupta, L. Graham-Brady, 利用深度卷积神经网络预测两相复合材料微观结构中的局部弹塑性应力应变场, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 421 (2024年) 116816.[245] Y. Sun, I. Hanhan, M. D. Sangid, G. Lin, 利用卷积神经网络从纤维增强聚合物的微观结构图像预测力学性能, Journal of Composites Science 8 (10) (2024年) 387.

[246] D. Saha, L. Sun, C. Q. Lai, 一种科学导向的渐进神经网络，用于复合材料弹塑性行为的多模态预测, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing (2025年) 109179.[247] D. Saha, L. Sun, C. Q. Lai, 用于生成具有自定义夹杂物形状且体积分数极高的随机微观结构的高效网格辅助放置算法, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing (2025年) 109112.[248] Z. Guo, R. Bai, Z. Lei, H. Jiang, D. Liu, J. Zou, C. Yan, Cpinet：基于CNN-LSTM的路径相关本构模型参数识别与自动去噪, 《欧洲力学杂志A辑：固体》 90 (2021年) 104327.[249] P. Zhao, Y. Wang, B. Jiang, H. Zhang, X. Cheng, Q. Fan, 基于多模态数据的钛合金成分-微观组织-性能关系神经网络建模, 《材料科学与工程：A》 879 (2023年) 145202.[250] E. Azqadan, A. Arami, H. Jahed, 从微观结构到力学性能：基于图像的机器学习对AZ80镁合金的预测, Journal of Magnesium and Alloys (2025年).[251] R. Wang, J. Tian, Z. Zhai, E. Tang, Z. Wang, L. Wang, H. Cao, C. Chen, 基于卷积神经网络的铝/环氧树脂复合材料本构建模与参数识别, 《聚合物复合材料》 (2025年).[252] S. Bai, J. Z. Kolter, V. Koltun, 通用卷积网络与循环网络用于序列建模的实证评估, arXiv预印本 arXiv:1803.01271 (2018).[253] J.-J. Wang, C. Wang, J.-S. Fan, Y. Mo, 基于时间卷积网络的本构建模深度学习框架, 计算物理学杂志 449 (2022年) 110784.[254] M. Wang, T. Qu, S. Guan, T. Zhao, B. Liu, Y. Feng, 通过时间卷积网络对颗粒材料进行数据驱动的应变-应力建模, 《计算机与岩土工程》 152 (2022年) 105049.[255] Q.-J. Li, M. N. Cinbiz, Y. Zhang, Q. He, G. Beausoleil II, J. Li, 用于本构关系建模的稳健深度学习框架, 《材料学报》 254 (2023年) 118959.[256] G. Ellis, C. Yao, R. Zhao, D. Penumadu, 利用人工神经网络进行砂土的应力-应变建模, 《岩土工程学报》 121 (5) (1995年) 429–435.[257] M. I. Jordan, 联结主义序列机中的吸引子动力学与并行性, 载于：认知科学学会年会论文集, 第8卷, 1986年.[258] N. Kartam, I. Flood, J. H. Garrett, 面向土木工程师的人工神经网络：基础与应用, 美国土木工程师学会, 1997年.[259] Y. M. Najjar, I. A. Basheer, 讨论：利用人工神经网络进行砂土的应力-应变建模, 《岩土工程学报》 122 (11) (1996年) 949–951.[260] J. L. Elman, 在时间中发现结构, 《认知科学》 14 (2) (1990年) 179–211.[261] J.-H. Zhu, M. M. Zaman, S. A. Anderson, 利用循环神经网络对残积土剪切行为进行建模, International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 22 (8) (1998) 671–687.[262] J.-H. Zhu, M. M. Zaman, S. A. Anderson, 利用循环神经网络对土体行为进行建模, 《加拿大岩土工程学报》 35 (5) (1998) 858–872.[263] Y. M. Najjar, C. Huang, 通过循环神经元网络方法模拟佐治亚高岭土的应力–应变行为, 《计算机与岩土工程》 34 (5) (2007年) 346–361.

[264] G. Habibagahi，A. Bamdad，非饱和土力学行为的神经网络框架，《加拿大岩土工程杂志》40 (3) (2003) 684–693。[265] M. P. Romo，S. R. García，M. J. Mendoza，V. Taboada-Urtuzuástegui，砂土行为建模的循环网络与构造算法网络，《国际地质力学杂志》1 (4) (2001) 371–387。[266] I. A. Basheer，土体本构滞回行为神经网络建模方法的选择，《计算机辅助土木与基础设施工程》15 (6) (2000) 445–463。[267] I. Basheer，Y. Najjar，通过神经网络建模循环本构行为：理论数据与真实数据，载于：第12届工程力学会议论文集，加利福尼亚州拉霍亚，1998，pp. 952–955。[268] W. G. Dettmer，E. J. Muttio，R. Alhayki，D. Peri´c，非弹性材料基于神经网络的本构建模框架，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》420 (2024年) 116672。[269] J. P. Stöcker，J. Platen，M. Kaliske，在隐式梯度增强损伤框架中引入循环神经网络本构描述，《计算机与结构》289 (2023年) 107162。[270] S. Hochreiter，J. Schmidhuber，长短期记忆，《Neural Computation》9 (8) (1997) 1735–1780。[271] E. M. Haghighi，S. Na，利用单一长短期记忆网络增强具有材料非均质性和各向异性的路径相关塑性预测，arXiv预印本 arXiv:2204.01466 (2022)。[272] P.-J. Hoedt，F. Kratzert，D. Klotz，C. Halmich，M. Holzleitner，G. S. Nearing，S. Hochreiter，G. Klambauer，Mc-lstm：质量守恒长短期记忆，载于：国际机器学习会议，PMLR，2021，pp. 4275–4286。[273] S. Im，J. Lee，M. Cho，通过长短期记忆神经网络和本征正交分解对弹塑性问题进行代理建模，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》385 (2021) 114030。[274] F. Ghavamian，A. Simone，利用循环神经网络加速历史相关材料的多尺度有限元模拟，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》357 (2019年) 112594。[275] Q. Chen，R. Jia，S. Pang，用于异构材料加速弹塑性分析的深度长短期记忆神经网络：一种集成式数据驱动代理方法，《Composite Structures》264 (2021) 113688。[276] J.-Z. Li，Z.-P. Guan，J.-R. Chen，H.-C. Jin，捕捉塑性变形中应变路径依赖性的基于长短期记忆的本构建模框架，《材料力学》205 (2025年) 105325。[277] K. Frydrych，M. Tomczak，S. Papanikolaou，循环变形电沉积铜的晶体塑性参数优化——一种机器学习方法，《材料》17 (14) (2024年) 3397。[278] H. Wen，S. Wang，J. Jin，X. Wang，X. Tang，Y. Zhang，L. Deng，P. Gong，D. Li，B. Ning，等，针对新型热等静压粉末冶金镍基高温合金应变率相关热机械加工响应的深度学习建模，《Journal of Materials Processing Technology》324 (2024年) 118226。[279] T. Wang，Y. Yu，H. Luo，Z. Wang，基于循环神经网络的钢材塑性本构训练方法，《Buildings》14 (10) (2024年) 3279。[280] X. Li，J. Wang，利用循环神经网络预测理想化颗粒土的本构行为，Applied Sciences 15 (17) (2025年) 9495。[281] K. Cho，B. Van Merriënboer，C. Gulcehre，D. Bahdanau，F. Bougares，H. Schwenk，Y. Bengio，利用RNN编码器-解码器学习统计机器翻译的短语表征，arXiv预印本 arXiv:1406.1078 (2014)。

[282] F. Barlat，J. Brem，J. W. Yoon，K. Chung，R. Dick，D. Lege，F. Pourboghrat，S.-H. Choi，E. Chu，铝合金板材平面应力屈服函数——第1部分：理论，《国际塑性学杂志》19 (9) (2003) 1297–1319。[283] Z. Yu，C. Han，H. Yang，Y. Wang，S. Tang，X. Guo，由GRU和少量数据驱动的复杂加载下弹塑性本构建模，《Theoretical and Applied Mechanics Letters》12 (6) (2022年) 100363。[284] Y. He，S. J. Semnani，基于机器学习的路径相关材料有限元分析建模，《计算机与岩土工程》156 (2023年) 105254。[285] S. Guan，X. Zhang，S. Ranftl，T. Qu，用于弹塑性的基于神经网络的材料单元及其在边值问题有限元分析中的性能，《国际塑性学杂志》171 (2023年) 103811。[286] C. Bonatti，D. Mohr，一体适用：基于最简状态空间神经网络的通用材料模型，《Science Advances》7 (26) (2021年) eabf3658。[287] C. Bonatti，D. Mohr，表示弹塑性固体的循环神经网络模型中自洽性的重要性，《固体力学与物理学杂志》158 (2022年) 104697。[288] C. Bonatti，B. Berisha，D. Mohr，从CP-FFT到CP-RNN：晶体塑性的循环神经网络代理模型，《国际塑性学杂志》158 (2022年) 103430。[289] J. N. Heidenreich，C. Bonatti，D. Mohr，基于循环神经网络的塑性模型迁移学习，《国际工程数值方法杂志》125 (1) (2024年) e7357。[290] L. Wu，L. Noels，用于历史相关非线性问题代理建模的自洽性强化最简门控循环单元：异构材料历史相关均匀化响应的应用，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》424 (2024年) 116881。[291] J. N. Heidenreich，D. Mohr，循环神经网络塑性模型：通过多任务学习揭示其共同核心，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》426 (2024年) 116991。[292] T. Qu，S. Di，Y. Feng，M. Wang，T. Zhao，通过微观力学引导的深度学习实现颗粒材料的数据驱动本构建模，《国际塑性学杂志》144 (2021) 103046。[293] J. Stöcker，A. Fuchs，F. Leichsenring，M. Kaliske，通过神经网络实现增强非弹性本构描述鲁棒性的新型自对抗训练方案，《计算机与结构》265 (2022) 106774。[294] S. Vijayaraghavan，L. Wu，L. Noels，S. Bordas，S. Natarajan，L. A. Beex，应用于代表性体积单元的完整弹塑性模拟的数据驱动降阶代理模型，《科学报告》13 (1) (2023年) 12781。[295] L. Wu，N. G. Kilingar，L. Noels，等，用于受随机循环和非比例加载路径作用的弹塑性异构材料的循环神经网络加速多尺度模型，《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering》369 (2020) 113234。[296] Y. Hu，G. Zhou，M. Knezevic，Y. Shen，P. Wu，D. Li，从细观尺度到宏观尺度的基于神经网络晶体塑性模型的多尺度建模，《材料学报》 (2025年) 121075。[297] A. Vaswani，N. Shazeer，N. Parmar，J. Uszkoreit，L. Jones，A. N. Gomez，Ł. Kaiser，I. Polosukhin，注意力就是你所需要的一切，载于：《神经信息处理系统进展》第30卷（2017）。[298] S. Islam，H. Elmekki，A. Elsebai，J. Bentahar，N. Drawel，G. Rjoub，W. Pedrycz，Transformer在深度学习任务中应用的全面综述，《Expert Systems with Applications》241 (2024年) 122666。[299] I. Sutskever，O. Vinyals，Q. V. Le，利用神经网络进行序列到序列学习，载于：《神经信息处理系统进展》第27卷（2014）。

[300] J. L. Ba, J. R. Kiros, G. E. Hinton，层归一化，arXiv 预印本 arXiv:1607.06450（2016）。[301] H. Irani, V. Metsis，基于 Transformer 的时间序列模型中的位置编码：综述，arXiv 预印本 arXiv:2502.12370（2025）。[302] C. Wang, L.-y. Xu, J.-s. Fan，基于 ua-seq2seq 模型的历史依赖响应预测通用深度学习框架，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 372（2020）113357。[303] L. Han, C. Duan, T. Zhang，预测应力–应变本构关系：一种基于多头注意力机制和长短期记忆网络的深度学习方法，Comptes Rendus. Mécanique 353（G1）（2025）953–988。[304] T. Wu, M. Chen，一种基于自适应稀疏自注意力机制的热变形行为预测方法，Materials Today Communications 44（2025）112030。[305] F. Li, T. Peng，结合 GRU 和注意力机制开发一种新的高阻尼橡胶本构模型，Polymers 16（5）（2024）567。[306] S. Tan, D. He, Y. Lin, B. Zheng, H. Wu, Ti-55511 合金在两阶段高温成形及不同应变速率下的位错亚结构演化与 Informer 本构模型，β区域，Materials 16（9）（2023）3430。[307] C. Liu, X. Chen, W. Chen, L. Shi, W. Li, X. Su, Y. Shi，基于 Transformer 深度学习方法的 Z2CN18.10 奥氏体不锈钢单轴和多轴循环变形行为预测，International Journal of Fatigue 186（2024）108389。[308] J. Yang, B. Liu, H. Huang，结合特征构造与注意力机制的压铸铝合金成分–工艺–性能预测研究，Journal of Materials Research and Technology 28（2024）335–346。[309] C. Liu, X. Li, J. Ge, X. Liu, B. Li, Z. Liu, J. Liang，一种基于注意力机制的深度学习框架，用于预测内嵌褶皱纤维增强复合材料的力学性能与失效模式，Composites Part A: Applied Science and Manufacturing 186（2024）108401。[310] G. Yu, X. Tang, X. Jiang, L. Deng, H. Fu, X. Wang，一种适用于多种加载条件下三维晶体塑性模拟的稳健且可扩展代理模型，Acta Materialia（2025）121441。[311] S. Kim, H. Shin，通过本征正交分解和 Transformer 架构加速弹塑性材料的数据驱动多尺度有限元分析，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 437（2025）117827。[312] Z. Liu, Y. Lin, Y. Cao, H. Hu, Y. Wei, Z. Zhang, S. Lin, B. Guo，Swin Transformer：采用移位窗口的分层视觉 Transformer，载于：IEEE/CVF 国际计算机视觉会议论文集，2021，第10012–10022页。[313] Q. Zhao, W. Zhao, L. Yuan, R. Xing, B. Sun, Y. Yang，一种基于 Transformer 的深度学习方法，利用应变场预测预制桥面板接缝的力学响应并进行失效分析，Engineering Structures 344（2025）121407。[314] H. Cao, Y. Wang, J. Chen, D. Jiang, X. Zhang, Q. Tian, M. Wang，Swin-Unet：用于医学图像分割的类 U-Net 纯 Transformer，载于：欧洲计算机视觉会议，施普林格，2022，第205–218页。[315] C. M. Bishop, H. Bishop，深度学习：基础与概念，施普林格·自然，2023。[316] S. Zhang, H. Tong, J. Xu, R. Maciejewski，图卷积网络：综合综述，Computational Social Networks 6（1）（2019）1–23。

[317] P. Veli˘ckovi´c, G. Cucurull, A. Casanova, A. Romero, P. Lio, Y. Bengio，图注意力网络，arXiv 预印本 arXiv:1710.10903（2017）。[318] A. Shehzad, F. Xia, S. Abid, C. Peng, S. Yu, D. Zhang, K. Verspoor，图变换器：综述，arXiv 预印本 arXiv:2407.09777（2024）。[319] T. N. Kipf, M. Welling，变分图自编码器，arXiv 预印本 arXiv:1611.07308（2016）。[320] L.-H. Song, C. Wang, J.-S. Fan, H.-M. Lu，一种无需带标签数据、基于图神经网络的弹性结构分析方法，计算机辅助土木与基础设施工程 38（10）（2023）1307–1323。[321] D. C. Pagan, C. R. Pash, A. R. Benson, M. P. Kasemer，利用模拟和测量的微观尺度数据，通过图神经网络建模晶粒尺度各向异性弹性行为，npj Computational Materials 8（1）（2022）259。[322] D. Dalton, D. Husmeier, H. Gao，软组织力学的物理信息图神经网络仿真，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 417（2023）116351。[323] Y.-T. Chou, W.-T. Chang, J. G. Jean, K.-H. Chang, Y.-N. Huang, C.-S. Chen，StructGNN：一种用于静力结构分析的高效图神经网络框架，《计算机与结构》299（2024）107385。[324] N. N. Vlassis, W. Sun，计算力学的几何学习（第二部分）：用于可解释多尺度塑性的图嵌入，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 404（2023）115768。[325] A. Thomas, A. R. Durmaz, M. Alam, P. Gumbsch, H. Sack, C. Eberl，利用微观结构表征和图神经网络预测材料疲劳，《科学报告》13（1）（2023）12562。[326] G.-J. Sim, M.-G. Lee, M. I. Latypov，FIP-GNN：用于可扩展预测晶粒级疲劳指示参数的图神经网络，Scripta Materialia 255（2025）116407。[327] Y. Qin, S. DeWitt, B. Radhakrishnan, G. Biros，GrainGNN：用于预测三维晶粒微观结构的动态图神经网络，计算物理学杂志 510（2024）113061。[328] J. Mei, G. Ma, W. Cao, T. Wu, W. Zhou，图神经网络揭示剪切颗粒材料中结构缺陷的时空演化，《国际塑性学杂志》184（2025）104218。[329] N. N. Vlassis, R. Ma, W. Sun，计算力学的几何深度学习（第一部分）：各向异性超弹性，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 371（2020）113299。[330] G. Hu, M. I. Latypov，AnisoGNN：能够泛化至多晶材料各向异性性质的图神经网络，Computational Materials Science 243（2024）113121。[331] M. Dai, M. F. Demirel, Y. Liang, J.-M. Hu，用于准确且可解释地预测多晶材料性能的图神经网络，npj Computational Materials 7（1）（2021）103。[332] J. M. Hestroffer, M.-A. Charpagne, M. I. Latypov, I. J. Beyerlein，用于高效学习多晶材料力学性能的图神经网络，Computational Materials Science 217（2023）111894。[333] M. Dai, M. F. Demirel, X. Liu, Y. Liang, J.-M. Hu，用于预测多晶材料有效性质的图神经网络：综合分析，Computational Materials Science 230（2023）112461。[334] J. G. Jean, T.-H. Su, S.-J. Huang, C.-T. Wu, C.-S. Chen，图增强深度材料网络：结合微观结构信息学的多尺度材料建模，Computational Mechanics 75（1）（2025）113–136。[335] Z. Gao, C. Zhu, Y. Shu, C. Wang, Y. Chen, S. Wang，PGCNN：一种用于预测 Ti-6Al-4V 合金力学性能的可解释图卷积神经网络，Applied Intelligence 55（7）（2025）634。[336] Y. Hu, G. Zhou, M.-G. Lee, P. Wu, D. Li，考虑微观结构相互作用的多晶跨尺度建模时序图神经网络，《国际塑性学杂志》179（2024）104017。

[337] Z. Gao, C. Zhu, C. Wang, Y. Shu, S. Liu, J. Miao, L. Yang, 《基于多晶材料微观结构特征的力学性能多尺度预测深度学习框架》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 438 (2025) 117844。[338] Y. Heider, K. Wang, W. Sun, 《各向异性弹塑性材料基于信息图的深度神经网络的 SO(3) 不变性》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 363 (2020) 112875。[339] M. Maurizi, C. Gao, F. Berto, 《利用图神经网络预测材料与结构中的应力、应变和变形场》, 《科学报告》12 (1) (2022) 21834。[340] J. Storm, I. B. Rocha, F. van der Meer, 《基于微观结构的图神经网络加速多尺度模拟》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 427 (2024) 117001。[341] H. Zhai, 《利用子图训练的图神经网络预测多晶塑性中的应力》, Computational Mechanics (2025) 1–22。[342] M. Raghu, B. Poole, J. Kleinberg, S. Ganguli, J. Sohl-Dickstein, 《论深度神经网络的表达能力》, 载于：国际机器学习会议，PMLR，2017，第2847–2854页。[343] X. Glorot, Y. Bengio, 《理解深度前馈神经网络训练的难点》, 载于：第十三届国际人工智能与统计学会议论文集, JMLR研讨会与会议论文集，2010，第249–256页。[344] M. Cranmer, 《利用 PySR 和 symbolicregression.jl 开展科学领域的可解释机器学习》, arXiv 预印本 arXiv:2305.01582 (2023)。[345] G. Cruz, B. Renczes, M. C. Runacres, J. Decuyper, 《用于可解释非线性系统辨识的状态空间 Kolmogorov-Arnold 网络》, 《IEEE控制系统快报》(2025)。[346] S. A. Faroughi, F. Mostajeran, A. H. Mashhadzadeh, S. Faroughi, 《利用 Kolmogorov-Arnold 网络开展科学机器学习》, arXiv 预印本 arXiv:2507.22959 (2025)。[347] Z. Liu, Y. Wang, S. Vaidya, F. Ruehle, J. Halverson, M. Solja˘ci´c, T. Y. Hou, M. Tegmark, 《KAN：Kolmogorov-Arnold 网络》, arXiv 预印本 arXiv:2404.19756 (2024)。[348] A. N. Kolmogorov, 《关于通过单变量连续函数的叠加和加法表示多变量连续函数》, 载于：《苏联科学院院报》, 第114卷，1957年，第953–956页。[349] A. N. Kolmogorov, 《关于通过较少变量的连续函数的叠加表示多个变量的连续函数》, 美国数学会，1961年。[350] V. I. Arnol’d, 《关于通过二变量连续函数的叠加表示三变量连续函数》, 《数学文集》90 (1) (1959年) 3–74。[351] X. Yang, X. Wang, 《Kolmogorov-Arnold 变换器》, arXiv 预印本 arXiv:2409.10594 (2024年)。[352] Z. Li, 《Kolmogorov-Arnold 网络是径向基函数网络》, arXiv 预印本 arXiv:2405.06721 (2024年)。[353] S. Essahraui, I. Lamaakal, K. El Makkaoui, I. Ouahbi, M. F. Bouami, Y. Maleh, 《Kolmogorov-Arnold 网络：架构与应用案例概述》, 载于：2025年国际电路、系统与通信会议（ICCSC）, IEEE，2025，第1–6页。[354] S. Somvanshi, S. A. Javed, M. M. Islam, D. Pandit, S. Das, 《Kolmogorov-Arnold 网络综述》, ACM Computing Surveys 58 (2) (2025) 1–35。[355] P. Thakolkaran, Y. Guo, S. Saini, M. Peirlinck, B. Alheit, S. Kumar, 《KAN 可以吗？作为超弹性本构人工神经网络（CANN）的输入凸 Kolmogorov-Arnold 网络（KAN）》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 443 (2025) 118089。

[356] K. P. Abdolazizi, R. C. Aydin, C. J. Cyron, K. Linka, 《本构 Kolmogorov–Arnold 网络（CKANs）：兼顾数据驱动材料建模的准确度与可解释性》, 《固体力学与物理学杂志》(2025) 106212。[357] F.-F. Li, J. Zhu, W. Zhang, S. Wen, 《Kolmogorov–Arnold 网络在预测 GH4698 合金热变形流动应力曲线中的应用》, Journal of Materials Engineering and Performance (2025) 1–17。[358] Y. Yin, Z. Long, S. Jin, Y. Li, F. Wang, X. Xu, 《钢包内衬热力学行为的多物理场耦合人工智能预测方法》, Knowledge-Based Systems (2025) 114495。[359] F. Mostajeran, S. A. Faroughi, 《EPI-CKANs：利用切比雪夫多项式的弹塑性信息 Kolmogorov-Arnold 网络》, arXiv 预印本 arXiv:2410.10897 (2024)。[360] J. Gao, P. Li, Z. Chen, J. Zhang, 《多模态数据融合深度学习综述》, Neural Computation 32 (5) (2020) 829–864。[361] F. Zhao, C. Zhang, B. Geng, 《深度多模态数据融合》, ACM Computing Surveys 56 (9) (2024) 1–36。[362] X. Sun, M. Xie, K. Zhou, X. Chen, 《利用多模态神经网络预测多晶材料的局部塑性变形》, International Journal of Solids and Structures (2025) 113721。[363] Y. Mao, S. Keshavarz, M. N. T. Kilic, K. Wang, Y. Li, A. C. Reid, W.-K. Liao, A. Choudhary, A. Agrawal, 《基于深度学习的晶体塑性有限元模型》, Scripta Materialia 254 (2025) 116315。[364] A. E. Hoerl, R. W. Kennard, 《岭回归：针对非正交问题的有偏估计》, Technometrics 12 (1) (1970) 55–67。[365] J. Zhou, G. Cui, S. Hu, Z. Zhang, C. Yang, Z. Liu, L. Wang, C. Li, M. Sun, 《图神经网络：方法与应用综述》, AI Open 1 (2020) 57–81。[366] F. Wu, A. Souza, T. Zhang, C. Fifty, T. Yu, K. Weinberger, 《简化图卷积网络》, 载于：国际机器学习会议，PMLR，2019，第6861–6871页。[367] P. Velickovic, G. Cucurull, A. Casanova, A. Romero, P. Lio, Y. Bengio 等, 《图注意力网络》, stat 1050 (20) (2017) 10–48550。[368] K. Zhou, T. Yang, Z. Fan, C. Wang, S. Luo, D. Fu, Z. Zhao, 《融合晶粒与微观结构图像特征及工艺参数的金属材料性能预测网络模型研究》, Journal of Materials Research and Technology (2025)。[369] M. Yacouti, M. Shakiba, 《结合卷积神经网络与图神经网络预测复合材料微观结构中的力学场》, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing 190 (2025) 108618。[370] A. Dosovitskiy, 《一幅图像胜过 16×16 个词：用于大规模图像识别的 Transformer》, arXiv 预印本 arXiv:2010.11929 (2020)。[371] P. Xu, X. Zhu, D. A. Clifton, 《基于 Transformer 的多模态学习：综述》, 《IEEE模式分析与机器智能汇刊》45 (10) (2023) 12113–12132。[372] Y. Shan, M. Zhen, H. D. Fill, 《结合多传感器图像融合与深度学习的结构力学应力应变预测模型研究》, Applied Sciences (2076-3417) 15 (7) (2025)。[373] S. Zhang, C. Shu, G. Xiang, J. Zhang, X. Tao, X. Zhu, Q. Gu, L. Hua, S. Xue, Z. Yao, 《基于 CA 模拟与多模态深度学习的 42CrMo 钢物理可解释流动行为预测》, Materials Science and Engineering: A (2025) 149468。[374] E. Pitz, K. Pochiraju, 《用于复合材料微观结构均匀化的神经网络 Transformer 模型》, Engineering Applications of Artificial Intelligence 134 (2024) 108622。

[375] B. Lim, S. Ö. Arık, N. Loeff, T. Pfister, 用于可解释多视野时间序列预测的时序融合变换器, 《国际预测杂志》 37 (4) (2021年) 1748–1764.[376] S. Khan, M. Naseer, M. Hayat, S. W. Zamir, F. S. Khan, M. Shah, 视觉中的Transformer：综述, ACM Computing Surveys (CSUR) 54 (10s) (2022年) 1–41.[377] N. Park, S. Kim, 视觉变换器如何工作？, arXiv预印本 arXiv:2202.06709 (2022年).[378] X. Wang, S. Zhang, D. Jiang, W. Yu, Y. Zheng, C. Luo, H. Wang, Z. Wang, 基于Transformer的多模态学习用于预测热处理不锈钢的力学性能, 《材料与设计》 (2025年) 114800.[379] Y. Zhou, S. J. Semnani, Vit-transformer：基于自注意力机制的非线性非均质材料本构建模, arXiv预印本 arXiv:2510.16575 (2025年).[380] S. Wang, T.-R. Liu, S. Sankaran, P. Perdikaris, Micrometer：用于预测非均质材料全场力学响应的微观力学变换器, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 448 (2026年) 118373.[381] S. E. Whitman, M. I. Latypov, 利用基础视觉变换器的微观结构表征学习材料的微观结构-性能关系, 《材料学报》 (2025年) 121217.[382] A. Radford, J. W. Kim, C. Hallacy, A. Ramesh, G. Goh, S. Agarwal, G. Sastry, A. Askell, P. Mishkin, J. Clark, 等, 从自然语言监督中学习可迁移视觉模型, 载于：国际机器学习会议, PmLR, 2021年, 第8748–8763页.[383]M. Oquab, T. Darcet, T. Moutakanni, H. Vo, M. Szafraniec, V. Khalidov, P. Fernandez, D. Haziza, F. Massa, A. El-Nouby, 等, DINOv2：无监督学习稳健的视觉特征, arXiv预印本 arXiv:2304.07193 (2023年).[384] A. Kirillov, E. Mintun, N. Ravi, H. Mao, C. Rolland, L. Gustafson, T. Xiao, S. Whitehead, A. C. Berg, W.-Y. Lo, 等, Segment Anything, 载于：IEEE/CVF国际计算机视觉会议论文集, 2023年, 第4015–4026页.[385] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang, 物理信息机器学习, 《自然综述：物理学》 3 (6) (2021年) 422–440.[386] S. Cai, Z. Mao, Z. Wang, M. Yin, G. E. Karniadakis, 面向流体力学的物理信息神经网络（PINN）：综述, 《力学学报（英文版）》 37 (12) (2021年) 1727–1738.[387] M. Innes, A. Edelman, K. Fischer, C. Rackauckas, E. Saba, V. B. Shah, W. Tebbutt, 弥合机器学习与科学计算的可微分编程系统, arXiv预印本 arXiv:1907.07587 (2019年).[388] S. A. Faroughi, N. M. Pawar, C. Fernandes, M. Raissi, S. Das, N. K. Kalantari, S. Kourosh Mahjour, 科学计算中的物理引导、物理信息与物理编码神经网络及算子：流体力学与固体力学, 工程计算与信息科学学报 24 (4) (2024年) 040802.[389] A. Norambuena, M. Mattheakis, F. J. González, R. Coto, 用于量子控制的物理信息神经网络, 《物理评论快报》 132 (1) (2024年) 010801.[390] J. Wang, X. Peng, Z. Chen, B. Zhou, Y. Zhou, N. Zhou, 基于强制施加边界条件的守恒型物理信息神经网络的中子扩散问题代理建模, 《核能年刊》 176 (2022年) 109234.[391] X. Li, F. Lin, H. Wang, X. Zhang, H. Ma, C. Wen, F. Blaabjerg, 采用物理嵌入架构循环神经网络的功率变换器时间建模, 《IEEE工业电子学汇刊》 71 (11) (2024年) 14111–14123.

[392] A. Michaloglou, I. Papadimitriou, I. Gialampoukidis, S. Vrochidis, I. Kompatsiaris, 材料建模与设计中的物理信息神经网络：综述, Archives of Computational Methods in Engineering (2025年) 1–38.[393] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis, 物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题与反问题的深度学习框架, 《计算物理学杂志》 378 (2019年) 686–707.[394] A. G. Baydin, B. A. Pearlmutter, A. A. Radul, J. M. Siskind, 机器学习中的自动微分：综述, Journal of Machine Learning Research 18 (153) (2018) 1–43.[395] M. Raissi, 深层隐藏物理模型：非线性偏微分方程的深度学习, Journal of Machine Learning Research 19 (25) (2018) 1–24.[396] C. Meng, S. Griesemer, D. Cao, S. Seo, Y. Liu, 当物理遇见机器学习：物理信息机器学习综述, Machine Learning for Computational Science and Engineering 1 (1) (2025年) 20.[397] K. Luo, J. Zhao, Y. Wang, J. Li, J. Wen, J. Liang, H. Soekmadji, S. Liao, 面向偏微分方程问题的物理信息神经网络：全面综述, Artificial Intelligence Review 58 (10) (2025年) 323.[398] A. Farea, O. Yli-Harja, F. Emmert-Streib, 理解物理信息神经网络：技术、应用、趋势与挑战, 人工智能 5 (3) (2024年) 1534–1557.[399] S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, F. Piccialli, 通过物理信息神经网络开展科学机器学习：我们身处何处以及下一步是什么, Journal of Scientific Computing 92 (3) (2022年) 88.[400] D. G. Zill, 高等工程数学, Jones & Bartlett Learning, 2020.[401] C. Wang, Y.-q. He, H.-m. Lu, J.-g. Nie, J.-s. Fan, 面向弹塑性本构关系的物理信息引导小样本深度学习, Engineering Applications of Artificial Intelligence 126 (2023年) 106907.[402] S. Keshavarz, Y. Mao, A. C. Reid, A. Agrawal, 推进材料模拟：物理信息神经网络与面向对象的晶体塑性有限元方法, 《国际塑性学杂志》 185 (2025年) 104221.[403] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis, 物理信息深度学习（第一部分）：非线性偏微分方程的数据驱动解, arXiv预印本 arXiv:1711.10561 (2017).[404] P. Zhang, 基于神经网络的弹塑性本构关系数值积分, 《计算机与岩土工程》 190 (2026 年) 107721.[405] R. Lourenco, P. Georgieva, A. Andrade-Campos, 采用虚拟场法进行间接训练的物理信息循环神经网络数据驱动弹塑性本构建模, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 440 (2025年) 117935.[406] M. Grédiac, 虚功原理与识别, Comptes rendus de l’Acadé mie des sciences. 第2辑，力学、物理、化学、宇宙科学、地球科学 309 (1) (1989) 1–5.[407] J. Martins, A. Andrade-Campos, S. Thuillier, 基于全场测量的本构力学模型反向识别策略比较, 《国际机械科学杂志》 145 (2018) 330–345.[408] M. Smith, Abaqus/standard用户手册，6.9版 (2009).[409] M. Liu, Q. Zhang, R. Fuentes, 边值问题中土体弹塑性行为建模的有限元物理信息神经网络方法, 《计算机与岩土工程》 190 (2026年) 107761.

[410] T. Hu、W. Zheng、H. Xie、T. He、M. Feng，基于物理信息神经网络的纯多晶铜单轴加载循环弹塑性本构模型，《国际疲劳杂志》195（2025年）108857。[411] S. Hildebrand、S. Klinge，4130钢合金循环塑性的物理信息神经网络建模，《结构完整性会议论文集》72（2025年）520–528。[412] G. Zhou、Y. Hu、Z. Cao、M. G. Lee、D. Li，用于面心立方材料晶体塑性建模的物理约束神经网络，Scripta Materialia 241（2024年）115861。[413] H. Weng、F. Bamer、C. Luo、B. Markert、H. Yuan，考虑变形机制的循环晶体塑性本构建模物理信息神经网络，《国际机械科学杂志》（2025年）110491。[414] M. Hamza、L. Borkowski、A. Chattopadhyay，用于陶瓷基复合材料时间相关行为的物理约束机器学习代理模型，《复合材料B辑：工程》（2025年）112825。[415] H. Yang、S. K. Sinha、Y. Feng、D. B. McCallen、B. Jeremi´c，弹塑性材料的能量耗散分析，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 331（2018）309–326。[416] L. Borkowski、C. Sorini、A. Chattopadhyay，带正则化以施加物理信息约束的基于循环神经网络的多轴塑性模型，《计算机与结构》258（2022年）106678。[417] R. Faria、J. Oliver、M. Cervera，用于大型混凝土结构的基于应变的塑性黏性损伤模型，International Journal of Solids and Structures 35（14）（1998）1533–1558。[418] X. He、J.-S. Chen，用于路径相关材料数据驱动建模的热力学一致机器学习内变量方法，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 402（2022年）115348。[419] M. Su、Y. Yu、T. Chen、N. Guo、Z. Yang，用于颗粒材料弹塑性本构建模的热力学信息神经网络，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 430（2024年）117246。[420] P. Zhang、K. Karapiperis、O. Weeger，t-pinet：用于发现地质材料本构关系的热力学信息分层学习，《固体力学与物理学杂志》197（2025年）106049。[421] J.-C. Wang、Z. Liu、X.-Y. Zhang、D.-S. Cui、X.-F. Li，用于非线性弹塑性材料本构关系建模的力学信息神经网络，《国际塑性学杂志》（2025年）104479。[422] A. M. Roy、S. Guha，用于求解冯·米塞斯塑性的数据驱动物理约束深度学习计算框架，Engineering Applications of Artificial Intelligence 122（2023年）106049。[423] N. Zhang、K. Xu、Z. Y. Yin、K.-Q. Li、Y.-F. Jin，用于弹性与弹塑性固体的有限元集成神经网络框架，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 433（2025年）117474。[424] H. Li、Y. Cheng、Z. Wang、X. Wang，梯度纳米结构316L不锈钢深度相关本构关系的物理信息神经网络，材料 18（15）（2025年）3532。[425] M. Zhou、G. Mei、N. Xu，通过耦合S-FEM与物理信息深度学习提高弹塑性问题代理建模的计算精度，Mathematics 11（9）（2023年）2016。[426] Z. Xiong、P. Zhao，用于非均质材料细观力学与微观结构演化的广义物理驱动神经网络，《欧洲力学杂志A辑：固体》111（2025年）105551。[427] X.-X. Chen、P. Zhang、Z.-Y. Yin，弹性与弹塑性基础正向与反向分析中物理信息学习的综合研究，《计算机与岩土工程》181（2025年）107110。

[428] J. He、D. Abueidda、R. A. Al-Rub、S. Koric、I. Jasiuk，经典弹塑性的深度学习能量基方法，《国际塑性学杂志》162（2023年）103531。[429] S. Niu、E. Zhang、Y. Bazilevs、V. Srivastava，使用物理信息神经网络建模有限应变塑性并评估网络性能，《固体力学与物理学杂志》172（2023年）105177。[430] I. Jeong、M. Cho、H. Chung、D.-N. Kim，基于具有全场数据的物理信息神经网络的材料行为数据驱动的非参数识别，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 418（2024年）116569。[431] A. M. Roy、S. Guha、V. Sundararaghavan、R. Arróyave，用于求解非关联Drucker–Prager弹塑性本构模型的物理融合深度神经网络，《固体力学与物理学杂志》185（2024年）105570。[432] B. van der Heijden、X. Li、G. Lubineau、E. Florentin，将物理约束施加于物理信息神经网络以实现更准确的非均匀材料识别，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 441（2025年）117993。[433] S. Rezaei、A. Moeineddin、A. Harandi，使用物理信息神经网络学习基于热力学的非线性材料本构模型的解，《计算力学》74（2）（2024年）333–366。[434] E. Haghighat、S. Abouali、R. Vaziri，利用物理信息深度学习进行本构模型表征与发现，Engineering Applications of Artificial Intelligence 120（2023年）105828。[435] A. Eghtesad、J. Tan、J. N. Fuhg、N. Bouklas，Nn-evp：基于物理信息神经网络的弹黏塑性框架，用于考虑晶粒尺寸的流动响应预测，《国际塑性学杂志》181（2024年）104072。[436] L. Lu、P. Jin、G. Pang、Z. Zhang、G. E. Karniadakis，基于算子普适逼近定理通过DeepONet学习非线性算子，Nature Machine Intelligence 3（3）（2021年）218–229。[437] M. Cranmer、S. Greydanus、S. Hoyer、P. Battaglia、D. Spergel、S. Ho，拉格朗日神经网络，arXiv预印本 arXiv:2003.04630（2020）。[438] A. Rangarajan、S. Gold、E. Mjolsness，一种具有应用的新型优化网络架构，Neural Computation 8（5）（1996）1041–1060。[439] J. Wang，用于凸规划的确定性退火神经网络，神经网络 7（4）（1994）629–641。[440] B. Amos、L. Xu、J. Z. Kolter，输入凸神经网络，载于：国际机器学习会议，PMLR，2017，第146–155页。[441] J. Chen、Y. Liu，利用概率物理引导学习预测增材制造Ti-6Al-4V的疲劳性能，增材制造 39（2021年）101876。[442] J. Chen、Y. Liu，用于疲劳数据分析的概率物理引导机器学习，《Expert Systems with Applications》168（2021年）114316。[443] H. Gao、L. Sun、J.-X. Wang，PhyGeoNet：用于在不规则域上求解参数化稳态偏微分方程的物理信息几何自适应卷积神经网络，计算物理学杂志 428（2021年）110079。[444] R. T. Chen、Y. Rubanova、J. Bettencourt、D. K. Duvenaud，神经常微分方程，《神经信息处理系统进展》31（2018）。

[445] K. Xu、D. Z. Huang、E. Darve，使用对称正定神经网络学习本构关系，计算物理学杂志 428（2021年）110072。[446] G. Strang，《线性代数导论》，SIAM，2022年。[447] X. Liu、J. He、S. Huang，用于发现金属各向异性路径相关塑性的机制信息引导人工神经网络模型，《材料与设计》226（2023年）111697。[448] Z. Wang、R. Cudmani、A. A. P. Olarte，用于建模土壤本构行为的基于张量的物理编码神经网络，《计算机与岩土工程》170（2024年）106173。[449] J. Wang、G. Ma、T. Qu、S. Guan、W. Zhou、X. Chang，Gpm-penn：一种基于广义塑性模型、采用物理编码神经网络的数据驱动本构建模框架，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 436（2025年）117694。[450] M. Maia、I. B. Rocha、P. Kerfriden、F. P. van der Meer，面向路径相关非均质材料的物理递归神经网络：将本构模型嵌入数据驱动代理模型，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 407（2023年）115934。[451] A. A. Jadoon、K. A. Meyer、J. N. Fuhg，基于单轴实验的有限应变弹塑性自动模型发现，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 435（2025年）117653。[452] V. Taç、K. Linka、F. Sahli-Costabal、E. Kuhl、A. B. Tepole，数据驱动超弹性物理信息框架的基准测试，《计算力学》73（1）（2024年）49–65。[453] P. Chen、J. Guilleminot，用于超弹性本构模型的多凸神经网络：一种校正方法，《力学研究通讯》125（2022年）103993。[454] V. Lubarda，论非线性热弹性中稳定平衡的吉布斯条件、凸性及热力学势的二阶变分，International Journal of Solids and Structures 45（1）（2008）48–63。[455] J. N. Fuhg、C. M. Hamel、K. Johnson、R. Jones、N. Bouklas，模块化机器学习弹塑性：有限数据上下文中的泛化，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 407（2023年）115930。[456] H. Holthusen、E. Kuhl，有限应变下各向异性非弹性神经网络的补充，arXiv预印本 arXiv:2510.04187（2025年）。[457] M. Eghbalian、M. Pouragha、R. Wan，用于经典弹塑性代理建模的物理信息深度神经网络，《计算机与岩土工程》159（2023年）105472。[458] M. Pastor、O. Zienkiewicz、A. Chan，广义塑性与土体行为建模，International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 14（3）（1990年）151–190。[459] F. Masi、I. Stefanou、P. Vannucci、V. Maffi-Berthier，用于本构建模的基于热力学的人工神经网络，《固体力学与物理学杂志》147（2021年）104277。[460] F. Masi、I. Stefanou，采用基于热力学的人工神经网络（TANN）对非弹性材料进行多尺度建模，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 398（2022年）115190。[461] F. Masi、I. Stefanou，演化型热力学人工神经网络以及固体力学中内变量与演化方程的识别，《固体力学与物理学杂志》174（2023年）105245。[462] L. Lu、P. Jin、G. E. Karniadakis，DeepONet：基于算子普适逼近定理学习非线性算子以识别微分方程，arXiv预印本 arXiv:1910.03193（2019年）。

[463] K. Bhattacharya、B. Hosseini、N. B. Kovachki、A. M. Stuart，面向参数化偏微分方程的模型降阶与神经网络，SMAI计算数学期刊 7（2021年）121–157。[464] S. Goswami、A. Bora、Y. Yu、G. E. Karniadakis，物理信息深度神经算子网络，载于：建模与仿真中的机器学习：方法与应用，施普林格，2023年，第219–254页。[465] Z. Li、H. Zheng、N. Kovachki、D. Jin、H. Chen、B. Liu、K. Azizzadenesheli、A. Anandkumar，用于学习偏微分方程的物理信息神经算子，ACM/IMS数据科学期刊 1 （ 3 ）（ 2024 年） 1–27。[466] Z. Li 、 N. Kovachki 、 K. Azizzadenesheli 、 B. Liu 、 K. Bhattacharya、A. Stuart、A. Anandkumar，用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子，arXiv预印本 arXiv:2010.08895（2020）。[467] Z. Li、N. Kovachki、K. Azizzadenesheli、B. Liu、K. Bhattacharya、A. Stuart、A. Anandkumar，神经算子：用于偏微分方程的图核网络，arXiv预印本 arXiv:2003.03485（2020）。[468] A. Anandkumar、K. Azizzadenesheli、K. Bhattacharya、N. Kovachki、Z. Li、B. Liu、A. Stuart，神经算子：用于偏微分方程的图核网络，载于：ICLR 2020深度神经模型与微分方程融合研讨会，2020。[469] V. Oommen、K. Shukla、S. Goswami、R. Dingreville、G. E. Karniadakis，利用神经算子与自编码器架构学习双相微观结构演化，npj Computational Materials 8（1）（2022年）190。[470] T. Chen、H. Chen，具有任意激活函数的神经网络对非线性算子的万能逼近及其在动力系统中的应用，IEEE神经网络汇刊 6（4）（1995年）911–917。[471] S. Koric、A. Viswantah、D. W. Abueidda、N. A. Sobh、K. Khan，面向可变载荷与材料属性下塑性变形的深度学习算子网络，计算机辅助工程 40（2）（2024年）917–929。[472] J. He、D. Pal、A. Najafi、D. Abueidda、S. Koric、I. Jasiuk，材料响应信息引导的DeepONet及其在晶体塑性中多晶应力–应变预测中的应用，JOM 76（10）（2024年）5744–5754。[473] D. Jeyaraj、H. Eivazi、J.-A. Tröger、S. Wittek、S. Hartmann、A. Rausch，一种基于神经算子的混合微观尺度模型，用于率相关材料的多尺度模拟，arXiv预印本 arXiv:2506.16918（2025年）。[474] Z. Li、D. Z. Huang、B. Liu、A. Anandkumar，面向一般几何形状上偏微分方程的带学习到的变形的傅里叶神经算子，Journal of Machine Learning Research 24（388）（2023年）1–26。[475] V. Duruisseaux、J. Kossaifi、A. Anandkumar，傅里叶神经算子详解：实践视角，arXiv预印本 arXiv:2512.01421（2025年）。[476] K. Azizzadenesheli、N. Kovachki、Z. Li、M. Liu-Schiaffini、J. Kossaifi、A. Anandkumar，用于加速科学仿真与设计的神经算子，《自然综述：物理学》6（5）（2024年）320–328。[477] C. Kaewnuratchadasorn、J. Wang、C.-W. Kim，面向固体力学的物理信息神经算子求解器与超分辨率，计算机辅助土木与基础设施工程 39（22）（2024年）3435–3451。[478] M. M. Rashid、S. Chakraborty、N. A. Krishnan，揭示神经算子对数字复合材料应变演化的预测能力，《固体力学与物理学杂志》181（2023年）105444。[479] M. S. Khorrami、P. K. Goyal、J. R. Mianroodi、B. Svendsen、P. Benner、D. Raabe，用于多晶材料应力场建模的无散神经算子，arXiv预印本 arXiv:2408.15408（2024年）。[480] M. S. Khorrami、P. Goyal、J. R. Mianroodi、B. Svendsen、P. Benner、D. Raabe，一种用于固体中无散应力场代理建模的物理编码傅里叶神经算子方法，arXiv预印本 arXiv:2408.15408（2024年）。[481] H. You、Q. Zhang、C. J. Ross、C.-H. Lee、Y. Yu，学习深度隐式傅里叶神经算子（IFNOs）及其在非均质材料建模中的应用，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 398（2022年）115296。

[482] F. Masi, I. Einav，使用小规模数据进行本构方程的神经积分，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 420 (2024年) 116698。[483] V. Oommen, K. Shukla, S. Desai, R. Dingreville, G. E. Karniadakis，重新思考材料模拟：将直接数值模拟与神经算子相结合，npj Computational Materials 10 (1) (2024年) 145。[484] B. Guo, Z. Lin, Q. He，历史感知神经算子：对路径依赖材料进行稳健的数据驱动本构建模，arXiv 预印本 arXiv:2506.10352 (2025年)。[485] Y. Hollenweger, D. M. Kochman, B. Liu，温度感知循环神经算子：用于六方最密堆积材料温度相关各向异性塑性的建模，arXiv 预印本 arXiv:2508.18806 (2025年)。[486] H. Eivazi, J.-A. Tröger, S. Wittek, S. Hartmann, A. Rausch，EquiNO：用于多尺度模拟的物理信息神经算子，arXiv 预印本 arXiv:2504.07976 (2025年)。[487] A. Henkes, H. Wessels, R. Mahnken，用于连续体微观力学的物理信息神经网络，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 393 (2022年) 114790。[488] L. Lu, X. Meng, S. Cai, Z. Mao, S. Goswami, Z. Zhang, G. E. Karniadakis，基于公平数据对两种神经算子进行全面、公平的比较（并提供实用扩展），Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 393 (2022年) 114778。[489] A. Harandi, H. Danesh, K. Linka, S. Reese, S. Rezaei, SPiFOL：一种基于谱的物理信息有限算子学习方法，用于预测微观结构的力学行为，Journal of the Mechanics and Physics o

f

《固体》（2025年）106219。[490] S. Rezaei、K. Taghikhani、A. Viardin、R. N. Asl、A. Harandi、N. V. Jagtap、D. Bailly、H. Naber、A. Gramlich、T. Brepols 等，通过物理信息引导的算子学习，将金属材料从图像分割数字化为多尺度解，npj Computational Materials 11（1）（2025年）262。[491] D. H. Wolpert、W. G. Macready，优化领域的无免费午餐定理，《IEEE进化计算汇刊》1（1）（2002年）67–82。[492] V. Dwivedi、N. Parashar、B. Srinivasan，用于求解偏微分方程正问题和逆问题的分布式学习机器，《神经计算》420（2021年）299–316。[493] F. F. de la Mata、A. Gijón、M. Molina-Solana、J. Gómez-Romero，面向数据驱动模拟的物理信息神经网络：优势、局限性与机遇，《物理A：统计力学及其应用》610（2023年）128415。[494] Y. Weng、D. Zhou，用于刚性化学动力学的多尺度物理信息神经网络，《物理化学杂志A》126（45）（2022年）8534–8543。[495] K. Tang、X. Wan、C. Yang，Das-pinns：一种用于求解高维偏微分方程的深度自适应采样方法，计算物理学杂志476（2023年）111868。[496] P. Sharma、L. Evans、M. Tindall、P. Nithiarasu，刚性偏微分方程与物理信息神经网络，《档案 o

f

Computational Methods in Engineering 30 (5)(2023)2929。[497] A. Krishnapriyan、A. Gholami、S. Zhe、R. Kirby、M. W. Mahoney，《表征物理信息神经网络中的潜在失效模式》，《神经信息处理系统进展》34（2021）26548–26560。[498] S. Wang、X. Yu、P. Perdikaris，《PINN 何时以及为何训练失败：神经切线核视角》，《计算物理学杂志》449（2022）110768。[499] O. Fuks、H. A. Tchelepi，《物理信息机器学习在多孔介质非线性两相输运中的局限性》，Journal of Machine Learning forModeling and Computing 1（1）（2020）。

[500] A. A. Howard、M. Perego、G. E. Karniadakis、P. Stinis, 《面向数据驱动和物理信息问题的多保真深度算子网络》, 《计算物理学杂志》493（2023）112462。[501] Y. Yang、G. Kissas、P. Perdikaris, 《利用随机化先验实现深度算子网络的可扩展不确定性量化》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 399（2022）115399。[502] P. Honarmandi、R. Arróyave, 《计算材料科学与仿真辅助材料设计中的不确定性量化与传播》, 材料与制造创新集成 9（1）（2020）103–143。[503] R. Arróyave、D. L. McDowell, 《材料设计的系统方法：过去、现在与未来》, Annual Review of Materials Research 49（1）（2019年）103–126。[504] H.-J. Choi、D. L. Mcdowell、J. K. Allen、F. Mistree, 《不确定性下层级系统设计的归纳式设计探索方法》, 《工程优化》40（4）（2008）287–307。[505] A. Chernatynskiy、S. R. Phillpot、R. LeSar, 《材料多尺度模拟中的不确定性量化：展望》, Annual Review of Materials Research 43（1）（2013）157–182。[506] J. H. Panchal、S. R. Kalidindi、D. L. McDowell, 《集成计算材料工程中的关键计算建模问题》, 计算机辅助设计 45（1）（2013）4–25。[507] R. C. Smith, 《不确定性量化：理论、实现与应用》, SIAM, 2024。[508] M. Abdar、F. Pourpanah、S. Hussain、D. Rezazadegan、L. Liu、M. Ghavamzadeh、P. Fieguth、X. Cao、A. Khos-ravi、U. R. Acharya 等, 《深度学习中的不确定性量化综述：技术、应用与挑战》, 信息融合 76（2021）243–297。[509] G. E. Box、G. C. Tiao, 《统计分析中的贝叶斯推断》, 约翰·威立父子公司, 2011。[510] F. Rizzi、R. Jones、J. Templeton、J. Ostien、B. Boyce, 《基于不确定性量化技术的材料变异性塑性模型》, arXiv 预印本 arXiv:1802.01487（2017）。[511] P. Honarmandi、A. Solomou、R. Arroyave、D. Lagoudas, 《镍钛形状记忆合金热诱导相变唯象本构模型参数及预测的不确定性量化》, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 27（3）（2019年）034001。[512] P. Honarmandi、R. Arroyave, 《利用贝叶斯框架校准描述相变诱发塑性钢应变–应力行为的基于物理的模型》, Computational Materials Science 129（2017）66–81。[513] R. Bandyopadhyay、V. Prithivirajan、M. D. Sangid, 《晶体塑性仿真力学响应的不确定性量化》, JOM 71（8）（2019年）2612–2624。[514] N. H. Paulson、E. Jennings、M. Stan, 《材料热力学性质不确定性量化的贝叶斯策略》, International Journal of Engineering Science 142（2019）74–93。[515] S. Kotha、D. Ozturk、B. Smarslok、S. Ghosh, 《微结构集成结构模拟中不确定性量化的参数化均匀化本构模型》, 材料与制造创新集成 9（4）（2020）322–338。[516] D. Ozturk、S. Kotha、S. Ghosh, 《多晶钛合金参数化均匀化本构模型（PHCMs）的多尺度不确定性量化框架》, 《固体力学与物理学杂志》148（2021年）104294。[517] A. Chakraborty、M. C. Messner, 《用于估计弹性–黏塑性材料模型统计参数分布的贝叶斯分析》, 《概率工程力学》66（2021）103153。

[518] A. Venkatraman, D. L. McDowell, S. R. Kalidindi, 《层片晶粒钛合金两种不同晶体塑性模型的参数不确定性与模型形式概率的贝叶斯分析》, 《国际塑性学杂志》154（2022）103289。[519] J. Tan, U. Villa, N. Shamsaei, S. Shao, H. M. Zbib, D. Faghihi, 《一种具有量化不确定性的塑性预测性离散-连续多尺度模型》, 《国际塑性学杂志》138（2021）102935。[520] J.-A. Tröger, U. Römer, S. Hartmann, 《比较两步本构模型校准中的频率学派与贝叶斯不确定性量化》, PAMM 24（2）（2024）e202400031。[521] S. M. Lynch, 《应用贝叶斯统计与社会科学家估计导论》, 第1卷, 施普林格, 2007。[522] D. Foreman-Mackey, D. W. Hogg, D. Lang, J. Goodman, 《emcee：MCMC锤子采样器》, 《太平洋天文学会刊》125（925）（2013）306。[523] S.-K. Au, 《连接系统辨识中参数不确定性的贝叶斯与频率学派量化方法》, 《机械系统与信号处理》29（2012）328–342。[524] E. Schulz, M. Speekenbrink, A. Krause, 《高斯过程回归教程：函数的建模、探索与利用》, 《数学心理学杂志》85（2018）1–16。[525] C. Williams, C. Rasmussen, 《用于回归的高斯过程》, 《神经信息处理系统进展》8（1995）。[526] Z.-H. Han, K.-S. Zhang等, 《基于代理模型的优化》, 《遗传算法的现实应用》343（2012）343–362。[527] C. Huang, A. El Hami, B. Radi, 《用于参数识别的基于元模型的逆方法：弹塑性损伤模型》, 《工程优化》49（4）（2017）633–653。[528] H. Rappel, L. A. Beex, L. Noels, S. Bordas, 《考虑输出误差、输入误差和模型不确定性的贝叶斯定理弹塑性参数识别》, 《概率工程力学》55（2019）28–41。[529] T. Long, L. Wang, C.-D. Kan, J. D. Lee, 《一种塑性应变硬化建模新方法及其通过贝叶斯优化识别材料参数在汽车结构钢中的应用》, AppliedMath 5（3）（2025）104。[530] M. Jiang, X. Hu, C. Xing, Z. Yang, Y. Chen, J. Li, Z. Wang, J. Wang, 《利用主动学习快速优化高保真晶体塑性模拟的参数》, 《材料信息学杂志》4（4）（2024）N–A。[531] A. E. Tallman, L. P. Swiler, Y. Wang, D. L. McDowell, 《晶体塑性降阶模型中的不确定性传播》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 365（2020）113009。[532] A. Kushwaha, E. Demir, A. Basak, 《循环加载下激光粉末床熔融制备哈氏合金X的晶体塑性参数识别高维贝叶斯推断》, 《材料力学》（2025）105500。[533] R. C. Coelho, A. F. C. Alves, F. A. Pires, 《通过基于优化的技术高效识别本构参数：比较分析与新型复合贝叶斯优化策略》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 427（2024）117039。[534] H. Dorward, D. M. Knowles, E. Demir, M. Mostafavi, M. J. Peel, 《晶体塑性有限元模型的校准与基于代理模型的敏感性分析》, 《材料与设计》247（2024）113409。[535] J. A. Nelder, R. Mead, 《一种用于函数最小化的单纯形法》, 《计算机杂志》7（4）（1965）308–313。

[536] R. Storn, K. Price, 《差分进化——一种用于连续空间全局优化的简单高效启发式算法》, 《全局优化杂志》11（4）（1997）341–359。[537] I. M. Sobol, 《非线性数学模型的全局敏感性指标及其蒙特卡洛估计》, Mathematics and computers in simulation 55（1-3）（2001）271–280。[538] A. E. Marques, T. G. Parreira, A. F. Pereira, B. M. Ribeiro, P. A. Prates, 《机器学习在金属板材本构模型参数识别中的应用》, Machine Learning for Computational Science and Engineering 1（1）（2025）10。[539] T. G. Parreira, A. E. Marques, N. A. Sakharova, P. A. Prates, A. F. Pereira, 《通过对十字形试样双轴拉伸试验进行元建模识别金属板材本构参数》, Metals 14（2）（2024）212。[540] P. Opˇela, J. Walek, J. Kopeˇcek, 《机器学习技术在预测金属材料热变形行为中的应用》, CMES-Computer Modeling in Engineering & Sciences 142（1）（2025）。[541] R. Barbagallo, G. Lo Sciuto, G. Mirone, 《不同应变率和温度下奥氏体不锈钢本构建模的高斯过程回归》, Journal of Dynamic Behavior of Materials（2025）1–12。[542]A. Ruybalid, A. Tallman, W. Wen, C. Matthews, L. Capolungo, 《采用微观结构敏感性数据驱动代理模型描述91级钢的粘塑性蠕变》, Integrating Materials and Manufacturing Innovation 13（4）（2024）895–914。[543] A. Venkatraman, C. E. Johnson, D. L. McDowell, S. R. Kalidindi, 《用于运动硬化模型形式高通量识别的贝叶斯协议》, 《国际机械科学杂志》285（2025）109791。[544] K. Kersting, C. Plagemann, P. Pfaff, W. Burgard, 《最可能异方差高斯过程回归》, 载于：第24届国际机器学习会议论文集，2007，第393–400页。[545] Q. V. Le, A. J. Smola, S. Canu, 《异方差高斯过程回归》, 载于：第22届国际机器学习会议论文集，2005，第489–496页。[546] M. Titsias, 《稀疏高斯过程中诱导变量的变分学习》, 载于：人工智能与统计学，PMLR，2009，第567–574页。[547] B. Chen, L. Shen, H. Zhang, 《基于异方差稀疏高斯过程回归的塑性结构分析随机材料模型》, 《科学报告》12（1）（2022）3017。[548] C. Ding, Y. Chen, H. Rappel, T. Dodwell, 《基于函数降阶高斯过程的概率本构建模机器学习仿真器》, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing 173（2023）107695。[549] R. Saunders, C. Butler, J. Michopoulos, D. Lagoudas, A. Elwany, A. Bagchi, 《利用函数高斯过程代理模型预测增材制造微观结构的力学行为》, npj Computational Materials 7（1）（2021）81。[550] J. S. Morris, 《函数回归》, Annual Review of Statistics and Its Application 2（1）（2015）321–359。[551] B. Wang, A. Xu, 《采用混合预测变量的非参数函数回归高斯过程方法》, Computational Statistics & Data Analysis 131（2019）80–90。[552] S. Hashemi, S. R. Kalidindi, 《用于描述任意拉伸张量作用下多晶微观结构演化的高斯过程自回归模型》, 《国际塑性学杂志》162（2023）103532。

[553] O.Ozbayram, A.Olivier, L.Graham-Brady, 《用于材料结构–性能关系建模的异方差高斯过程回归》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 431 (2024) 117326.[554] S. Deshpande, H. Rappel, M. Hobbs, S. P. Bordas, J. Lengiewicz, 《用于固体非线性力学概率代理建模的高斯过程回归与深度神经网络自编码器》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 437 (2025) 117790.[555] A. Tran, K. Maupin, T. Rodgers, 《面向物理约束机器学习的单调高斯过程及其在材料科学中的应用》, Journal of Computing and Information Science in Engineering 23 (1) (2023) 011011.[556] J. K. Joy, P. S. Chaugule, J.-B. le Graverend, D. C. Lagoudas, 《晶体塑性信息高斯过程回归模型：捕捉单晶形状记忆合金中的各向异性》, Computational Materials Science 240 (2024) 112990.[557] P. Fernandez-Zelaia, S. N. Melkote, 《利用取向成像显微术和数据驱动技术对剧烈塑性变形工艺进行工艺-结构-性能建模》, Integrating Materials and Manufacturing Innovation 8 (1) (2019) 17–36.[558] D. Khatamsaz, A. Molkeri, R. Couperthwaite, J. James, R. Arróyave, D. Allaire, A. Srivastava, 《通过多信息源融合，高效利用工艺-结构-性能关系进行材料设计》, 《材料学报》206 (2021) 116619.[559] J. Requeima, W. Tebbutt, W. Bruinsma, R. E. Turner, 《高斯过程自回归回归模型（GPAR）》, 载于：第22届国际人工智能与统计会议，PMLR，2019，第1860–1869页。[560] L. V. Jospin, H. Laga, F. Boussaid, W. Buntine, M. Bennamoun, 《贝叶斯神经网络实践指南——面向深度学习用户的教程》, IEEE计算智能杂志17 (2) (2022) 29–48.[561] R. M. Neal, 《神经网络的贝叶斯学习》, 第118卷，施普林格科学与商业媒体，2012.[562] C. Blundell, J. Cornebise, K. Kavukcuoglu, D. Wierstra, 《神经网络中的权重不确定性》, 载于：国际机器学习会议，PMLR，2015，第1613–1622页。[563] A. Olivier, M. D. Shields, L. Graham-Brady, 《用于数据驱动材料建模不确定性量化的贝叶斯神经网络》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 386 (2021) 114079.[564] A. Graves, 《神经网络的实用变分推断》, 《神经信息处理系统进展》24 (2011).[565] L. Li, J. Chang, A. Vakanski, Y. Wang, T. Yao, M. Xian, 《利用贝叶斯神经网络对材料性能预测中的多变量回归进行不确定性量化》, 《科学报告》14 (1) (2024) 10543.[566] D. M. de Oca Zapiain, H. Lim, T. Park, F. Pourboghrat, 《利用晶体塑性和贝叶斯神经网络代理模型预测塑性各向异性》, Materials Science and Engineering: A 833 (2022) 142472.[567] H. Lim, H. J. Bong, S. R. Chen, T. M. Rodgers, C. C. Battaile, J. M. D. Lane, 《利用晶体塑性有限元模拟开发多晶钽各向异性屈服模型》, Materials Science and Engineering: A 730 (2018) 50–56.[568] H.-J. Bunge, 《材料科学中的织构分析：数学方法》, 爱思唯尔，2013.[569] R. Kamijyo, A. Ishii, S. Coppieters, A. Yamanaka, 《基于深度神经网络的数值材料测试进行贝叶斯织构优化》, 《国际机械科学杂志》223 (2022) 107285.[570] S. Deshpande, J. Lengiewicz, S. P. Bordas, 《用于实时大变形仿真的概率深度学习》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 398 (2022) 115307.

[571] J. Yi, B. P. Ferreira, M. A. Bessa, 《单到多保真度历史依赖学习及其不确定性量化与解耦：在数据驱动本构建模中的应用》, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 448 (2026) 118479.[572] J. Yi, M. A. Bessa, 《协同贝叶斯与方差网络解耦偶然不确定性和认知不确定性》, arXiv预印本 arXiv:2505.02743 (2025).[573] T. Noor, S. N. Lone, G. Ramana, R. Nayek, 《用于单调加载下砂土本构建模的递归贝叶斯神经网络》, arXiv预印本 arXiv:2501.10088 (2025).[574] R. Du, H. Song, F. Gao, Y. Mo, Z. Yan, Z. Zhuang, X. Liu, Y. Wei, 《机器学习驱动的黏塑性模型：316H不锈钢在550°C下的循环松弛》, 《国际塑性学杂志》170 (2023) 103743.[575] A. Dorbane, F. Harrou, D.-C. Anghel, Y. Sun, 《利用机器学习预测变温条件下铝合金的应力–应变曲线并进行失效分析》, 《失效分析与预防杂志》24 (1) (2024) 229–244.[576] A. Molkeri, D. Khatamsaz, R. Couperthwaite, J. James, R. Arróyave, D. Allaire, A. Srivastava, 《微观结构信息在材料设计中的重要性：PSP与PP》, 《材料学报》223 (2022) 117471.[577] M. Wang, G. Zhang, B. Hou, W. Wang, 《将深度学习与贝叶斯推断相结合，通过纳米压痕实验测量SS400钢焊缝的弹塑性性质》, 《测量》242 (2025) 116092.[578] M. A. Mahmood, A. U. Rehman, B. Karaka¸s, A. Sever, R. U. Rehman, M. U. Salamci, M. Khraisheh, 《利用机器学习评估增材制造的可打印性：钴铬合金的混合智能高斯过程代理模型神经网络》, 《生物医学材料力学行为杂志》135 (2022) 105428.[579] S. Bond-Taylor, A. Leach, Y. Long, C. G. Willcocks, 《深度生成建模：对变分自编码器、生成对抗网络、归一化流、基于能量的模型和自回归模型的比较综述》, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence 44 (11) (2021) 7327–7347.[580] S. S. Sengar, A. B. Hasan, S. Kumar, F. Carroll, 《生成式人工智能：系统综述与应用》, Multimedia Tools and Applications 84 (21) (2025) 23661–23700.[581] P.-P. De Breuck, H.-C. Wang, G.-M. Rignanese, S. Botti, M. A. Marques, 《用于晶体结构的生成式人工智能：综述》, npj Computational Materials (2025).[582] S. Bengesi, H. El-Sayed, M. K. Sarker, Y. Houkpati, J. Irungu, T. Oladunni, 《生成式人工智能的进展：对生成对抗网络、GPT、自编码器、扩散模型和Transformer的全面综述》, 《IEEE Access》12 (2024) 69812–69837.[583] T. Long, Y. Zhang, H. Zhang, 《用于材料逆向设计的生成式深度学习》, arXiv预印本 arXiv:2409.19124 (2024).[584] Y. Liu, Z. Yang, Z. Yu, Z. Liu, D. Liu, H. Lin, M. Li, S. Ma, M. Avdeev, S. Shi, 《生成式人工智能及其在材料科学中的应用：现状与未来展望》, 《材料学报》9 (4) (2023) 798–816.[585] A. D. Handoko, R. I. Made, 《用于材料发现的人工智能与生成模型——综述》, arXiv预印本 arXiv:2508.03278 (2025).[586] B. Madika, A. Saha, C. Kang, B. Buyantogtokh, J. Agar, C. M. Wolverton, P. Voorhees, P. Littlewood, S. Kalinin, S. Hong, 《用于材料发现、开发和优化的人工智能》, 《ACS纳米》19 (30) (2025) 27116–27158.

[587] J. Noh、G. H. Gu、S. Kim、Y. Jung，机器学习赋能的无机固体材料逆向设计：前景与挑战，Chemical Science 11 (19) (2020) 4871–4881.[588] I. Takahara、T. Mizoguchi、B. Liu，利用生成式人工智能智能体加速无机材料设计，arXiv预印本 arXiv:2504.00741 (2025年).[589] H. Metni、L. Ruple、L. N. Walters、L. Torresi、J. Teufel、H. Schopmans、J. Östreicher、Y. Zhang、M. Neubert、Y. Koide等，晶体材料的生成模型，arXiv预印本 arXiv:2511.22652 (2025年).[590] I. J. Goodfellow、J. Pouget-Abadie、M. Mirza、B. Xu、D. Warde-Farley、S. Ozair、A. Courville、Y. Bengio，生成对抗网络，《神经信息处理系统进展》27 (2014).[591] D. Saxena、J. Cao，生成对抗网络（GANs）的挑战、解决方案与未来方向，ACM Computing Surveys (CSUR) 54 (3) (2021年) 1–42.[592] Z. Ahmad、Z. u. A. Jaffri、M. Chen、S. Bao，理解生成对抗网络：基础、变体、训练挑战、应用与开放问题，Multimedia Tools and Applications 84 (12) (2025年) 10347–10423.[593] L. Mescheder、A. Geiger、S. Nowozin，哪些生成对抗网络训练方法真正收敛？，载于：国际机器学习会议，PMLR，2018，第3481–3490页。[594] L. Mescheder、S. Nowozin、A. Geiger，生成对抗网络的数值分析，《神经信息处理系统进展》30 (2017).[595] M. Arjovsky、S. Chintala、L. Bottou，Wasserstein生成对抗网络，载于：国际机器学习会议，PMLR，2017，第214–223页。[596] M. Mirza、S. Osindero，条件生成对抗网络，arXiv预印本 arXiv:1411.1784 (2014).[597] A. Radford、L. Metz、S. Chintala，基于深度卷积生成对抗网络的无监督表征学习，arXiv预印本 arXiv:1511.06434 (2015).[598] X. Chen、Y. Duan、R. Houthooft、J. Schulman、I. Sutskever、P. Abbeel，InfoGAN：通过信息最大化生成对抗网络实现可解释表征学习，《神经信息处理系统进展》29 (2016).[599] R. Gulakala、V. Bhaskaran、M. Stoffel，用于计算有限元模拟中场变量的生成式学习与基于图的框架，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 428 (2024年) 117111.[600] S. Kench、S. J. Cooper，利用基于生成对抗网络的维度扩展从二维切片生成三维结构，Nature Machine Intelligence 3 (4) (2021年) 299–305.[601] I. Y. Moon、J. Yu、H. W. Jeong、H. W. Lee、S.-J. Kim、Y.-S. Oh、J. Jung、S. Oh、S.-H. Kang，利用有限元法辅助的生成模型，基于A230合金变形历史预测微观结构演化，Materials Science and Engineering: A 854 (2022年) 143852.[602] E. L. Buehler、M. J. Buehler，使用循环一致对抗网络与Transformer神经网络对多材料应力场和断裂模式进行端到端预测，Biomedical Engineering Advances 4 (2022年) 100038.[603] Y. Fukatsu、T.-T. Chen、T. Ogawa、F. Sun、Y. Adachi、Y. Tanaka、S. Ishikawa，结合生成对抗网络与有限元法分析双相钢的强度—延性平衡，Computational Materials Science 243 (2024年) 113143.[604] S.-W. Hong、S.-Y. Kim、K. Park、K. Terada、H. Lee、T.-S. Han，使用生成对抗网络重构的三维多相水泥浆体微观结构力学性能评估，Cement and Concrete Composites 152 (2024年) 105646.

[605] R. K. Bollineni、M. Ahmadian、M. Tonks、R. Mirzaeifar，面向期望力学性能的珠光体钢片层微观结构材料设计，Materials Today Communications 41 (2024年) 110691.[606] H. Jiang、Z. Nie、R. Yeo、A. B. Farimani、L. B. Kara，Stressgan：用于二维应力分布预测的生成式深度学习模型，Journal of Applied Mechanics 88 (5) (2021年) 051005.[607] Z. Yang、C.-H. Yu、K. Guo、M. J. Buehler，预测复杂分层复合材料微观结构完整应变与应力张量的端到端深度学习方法，《固体力学与物理学杂志》154 (2021年) 104506.[608] Y. Liu、Q. Lin、W. Pan、W. Yu、Y. Ren、Y. Zhao，SR-M-GAN：用于复合材料螺栓连接高保真应力场预测的生成模型，Advanced Engineering Informatics 61 (2024年) 102537.[609] E. Hoq、O. Aljarrah、J. Li、J. Bi、A. Heryudono、W. Huang，随机非均质材料应力场预测的数据驱动方法，Engineering Applications of Artificial Intelligence 123 (2023年) 106267.[610] P. Isola、J.-Y. Zhu、T. Zhou、A. A. Efros，基于条件对抗网络的图像到图像转换，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2017，第1125–1134页。[611] Y. Yang、P. Perdikaris，物理信息神经网络中的对抗不确定性量化，计算物理学杂志 394 (2019年) 136–152.[612] A. Daw、M. Maruf、A. Karpatne，PID-GAN：基于物理信息判别器、用于结合物理进行不确定性量化的生成对抗网络框架，载于：第27届ACM SIGKDD知识发现与数据挖掘会议论文集，2021年，第237–247页。[613] B. Bullwinkel、D. Randle、P. Protopapas、D. Sondak，DeqGAN：利用生成对抗网络学习物理信息神经网络的损失函数，arXiv预印本 arXiv:2209.07081 (2022年).[614] K. Ciftci、K. Hackl，基于无模型数据驱动计算力学的物理信息生成对抗网络框架，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 424 (2024年) 116907.[615] Z. Yang、S. Li、S. Li、J. Yang、D. Liu，基于生成对抗网络的两步数据增强方法用于高熵合金硬度预测，Computational Materials Science 220 (2023年) 112064.[616] S. Byun、J. Yu、S. Cheon、S. H. Lee、S. H. Park、T. Lee，利用机器学习与数据增强提升各向异性变形行为预测，Journal of Magnesium and Alloys 12 (1) (2024年) 186–196.[617] H. Qu、T. Hu、J. Qu、W. Z. Taffese，基于生成对抗网络-人工神经网络数据增强的机器学习模型，用于预测高温条件下纤维增强聚合物加固混凝土的粘结强度，Composite Structures (2025年) 119321.[618] Y. Shen、J. Du、Y. He、H. Wang、T. Hao、X. Niu、Q. Jiang，Aakan-wgan：基于生成式设计与Kolmogorov-Arnold网络自适应激活预测镁合金力学性能，Materials Today Communications (2025年) 113198.[619] M. A. Bessa、R. Bostanabad、Z. Liu、A. Hu、D. W. Apley、C. Brinson、W. Chen、W. K. Liu，不确定性条件下材料的数据驱动分析框架：应对维数灾难，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 320 (2017) 633–667.[620] R. Bostanabad、Y. Zhang、X. Li、T. Kearney、L. C. Brinson、D. W. Apley、W. K. Liu、W. Chen，计算微观结构表征与重构：前沿技术综述，Progress in Materials Science 95 (2018) 1–41.[621] J. Fu、W. Tan、D. Xiao、X. Zhuang，面向基于图像的孔隙/微观力学建模的多孔微观结构随机重构中的计算智能：J. fu等，Archives of Computational Methods in Engineering (2025年) 1–69.

[622] B. Chen、D. Li、P. Davies、R. Johnston、X. Ge、C. Li，多晶材料数字重构的最新进展，《Archives of Computational Methods in Engineering》（2025）1–52。[623] M. A. Groeber、M. A. Jackson，Dream. 3d：用于分析三维微观结构的数字表征环境，《材料与制造创新集成》3（1）（2014）56–72。[624] K. Bogu´n、M. Sitko、M. Moj˙zeszko、Ł. Madej，基于元胞自动机的计算库：用于开发异构微观结构数字材料表征模型，《Archives of Civil and Mechanical Engineering》21（2）（2021）61。[625] R. Quey、M. Kasemer，Neper/FEPX 项目：多晶生成、变形模拟和后处理的免费开源工具，载于：《IOP Conference Series: Materials Science and Engineering》，第1249卷，IOP Publishing，2022年，第012021页。[626] A. H. Altoyuri、A. Sarmah、M. K. Jain，使用生成式人工智能创建的 AA7075 合成三维微观结构的塑性变形与损伤建模，《材料学报》281（2024）120431。[627] B. Murgas、J. Stickel、L. Brewer、S. Ghosh，使用生成对抗网络支持的计算平台对复杂多晶合金进行建模，《Nature Communications》15（1）（2024）9441。[628] L.-Q. Chen，微观结构演化的相场模型，Annual Review of Materials Research 32（1）（2002）113–140。[629] O. Ahmad、V. Panwar、K. Das、R. Mukherjee、S. Bhowmick，使用生成对抗网络（GAN）开展微观结构研究：案例分析，arXiv 预印本 arXiv:2506.05860（2025）。[630] S. Thakre、V. Karan、A. K. Kanjarla，通过生成模型生成的微观结构的相似性与物理感知量化，Computational Materials Science 221（2023）112074。[631] T. Karras、S. Laine、M. Aittala、J. Hellsten、J. Lehtinen、T. Aila，分析并改进 StyleGAN 的图像质量，载于：IEEE/CVF 计算机视觉与模式识别会议论文集，2020年，第8110–8119页。[632] I. Watanabe、K. Sugiura、T.-T. Chen、T. Ogawa、Y. Adachi，双相钢实验观测三维微观结构与 GAN 生成三维微观结构的比较研究，《Science and Technology of Advanced Materials》25（1）（2024）2388501。[633] M. H. Hamza、A. Chattopadhyay，基于多种深度学习的随机微观结构重构及陶瓷基复合材料时变响应的高保真微观力学模拟，Composite Structures 345（2024）118360。[634] S. Ferdousi、Z. Demchuk、W. Choi、R. C. Advincula、Y. Jiang，深度学习与有限元方法相结合的轻质混杂复合材料逆向结构—性能设计探索，Composite Structures 365（2025）119179。[635] X. Ge、L. Wang、L. J. Garcia、S. Zhong、B. Chen、C. Li，利用切片描述符和显式神经网络重构异质材料的三维微观结构，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 448（2026）118469。[636] L. Dinh、J. Sohl-Dickstein、S. Bengio，使用 Real NVP 进行密度估计，arXiv 预印本 arXiv:1605.08803（2016）。[637] G. Papamakarios、E. Nalisnick、D. J. Rezende、S. Mohamed、B. Lakshminarayanan，用于概率建模与推断的归一化流，Journal of Machine Learning Research 22（57）（2021）1–64。[638] D. Rezende、S. Mohamed，使用归一化流进行变分推断，载于：国际机器学习会议，PMLR，2015年，第1530–1538页。

[639] M. O. Buzzy、D. M. de Oca Zapiain、A. P. Generale、S. R. Kalidindi、H. Lim，使用条件归一化流进行多晶织构设计的主动学习，《材料学报》284（2025）120537。[640] L. Ardizzone、C. Lüth、J. Kruse、C. Rother、U. Köthe，使用条件可逆神经网络进行引导式图像生成，arXiv 预印本 arXiv:1907.02392（2019）。[641] H. Mirzaee、S. Kamrava，使用条件连续归一化流进行微观结构逆向设计，《材料学报》285（2025）120704。[642] D. P. Kingma、M. Welling，自编码变分贝叶斯，arXiv 预印本 arXiv:1312.6114（2013）。[643] M. Calvat、C. Bean、D. Anjaria、H. Park、H. Wang、K. Vecchio、J. Stinville，通过衍射潜空间特征的空间映射学习金属微观结构非均匀性，arXiv 预印本 arXiv:2501.18064（2025）。[644] J. Liu、S. Wu、C. Zhang、G. Cao、Y. Cao、Z. Liu，面向热轧钢成分、工艺、微观结构与力学性能内在关系的生成式预训练基础模型，Materials Today Communications（2025）113307。[645] S. M. Lee、S.-Y. Park、B.-H. Choi，域自适应卷积变分自编码器在应力状态预测中的应用，Knowledge-Based Systems 248（2022）108827。[646] Y. Pu、Z. Gan、R. Henao、X. Yuan、C. Li、A. Stevens、L. Carin，用于图像、标签和题注深度学习的变分自编码器，《神经信息处理系统进展》29（2016）。[647] X. Lyu、X. Ren，面向随机多孔材料应力—应变响应预测与逆向设计的注意力增强深度学习，《材料力学》（2025）105418。[648] Y. Ji、A. Koeppe、P. Altschuh、D. Rajagopal、Y. Zhao、W. Chen、Y. Zhang、Y. Zheng、B. Nestler，利用变分自编码器实现晶粒结构特征自动提取与样本生成，Computational Materials Science 232（2024）112628。[649] V. Verma、A. Lamb、C. Beckham、A. Najafi、I. Mitliagkas、D. Lopez-Paz、Y. Bengio，流形混合：通过插值隐藏状态获得更优表征，载于：国际机器学习会议，PMLR，2019年，第6438–6447页。[650] Y. Zhang、P. Seibert、A. Otto、A. Raßloff、M. Ambati、M. Kästner，Da-vegan：通过可微方式增强 VAE-GAN，以利用极小数据集进行微观结构重构，Computational Materials Science 232（2024）112661。[651] I. Higgins、L. Matthey、A. Pal、C. Burgess、X. Glorot、M. Botvinick、S. Mohamed、A. Lerchner，β-VAE：利用约束变分框架学习基本视觉概念，载于：国际学习表征会议，2017年。[652] S. I. Wright、M. M. Nowell、S. P. Lindeman、P. P. Camus、M. De Graef、M. A. Jackson，新型 EBSD 后处理方法的介绍与比较，Ultramicroscopy 159（2015）81–94。[653] W. Liao、X. Xue、J. Li、J. Fan、L. Song、X. Shang、T. Lookman、R. Yuan，通过深度学习解耦强化机制，实现从微观结构到力学性能的映射，《材料学报》（2025）121608。[654] M. Calvat、C. Bean、D. Anjaria、H. Wang、K. Vecchio、J. Stinville，在基本加载过程中进行塑性编码与映射，以加速力学性能预测，Scripta Materialia 273（2026）117082。[655] R. E.Jones、C. M. Hamel、D. Bolintineanu、K. Johnson、R. B. de Macedo、J. Fuhg、N. Bouklas、S. Kramer，通过潜空间表征对空间相关微观结构进行多尺度模拟，International Journal of Solids and Structures 301（2024）112966。

[656] V. Attari, D. Khatamsaz, D. Allaire, R. Arroyave, 利用生成式相场建模和深度变分自编码器实现以微观结构为中心的逆向材料设计, 《材料学报》259 (2023) 119204.[657] R. D. Bourgin, 具有拉东-尼科迪姆性质的凸集的几何方面, 第 993 卷, 施普林格, 2006.[658] J. Sohl-Dickstein, E. Weiss, N. Maheswaranathan, S. Ganguli, 利用非平衡热力学进行深度无监督学习, 载于：国际机器学习会议, PMLR, 2015, 第 2256–2265 页.[659] L. Yang, Z. Zhang, Y. Song, S. Hong, R. Xu, Y. Zhao, W. Zhang, B. Cui, M.-H. Yang, 扩散模型：方法与应用综合综述, ACM Computing Surveys 56 (4) (2023) 1–39.[660] F.-A. Croitoru, V. Hondru, R. T. Ionescu, M. Shah, 视觉领域中的扩散模型：综述, 《IEEE模式分析与机器智能汇刊》45 (9) (2023) 10850–10869.[661] Z. Xing, Q. Feng, H. Chen, Q. Dai, H. Hu, H. Xu, Z. Wu, Y.-G. Jiang, 视频扩散模型综述, ACM Computing Surveys 57 (2) (2024) 1–42.[662] R. Po, W. Yifan, V. Golyanik, K. Aberman, J. T. Barron, A. Bermano, E. Chan, T. Dekel, A. Holynski, A. Kanazawa, 等, 视觉计算领域扩散模型的最新进展, 载于：《计算机图形论坛》, 第 43 卷, Wiley Online Library, 2024, 第 e15063 页.[663] P. Dhariwal, A. Nichol, 扩散模型在图像合成方面胜过生成对抗网络, 《神经信息处理系统进展》34 (2021) 8780–8794.[664] C. Shi, S. Luo, M. Xu, J. Tang, 学习用于分子构象生成的梯度场, 载于：国际机器学习会议 , PMLR, 2021, 第 9558–9568 页 .[665] R. Cai, G. Yang, H. Averbuch-Elor, Z. Hao, S. Belongie, N. Snavely, B. Hariharan, 学习用于形状生成的梯度场, 载于：欧洲计算机视觉会议, 施普林格, 2020, 第 364–381 页.[666] Y. Jadhav, J. Berthel, C. Hu, R. Panat, J. Beuth, A. B. Farimani, Stressd：使用去噪扩散模型进行二维应力估计, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 416 (2023) 116343.[667] C. Düreth, P. Seibert, D. Rücker, S. Handford, M. Kästner, M. Gude, 基于条件扩散的微观结构重构, Materials Today Communications 35 (2023) 105608.[668] A. E. Robertson, C. Kelly, M. Buzzy, S. R. Kalidindi, 用于条件微观结构生成的局部—全局分解, 《材料学报》253 (2023) 118966.[669] E. Azqadan, H. Jahed, A. Arami, 使用去噪扩散概率模型进行预测性微观结构图像生成, 《材料学报》261 (2023) 119406.[670] X. Lyu, X. Ren, 通过基于扩散的深度生成模型重构二维/三维随机材料的微观结构, 《科学报告》14 (1) (2024) 5041.[671] K. Yang, D. Schwalbe-Koda, 一种用于非晶材料的生成式扩散模型, npj Computational Materials (2025).[672] J. Jung, S. Oh, H. Kim, J. Na, S. J. Bae, C. Lee, S.-J. Kim, H. W. Lee, 基于多保真度学习的潜在扩散模型：双相钢三维微观结构逆向设计, 《材料与设计》(2025) 114623.[673] E. J. Hu, Y. Shen, P. Wallis, Z. Allen-Zhu, Y. Li, S. Wang, L. Wang, W. Chen, 等, LoRA：大语言模型的低秩适配, ICLR 1 (2) (2022) 3.[674] A. S. Saleh, K. Croes, H. Ceric, I. De Wolf, H. Zahedmanesh, 一种用于训练生成式人工智能驱动的晶粒分析的新型概念导向合成数据方法：基于扩散模型, Computational Materials Science 251 (2025) 113723.

[675] T. Brown, B. Mann, N. Ryder, M. Subbiah, J. D. Kaplan, P. Dhariwal, A. Neelakantan, P. Shyam, G. Sastry, A. Askell, 等，语言模型是少样本学习者，《神经信息处理系统进展》33 (2020) 1877–1901.[676] A. Radford, K. Narasimhan, T. Salimans, I. Sutskever, 等，通过生成式预训练提升语言理解能力 (2018).[677] J. Devlin, M.-W. Chang, K. Lee, K. Toutanova, BERT：用于语言理解的深度双向变换器预训练, 载于：2019年计算语言学协会北美分会人类语言技术会议论文集，第 1 卷（长短论文）, 2019, 第 4171–4186 页.[678] A. Srivastava, A. Rastogi, A. Rao, A. A. M. Shoeb, A. Abid, A. Fisch, A. R. Brown, A. Santoro, A. Gupta, A. Garriga-Alonso, 等，超越模仿游戏：量化并外推语言模型的能力, 机器学习研究汇刊 (2023).[679] S. An, Z. Ma, Z. Lin, N. Zheng, J.-G. Lou, W. Chen, 充分利用大语言模型的上下文, 《神经信息处理系统进展》37 (2024) 62160–62188.[680] Y. Xia, F. Fu, W. Zhang, J. Jiang, B. Cui, 面向多个 LoRA 适配器的高效多任务大语言模型量化与服务, 《神经信息处理系统进展》37 (2024) 63686–63714.[681] Y. Zhang, S. Mao, T. Ge, X. Wang, A. de Wynter, Y. Xia, W. Wu, T. Song, M. Lan, F. Wei, 大语言模型作为智囊：大语言模型战略推理综述, arXiv 预印本 arXiv:2404.01230 (2024).[682] A. Plaat, A. Wong, S. Verberne, J. Broekens, N. Van Stein, 大语言模型的多步推理：综述, ACM Computing Surveys (2025).[683] L. Zhang, Z. Liu, B. Ni, Q. Wang, 用于材料设计的大语言模型（LLMs）, Advanced Functional Materials (2025) e25897.[684] G. Tie, Z. Zhao, D. Song, F. Wei, R. Zhou, Y. Dai, W. Yin, Z. Yang, J. Yan, Y. Su, 等，大语言模型后训练：从对齐到推理的技术综述, arXiv 预印本 arXiv:2503.06072 (2025).[685] J. Achiam, S. Adler, S. Agarwal, L. Ahmad, I. Akkaya, F. L. Aleman, D. Almeida, J. Altenschmidt, S. Altman, S. Anadkat, 等，GPT-4 技术报告, arXiv 预印本 arXiv:2303.08774 (2023).[686] A. Ramesh, M. Pavlov, G. Goh, S. Gray, C. Voss, A. Radford, M. Chen, I. Sutskever, 零样本文生图, 载于：国际机器学习会议, PMLR, 2021, 第 8821–8831 页.[687] P. Sahoo, A. K. Singh, S. Saha, V. Jain, S. Mondal, A. Chadha, 大语言模型提示工程的系统综述：技术与应用, arXiv 预印本 arXiv:2402.07927 (2024).[688] G. Yong, K. Jeon, D. Gil, G. Lee, 使用视觉语言预训练模型进行零样本和少样本缺陷检测与分类的提示工程, 计算机辅助土木与基础设施工程 38 (11) (2023) 1536–1554.[689] J. Wei, X. Wang, D. Schuurmans, M. Bosma, F. Xia, E. Chi, Q. V. Le, D. Zhou, 等，思维链提示激发大语言模型的推理能力，《神经信息处理系统进展》35 (2022) 24824–24837.[690] H. Liu, C. Li, Q. Wu, Y. J. Lee, 视觉指令微调，《神经信息处理系统进展》36 (2023) 34892–34916.[691] Y. Gao, Y. Xiong, X. Gao, K. Jia, J. Pan, Y. Bi, Y. Dai, J. Sun, H. Wang, H. Wang, 大语言模型的检索增强生成：综述, arXiv 预印本 arXiv:2312.10997 2 (1) (2023).

[692] T. Shen, R. Jin, Y. Huang, C. Liu, W. Dong, Z. Guo, X. Wu, Y. Liu, D. Xiong，大语言模型对齐：综述，arXiv预印本 arXiv:2309.15025（2023年）。[693] J. Luo, W. Zhang, Y. Yuan, Y. Zhao, J. Yang, Y. Gu, B. Wu, B. Chen, Z. Qiao, Q. Long等，大语言模型智能体：关于方法、应用与挑战的综述，arXiv预印本 arXiv:2503.21460（2025年）。[694] M. A. Ferrag, N. Tihanyi, M. Debbah，从大语言模型推理到自主人工智能智能体：全面综述，arXiv预印本 arXiv:2504.19678（2025年）。[695] A. Plaat, M. van Duijn, N. van Stein, M. Preuss, P. van der Putten, K. J. Batenburg，智能体型大语言模型：一篇综述，arXiv预印本 arXiv:2503.23037（2025年）。[696] W. Yuan, G. Chen, Z. Wang, F. You，借助大语言模型赋能通用材料智能，《先进材料》（2025年）2502771。[697] A. Chaudhari, C. Guntuboina, H. Huang, A. B. Farimani，AlloyBERT：利用大语言模型进行合金性能预测，Computational Materials Science 244（2024年）113256。[698] Y. Liu, M. Ott, N. Goyal, J. Du, M. Joshi, D. Chen, O. Levy, M. Lewis, L. Zettlemoyer, V. Stoyanov，RoBERTa：一种鲁棒优化的BERT预训练方法，arXiv预印本 arXiv:1907.11692（2019年）。[699] S. Liu, T. Wen, B. Ye, Z. Li, H. Liu, Y. Ren, D. J. Srolovitz，用于材料性能预测的大语言模型：弹性常数张量预测与材料设计，Digital Discovery 4（6）（2025年）1625–1638。[700] Y. Li, V. Gupta, M. N. T. Kilic, K. Choudhary, D. Wines, W.-k. Liao, A. Choudhary, A. Agrawal，Hybrid-LLM-GNN：整合大语言模型与图神经网络以提升材料性能预测，Digital Discovery 4（2）（2025年）376–383。[701] H. Wang, K. Li, S. Ramsay, Y. Fehlis, E. Kim, J. Hattrick-Simpers，评估大语言模型在材料科学问答与性能预测中的表现和鲁棒性，Digital Discovery（2025年）。[702] D. Guo, D. Yang, H. Zhang, J. Song, R. Zhang, R. Xu, Q. Zhu, S. Ma, P. Wang, X. Bi等，DeepSeek-R1：通过强化学习激励大语言模型的推理能力，arXiv预印本 arXiv:2501.12948（2025年）。[703] T. Zhong, Z. Liu, Y. Pan, Y. Zhang, Y. Zhou, S. Liang, Z. Wu, Y. Lyu, P. Shu, X. Yu等，OpenAI o1评估：通用人工智能的机遇与挑战，arXiv预印本 arXiv:2409.18486（2024年）。[704] A. N. Rubungo, C. Arnold, B. P. Rand, A. B. Dieng，LLM-Prop：根据晶体固体的文本描述预测其物理和电子性质，arXiv预印本 arXiv:2310.14029（2023年）。[705] A. Trewartha, N. Walker, H. Huo, S. Lee, K. Cruse, J. Dagdelen, A. Dunn, K. A. Persson, G. Ceder, A. Jain，量化领域特定预训练在材料科学命名实体识别任务中的优势，Patterns 3（4）（2022年）。[706] A. Niyongabo Rubungo, C. Arnold, B. P. Rand, A. B. Dieng，LLM-Prop：使用大语言模型预测晶体材料的性质，npj Computational Materials 11（1）（2025年）186。[707] A. N. Rubungo, K. Li, J. Hattrick-Simpers, A. B. Dieng，LLM4Mat-Bench：大语言模型材料性能预测基准测试，《机器学习：科学与技术》6（2）（2025年）020501。[708] G. Team, T. Mesnard, C. Hardin, R. Dadashi, S. Bhupatiraju, S. Pathak, L. Sifre, M. Rivière, M. S. Kale, J. Love等，Gemma：基于Gemini研究与技术的开放模型，arXiv预印本 arXiv:2403.08295（2024年）。[709] H. Touvron, L. Martin, K. Stone, P. Albert, A. Almahairi, Y. Babaei, N. Bashlykov, S. Batra, P. Bhargava, S. Bhosale等，Llama 2：开放式基础模型与微调聊天模型，arXiv预印本 arXiv:2307.09288（2023年）。

[710] A. Q. Jiang, A. Sablayrolles, A. Mensch, C. Bamford, D. S. Chaplot, D. d. l. Casas, F. Bressand, G. Lengyel, G. Lample, L. Saulnier, L. Renard Lavaud, M.-A. Lachaux, P. Stock, T. Le Scao, T. Lavril, T. Wang, T. Lacroix, W. El Sayed，Mistral 7b，arXiv预印本 arXiv:2310.06825（2023年）。doi:10.48550/arXiv.2310.06825。网址 https://arxiv.org/abs/2310.06825[711] L. Pichlmann, S. Rafiezadeh, M. Hofbauer, E. D. Ocansey, J. A. Österreicher，铝合金力学性能预测：一种利用基于大语言模型的数据提取和基于物理的特征工程的数据驱动框架，Materials Today Communications（2025年）112843。[712] A. Grattafiori, A. Dubey, A. Jauhri, A. Pandey, A. Kadian, A. Al-Dahle, A. Letman, A. Mathur, A. Schelten, A. Vaughan等，Llama 3模型系列，arXiv预印本 arXiv:2407.21783（2024年）。[713] S. Lv, L. Peng, W. Wu, Y. Yao, S. Jiao, W. Hu，衔接语言模型与计算材料科学：一种提示驱动的材料性能预测框架，Materials Genome Engineering Advances（2025年）e70013。[714] S. Ghosh, A. Tewari，利用基于大语言模型的人工智能智能体自动提取材料属性，arXiv预印本 arXiv:2510.01235（2025年）。[715] M. Tacke, M. Busch, K. Abdolazizi, J. Eichinger, K. Linka, C. Cyron, R. Aydin，力学建模自动化：利用大语言模型设计物理约束神经网络以对材料进行本构建模，arXiv预印本 arXiv:2512.01735（2025年）。[716] L. Ning, Z. Cai, Y. Liu, W. Wang，基于两相材料扫描电子显微镜图像的条件生成对抗网络热应力直接预测方法，Ceramics International 47（24）（2021年）34115–34126。[717] R. Sahu, A. Gupta, D. Mittal, P. Chatterjee, S. K. Jha，用于复合材料应力–应变场预测的无监督 Graph-GAN模型，Journal of Materials Science（2025年）1–20。[718] H. Jingwen, C. Xun, W. Yashun, Y. Chen，低温下等轴显微组织Ti–6Al–4V合金的力学性能与流动应力本构关系，Chinese Journal of Aeronautics 38（1）（2025年）103238。[719] X. Lyu, X. Ren，变分自编码器引导的条件扩散生成模型，用于材料微观结构重构与逆向设计，Materials Today Communications（2025年）113087。[720] H. C. Phan, M. T. Tran, C. Lee, H. Kim, S. Oh, D.-K. Kim, H. W. Lee，利用Stable Diffusion生成具有参数感知能力的高保真微观结构，Advanced Engineering Informatics 69（2026年）104080。[721] A. Gu, T. Dao，Mamba：具有选择性状态空间的线性时间序列建模，载于：第一届语言建模会议，2024年。[722] J. Zhu, Y. Ren, W. Zhou, J. Xu, Z. Niu, S. Zhan, W. Ma，LLM-MambaFormer：整合Mamba与Transformer以预测晶体固体性质，Materials Today Communications 44（2025年）112029。[723] S. F. Ahmed, M. S. B. Alam, M. Hassan, M. R. Rozbu, T. Ishtiak, N. Rafa, M. Mofijur, A. Shawkat Ali, A. H. Gandomi，深度学习建模技术：当前进展、应用、优势与挑战，Artificial Intelligence Review 56（11）（2023年）13521–13617。[724] N. C. Thompson, K. Greenewald, K. Lee, G. F. Manso等，深度学习的计算极限，arXiv预印本 arXiv:2007.05558 10（2020年）2。[725] F. Fui-Hoon Nah, R. Zheng, J. Cai, K. Siau, L. Chen，生成式人工智能与ChatGPT：应用、挑战以及人工智能与人类协作（2023年）。[726] G. Naidu, T. Zuva, E. M. Sibanda，机器学习算法评估指标综述，载于：计算机科学在线会议，施普林格，2023年，第15–25页。

[727] O. Rainio, J. Teuho, R. Klén, 机器学习的评估指标与统计检验, 《科学报告》 14 (1) (2024年) 6086.
[728] J. Zhou, A. H. Gandomi, F. Chen, A. Holzinger, 机器学习解释质量的评估：方法与指标综述, Electronics 10 (5) (2021年) 593.[729] J. Terven, D.-M. Cordova-Esparza, J.-A. Romero-González, A. Ramírez-Pedraza, E. Chávez-Urbiola, 深度学习中损失函数与指标的全面综述, Artificial Intelligence Review 58 (7) (2025年) 195.[730] A. Bandi, B. Kongari, R. Naguru, S. Pasnoor, S. V. Vilipala, 智能体人工智能的兴起：定义、框架、架构、应用、评估指标与挑战综述, Future Internet 17 (9) (2025年) 404.
[731] R. G. Sargent, 仿真模型的验证与确认, 载于：2010年冬季仿真会议论文集, IEEE, 2010年, pp. 166–183.[732] B. H. Thacker, S. W. Doebling, F. M. Hemez, M. C. Anderson, J. E. Pepin, E. A. Rodriguez, 模型验证与确认的概念 (2004).[733] W. Xiang, P. Musau, A. A. Wild, D. M. Lopez, N. Hamilton, X. Yang, J. Rosenfeld, T. T. Johnson, 机器学习、自主性与神经网络验证综述, arXiv预印本 arXiv:1810.01989 (2018).[734] K. Pei, L. Zhu, Y. Cao, J. Yang, C. Vondrick, S. Jana, 迈向机器学习的实用验证：以计算机视觉系统为例, arXiv预印本 arXiv:1712.01785 (2017).[735] W. Ruan, X. Huang, M. Kwiatkowska, 具有可证明保证的深度神经网络可达性分析, arXiv预印本 arXiv:1805.02242 (2018).[736] X. Huang, M. Kwiatkowska, S. Wang, M. Wu, 深度神经网络的安全性验证, 载于：计算机辅助验证国际会议, 施普林格, 2017, pp. 3–29.[737] B. Ghojogh, M. Crowley, 过拟合、交叉验证、正则化、装袋法与提升背后的理论：教程, arXiv预印本 arXiv:1905.12787 (2019年).[738] X. Ying, 过拟合及其解决方案概述, 载于：物理学杂志：会议系列, 第1168卷, IOP Publishing, 2019年, p. 022022.[739] C. Zhang, S. Bengio, M. Hardt, B. Recht, O. Vinyals, 理解深度学习（仍然）需要重新思考泛化, ACM通讯 64 (3) (2021年) 107–115.[740] A. Munappy, J. Bosch, H. H. Olsson, A. Arpteg, B. Brinne, 深度学习的数据管理挑战, 载于：2019年第四十五届Euromicro软件工程与高级应用会议（SEAA）, IEEE, 2019年, pp. 140–147.[741] I. F. Ilyas, X. Chu, 数据清洗, Morgan & Claypool, 2019年.[742] X. Wang, S. L. Huey, R. Sheng, S. Mehta, F. Wang, Scidasynth：利用大语言模型从科学文献中进行交互式结构化数据提取, 坎贝尔系统评价 21 (4) (2025年) e70073.[743] D. Berrar等, 交叉验证. (2019年).[744] Y. Du, T. Mukherjee, R. Li, Z. Hou, S. Dutta, C. B. Arnold, A. Elwany, S. Kung, J. Tang, T. DebRoy, 金属增材制造中深度学习综述：对工艺、组织与性能的影响, Progress in Materials Science (2025年) 101587.[745] M. Seiler, J. Pohl, J. Bossek, P. Kerschke, H. Trautmann, 深度学习作为旅行商问题自动化算法选择的竞争性无特征方法, 载于：源于自然的并行问题求解国际会议, 施普林格, 2020, pp. 48–64.

[746] N. Hansen, Hall–Petch关系与晶界强化, Scripta Materialia 51 (8) (2004) 801–806.[747] A. Arsenlis, D. M. Parks, 晶体塑性中晶体学位错密度演化的建模, 《固体力学与物理学杂志》50 (9) (2002)1979–2009.[748] H. Mecking, U. Kocks, 流动与应变硬化动力学, Acta Metallurgica 29 (11) (1981) 1865–1875.[749] X. Jiang, W. Wang, S. Tian, H. Wang, T. Lookman, Y. Su, 自然语言处理与大语言模型在材料发现中的应用, npj Computational Materials11 (1) (2025年) 79.