一种用于渐进损伤与失效超弹性材料建模的物理信息驱动数据驱动框架

Kshitiz Upadhyay*

Department of Aerospace Engineering and Mechanics, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455, USA

arXiv:2602.11414v1 [cs.CE] 11 Feb 2026

摘要

本文提出了一种两阶段物理信息驱动的数据驱动本构建模框架，用于描述发生渐进损伤与失效的超弹性软材料。该框架以带能量限制器的超弹性概念为基础，并采用高斯过程回归（GPR）直接从数据中分别学习材料完整（未损伤）时的弹性响应和损伤演化。在阶段 I 中，高斯过程回归模型通过体积响应函数和等容响应函数（或在不可压缩条件下仅通过等容响应函数）学习材料完整状态下的超弹性响应，从而确保完整状态响应在能量上的一致性，并满足材料坐标系无关性和角动量平衡等基本原理。在第二阶段，使用独立的高斯过程回归模型对损伤进行建模，学习阶段 I 模型预测的完整应变能密度与应力折减因子之间的映射关系，该因子控制损伤与失效；同时通过基于惩罚函数的优化施加单调性、非负性和完全失效约束，以确保热力学可容许性。对合成数据集的验证（包括与解析本构模型及其他数据驱动方法的基准比较）表明，该框架在单轴拉伸条件下具有较高的分布内精度，并且能够从有限的训练数据稳健地泛化至训练中未涉及的压缩和剪切模式。将该框架应用于脑组织实验数据，展现了其实际适用性，并可用于推断损伤演化和临界失效能。总体而言，所提出的框架兼具解析模型的物理一致性、可解释性和泛化能力，以及机器学习的灵活性、预测精度和自动化优势，为在实验数据有限的情况下对软材料失效进行建模提供了一种有力方法。

关键词：数据驱动本构模型、超弹性、损伤与失效、物理信息机器学习、高斯过程回归、软材料、脑组织力学

1. 引言

超弹性材料，如弹性体、水凝胶、橡胶和泡沫材料，被广泛应用于从生物医学器件和软体机器人到汽车零部件及防护装备等各种领域。这些软材料通常表现出非线性应力–应变响应，并经历大变形，从而增加了其力学行为建模的难度 [1, 2]。此外，软材料在显著变形下通常会发生渐进损伤，并最终导致失效，而这一现象无法通过传统超弹性模型加以描述 [3, 4, 5]。因此，在本构模型中准确表征超弹性行为和损伤行为，对于可靠地预测现实世界中的力学响应至关重要 [5, 6, 7, 8]。

以连续介质热力学为基础的传统本构模型，能够有效描述各种超弹性材料的力学响应。典型示例包括新胡克模型 [9, 10],Mooney–Rivlin模型 [11, 12], Ogden模型 [13], 和Gent模型 [14], ，因其物理可解释性和数学简洁性而广受认可。这些传统模型天然满足客观性（即材料坐标系无关性）、材料对称性和热力学一致性等基本物理约束 [15, 16]。然而，其固定的数学形式限制了灵活性，因而难以准确捕捉高度复杂且多样的响应 [17]。此外，这些模型通常需要专家针对特定的应力-应变数据进行选择，从而成为自动化、高通量材料表征与发现的重大瓶颈 [18, 19, 20, 21]。

*通讯作者。电子邮箱：kshitizu@umn.edu

因此，迫切需要灵活的数据驱动本构建模方法，使其能够在尽量减少专家干预的情况下，直接从数据中自主发现关系。

数据驱动本构建模已成为一种强有力的替代方案，克服了传统方法固有的许多局限 [22, 23]。这些方法能够直接从实验或数值数据中自主识别灵活的本构模型，大幅降低对专家输入的依赖 [24, 25, 26, 27, 28, 29]。此外，数据驱动方法能够有效地泛化至多种材料响应，提供普遍适用的解决方案，非常适合用于自动化表征流程 [30, 31, 32, 33, 34]。与此同时，实验技术也取得了进步，包括数字图像相关（DIC）、数字体相关（DVC）和磁共振弹性成像（MRE）等技术，显著丰富了可用的应变数据，进一步提升了数据驱动方法的效能 [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41]。这些技术有助于提高精度和泛化能力，并减少对严格假设的依赖。

数据驱动本构建模方法大致可分为纯数据驱动（黑箱）方法和物理信息数据驱动框架（详情请参阅 Fuhg 等人近期发表的综述 [22]）。纯数据驱动方法（如标准人工神经网络（ ANNs ））在训练数据集范围内具有较强的灵活性和预测准确性。然而，其在工程实践中的实用性往往受到泛化能力差、对基本物理约束遵循不足等问题的限制。相比之下，物理信息数据驱动模型会明确融入必要的物理原理，从而确保满足客观性、材料对称性、多凸性和热力学一致性等关键约束。

近期关于软材料力学的研究强调了多种物理信息机器学习（ML）方法，包括物理信息神经网络（PINNs）、基于高斯过程回归（GPR）的代理模型以及输入凸神经网络（ICNNs） [42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50]。例如，Frankel 等人 [47] 和 Fuhg 等人 [46] 在广义超弹性本构框架中，将总应力表示为不可约张量基各分量的加权和，并采用高斯过程回归将应变不变量映射到相应基分量的系数，这些系数称为响应函数。不变量与响应函数之间这种简单的映射，能够内在地确保预测力学响应满足若干关键物理约束，包括材料坐标系无关性、材料对称性、热力学一致性以及局部角动量平衡。此外，与其他回归方法（例如人工神经网络）不同，高斯过程回归凭借其精确推断性质，能够确保无应力参考构型 [45]。在此研究基础上，Upadhyay 等人 [51] 近期将约束高斯过程回归框架应用于黏弹性超弹性材料，并将熵不等式约束明确纳入高斯过程回归超参数优化。该研究展现了基于高斯过程回归的数据驱动模型的若干额外优势：适用于有限训练数据，在广泛的变形模式下具有泛化能力，对噪声具有稳健性，并且凭借严谨的统计基础而具有更强的可解释性；这一基础也有助于将此类模型无缝整合到不确定性量化流程中。

尽管取得了 substantial advancements，但在超弹性建模框架中捕捉渐进损伤与失效行为方面仍存在一个关键空白，无论是在传统建模还是数据驱动建模中均是如此。传统超弹性理论本质上无法充分表征材料失效，因为其应变能密度函数通常无界增长，从而限制了对材料性能进行现实预测的能力。为解决这一局限，Volokh 引入了能量限制器的概念，将饱和极限嵌入应变能密度函数中，从而能够在大变形下表征材料失效 [52]。这一能量限制概念已有效用于建模多种现象，包括不同加载条件下的橡胶失效、裂纹萌生与扩展、空化失稳以及膜破裂 [53, 54, 55, 56]。然而，如前文所述，这类经典解析方法高度依赖于精心选择的函数形式和专家假设，限制了其灵活性与泛化能力。

将数据驱动方法与损伤力学相结合的研究，主要集中于基于神经网络的架构。例如，Tac 等人 [57] 采用神经常微分方程（NODEs）对超弹性材料进行建模，并通过引入单调屈服函数，将这一方法扩展到以符合热力学一致性的方式描述损伤。他们的方法表明，能够从合成数据中重新发现经典损伤演化定律，并描述大变形条件下的软组织响应。除基于 NODE 的方法外，还有多项研究探索了利用神经网络学习潜在或各向异性损伤表征。Gaetano 等人 [58] 利用深度神经网络，根据代表性体积单元模拟推断纤维增强复合材料的四阶各向异性损伤曲面张量，将宏观损伤演化与施加的宏观应变及割线刚度退化联系起来。Liu 等人 [59] 训练人工神经网络，构建用于板

和壳体断裂的损伤形式屈服函数，所依据的是有效主动应力的不变量。Rojas 等人 [60] 研究了包括物理信息神经网络在内的神经网络架构，以推断相场损伤偏微分方程中的参数。与这些基于神经网络的本构方法并行，近期其他研究也开始探索替代性的数据驱动工具：Ostadrahimi 等人 [50] 结合高斯过程回归和循环神经网络，刻画弹性体中的 Mullins 型不连续软化；Abdusalamov 等人 [61] 则采用符号回归对这一应力软化现象进行建模。另有一类研究主要将机器学习用作高维黑箱表征，或用作断裂与损伤模拟的计算代理 [62, 49]。总体而言，这些研究凸显了一个更广泛的趋势：直接从数据中学习损伤演化定律；然而，现有框架大多依赖高容量神经网络架构，这可能限制其可解释性及其在不同变形情形下的泛化能力；或着重于加速断裂模拟，而非学习局部本构定律；又或针对不连续软化现象（例如 Mullins 效应、滞后、残余应变），而非沿加载路径持续发生、最终导致力学失效的刚度退化。

受这些研究空白与机遇的启发，本文提出一种新颖的物理信息驱动的数据驱动框架，用于对超弹性材料中持续发生的、由力学驱动并最终导致失效的损伤进行建模；其特征是在主要加载路径上刚度逐渐降低，最终导致材料破裂。在 Volokh 基于能量限制器 [52, 63], 建立的稳健超弹性物理基础上，我们的方法采用广义函数形式，通过不可约张量基分量表达应力，这些分量由超弹性响应函数加权，并受一个取决于完整（即未受损）应变能密度的应力折减因子调节。与以往基于神经网络的本构方法不同，本文采用基于 GPR 的两阶段监督学习策略：首先捕捉未受损材料的超弹性响应函数，随后通过依赖应变能密度的应力折减因子学习损伤响应。关键的是，第二阶段施加了基于物理原理的约束，包括损伤累积单调且非负，以及在大应变下完全失效。

我们使用数值生成的应力-应变数据集对所提出的模型进行了全面验证。我们将预测结果与传统唯象模型、黑箱机器学习（即纯数据驱动）模型，以及直接的一步式 GPR 映射进行对比，涵盖多种变形模式，包括超出训练范围的单轴和剪切响应。作为评估的一部分，我们还将该框架应用于实验观测到的、呈现渐进损伤的脑组织应力-应变数据，进一步证明了模型对复杂生物材料的适用性。结果表明，该模型在准确性、预测稳健性和泛化能力方面均有显著提升。

本文其余部分安排如下：第 2 节概述理论基础，包括广义能量受限超弹性模型及其不可约张量基分解。第 3 节详细介绍所提出的数据驱动本构建模框架以及我们的两阶段约束训练方法。第 4 节介绍模型评估方法，以及为此使用的数值数据集和实验数据集。第 5 节展示并分析模型性能和评估结果，第 6 节总结主要发现并提出未来研究方向。

2. 理论基础

2.1. 能量限制器方法：超弹性材料失效建模

传统超弹性材料模型采用的应变能密度函数会随着变形增大而持续增长且没有上限。尽管这些经典模型能够有效描述非线性弹性和大变形行为，但它们本质上无法表征材料失效，因为当应变能累积接近有限上限时，真实材料最终会发生断裂。为解决这一局限，Volokh 提出了能量限制器的概念，以便在超弹性框架中显式地模拟渐进损伤与失效 [52, 5]。

能量限制器方法的核心思想是限制材料单元可储存的最大应变能密度，以反映微观结构键断裂的物理机制 [63, 8]。具体而言，引入临界失效能 ψ_f （也称为饱和能）来表征材料韧性，即材料发生失效前所能承受的应变能密度上限。从数学上看，这种能量限制意味着总应变能密度ψ 渐近趋近于 ψ_f:

$$\lim_{W \to \infty} \psi(W) = \psi_f, \tag{1}$$

其中， W 是完整（未损伤）状态下的超弹性应变能密度，是施加变形的函数。

对于小到中等程度的变形，当 $W \ll \psi_f$ 时，应变能密度函数收敛至标准超弹性行为：

$$\psi(W) \approx W, \quad \text{as} \quad W \to 0, \tag{2}$$

这表明材料响应最初未发生损伤。相反，随着变形增加，应变能密度趋近于临界失效能 ψ_f：

$$\psi(W) \to \psi_f, \quad \text{as} \quad W \to \infty, \tag{3}$$

这清楚地表明材料已完全损伤。

2.2. 能量受限超弹性中应力的不可约张量基分解

第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量 S 通过对应变能密度函数 ψ 关于右柯西–格林变形张量 C [15]求导得到：

$$\mathbf{S} = 2\frac{\partial \psi(W)}{\partial \mathbf{C}}. \tag{4}$$

应用链式法则后，表达式变为：

$$\mathbf{S} = 2\frac{d\psi}{dW}\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}}, \tag{5}$$

其中，应力折减因子 $\frac{d\psi}{dW} \in [0,1]$ 反映了渐进的材料退化，其值从 1（未损伤）单调递减至 0（完全损伤） [8]。

假设材料具有各向同性材料行为，应力张量可以用 C 的标量不变量表示：

$$\mathbf{S} = 2\frac{d\psi}{dW}\frac{\partial W\left(J, I_1, I_2\right)}{\partial \mathbf{C}}, \tag{6}$$

其中不变量定义为：

$$J = \sqrt{\det \mathbf{C}}, \quad I_1 = \mathrm{tr}\mathbf{C}, \quad I_2 = \frac{1}{2}\left[(\mathrm{tr}\mathbf{C})^2 - \mathrm{tr}(\mathbf{C}^2)\right]. \tag{7}$$

这些不变量完全刻画了各向同性超弹性材料的变形状态。从物理角度来看， J 衡量材料微元在变形过程中的相对体积变化（即体积膨胀或压缩）， I_1 表示材料内部所有可能取向的微元线段的伸长比平方之和的平均值，而 I_2 表示微元面积的伸长比平方在所有可能取向上的平均值的三倍，用于表征剪切变形的程度 [64, 65, 66]。

不失 去一般性， W 可以分解为体积贡献和等容贡献 [15]：

$$W = U(J) + \bar{W}_{iso}\left(\bar{I}_1, \bar{I}_2\right), \tag{8}$$

¯其中， $U(J)$描述体积能量密度函数，而 W_{iso} 通过畸变右柯西–格林变形张量 $\bar{\mathbf{C}} = J^{-2/3}\mathbf{C}$ 的不变量表征等容应变能密度，¯从而确保体积保持（$\det\mathbf{C} = 1$）：

$$\bar{I}_1 = \mathrm{tr}\bar{\mathbf{C}}, \quad \bar{I}_2 = \frac{1}{2}\left[(\mathrm{tr}\bar{\mathbf{C}})^2 - \mathrm{tr}(\bar{\mathbf{C}}^2)\right]. \tag{9}$$

将式（8）代入式（6），总应力可加性地分解为体积（$\mathbf{S}_{vol}$）应力分量和等容（$\mathbf{S}_{iso}$）应力分量，

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{vol} + \mathbf{S}_{iso} = \frac{d\psi}{dW}\left(2\frac{\partial U\left(J\right)}{\partial \mathbf{C}} + 2\frac{\partial \bar{W}_{iso}\left(\bar{I}_1, \bar{I}_2\right)}{\partial \mathbf{C}}\right). \tag{10}$$

式 (10) 中的偏导数可利用各向同性超弹性的标准结果，通过链式法则展开 [15, 51], ，从而得到总第二 Piola–Kirchhoff 应力的以下 Rivlin–Ericksen 表示：

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{vol} + \mathbf{S}_{iso} = \frac{d\psi}{dW}\left[J\frac{dU}{dJ}\mathbf{C}^{-1} + 2J^{-2/3}\left(\frac{\partial \bar{W}_{iso}}{\partial \bar{I}_1} + \bar{I}_1\frac{\partial \bar{W}_{iso}}{\partial \bar{I}_2}\right)\mathrm{Dev}(\mathbf{I}) - 2J^{-2/3}\frac{\partial \bar{W}_{iso}}{\partial \bar{I}_2}\mathrm{Dev}\bar{\mathbf{C}}\right], \tag{11}$$

其中 $\mathrm{Dev}(\cdot) = (\cdot) - \frac{1}{3}((\cdot) : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1}$ 是拉格朗日描述中的偏量算子，而 $\mathbf{I}$ 是单位张量。

方程 (11) 是能量受限超弹性本构建模框架的广义应力描述。文献中已有若干唯象模型，分别为 $\psi(W)$、$U(J)$ 和 $W_{iso}(I_1, I_2)$ 提供了特定的数学方程，并已用于描述多种软材料的损伤响应，包括橡胶 [67, 68, 69, 56], 、皮肤组织 [70, 71], 和动脉壁[72, 73]。无论选择哪种特定的本构方程，方程 (11) 都可以改写为另一种形式：将不可约张量基的分量加性分解，并以特定响应函数为权重，再由应力折减因子调制：

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{vol} + \mathbf{S}_{iso} = \chi(W)\left[\zeta(J)\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\Gamma_1(\bar{I}_1, \bar{I}_2)\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\Gamma_2(\bar{I}_1, \bar{I}_2)\mathbb{G}_3\right], \tag{12}$$

其中，张量基分量为

$$\mathbb{G}_1 = \mathbf{C}^{-1}, \quad \mathbb{G}_2 = \mathrm{Dev}(\mathbf{I}), \quad \mathbb{G}_3 = \mathrm{Dev}(\bar{\mathbf{C}}), \tag{13}$$

标量响应函数为

$$\begin{gathered} \zeta(J) = J\frac{dU(J)}{dJ}, \\ \Gamma_1(\bar{I}_1, \bar{I}_2) = 2\left(\frac{\partial \bar{W}_{iso}(\bar{I}_1, \bar{I}_2)}{\partial \bar{I}_1} + \bar{I}_1\frac{\partial \bar{W}_{iso}(\bar{I}_1, \bar{I}_2)}{\partial \bar{I}_2}\right), \quad \Gamma_2(\bar{I}_1, \bar{I}_2) = -2\frac{\partial \bar{W}_{iso}(\bar{I}_1, \bar{I}_2)}{\partial \bar{I}_2}, \end{gathered} \tag{14}$$

且 $\chi(W) = \frac{d\psi}{dW}(W)$ 是应力折减因子。

方程 (12) 中的广义应力表示构成了本研究所提出的数据驱动本构建模框架的基础。在传统的能量受限超弹性中，响应函数（方程 (14)）和应力折减因子采用固定的数学表达式，这些表达式基于所选的本构方程 ψ、$W(J)$ 和 $W(I_1, I_2)$（部分示例见附录 A 中的表 1–3）。与这些唯象模型不同，本研究提出的数据驱动框架将使用高斯过程回归模型，直接从实验应力-应变数据中明确学习 χ 与 W、ζ 与 J，以及 $\{\Gamma_1, \Gamma_2\}$ 与 $\{I_1, I_2\}$ 之间的关系，具体内容将在下一节详述。

3. 数据驱动本构建模框架

3.1. 所提出的框架概述

所提出的本构建模框架基于一种两阶段高斯过程回归方法，旨在为发生渐进损伤的超弹性软材料发现具有物理可解释性的本构定律。图 1 展示了该两阶段框架的详细示意图，概述了模型构建所涉及的步骤，包括从数据预处理到高斯过程回归训练以及最终的模型汇编。

第一阶段旨在表征材料在未损伤区间内的响应。该阶段假设，在小到中等应变水平（通常取完全失效时最大应变的约 50%）之前，材料的力学响应对应于完整材料的行为。具体截断值由用户定义，可根据实验观察进行调整。利用来自该未损伤区间（即 $\chi = 1$）的应力-应变数据，通过对第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量的线性化张量基表示进行反演，计算标量响应函数 $\zeta(J)$、$\Gamma_1(I_1, I_2)$ 和 $\Gamma_2(I_1, I_2)$，其中包括 $\bar{}$ $\bar{}$ $\bar{}$ $\bar{}$（详见第 3.2 节）。随后训练两个高斯过程回归模型：一个用于学习体积应变不变量 J 与体积响应函数 ζ 之间的映射，另一个用于学习等容不变量 $\{I_1, I_2\}$ 与相应等容响应函数 $\{\Gamma_1, \Gamma_2\}$ 之间的映射。数学上，这些映射可表示为：

$$\mathcal{M}_{vol} : \left[J\right] \mapsto \left[\zeta\right], \tag{15}$$

$$\mathcal{M}_{iso} : \begin{bmatrix}\bar{I}_1 \\ \bar{I}_2\end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix}\Gamma_1 \\ \Gamma_2\end{bmatrix}. \tag{16}$$

在第二阶段，利用阶段 I 得到的高斯过程回归模型，计算完整（即未受损）应力响应的预测值以及相应的完整超弹性应变能密度 W

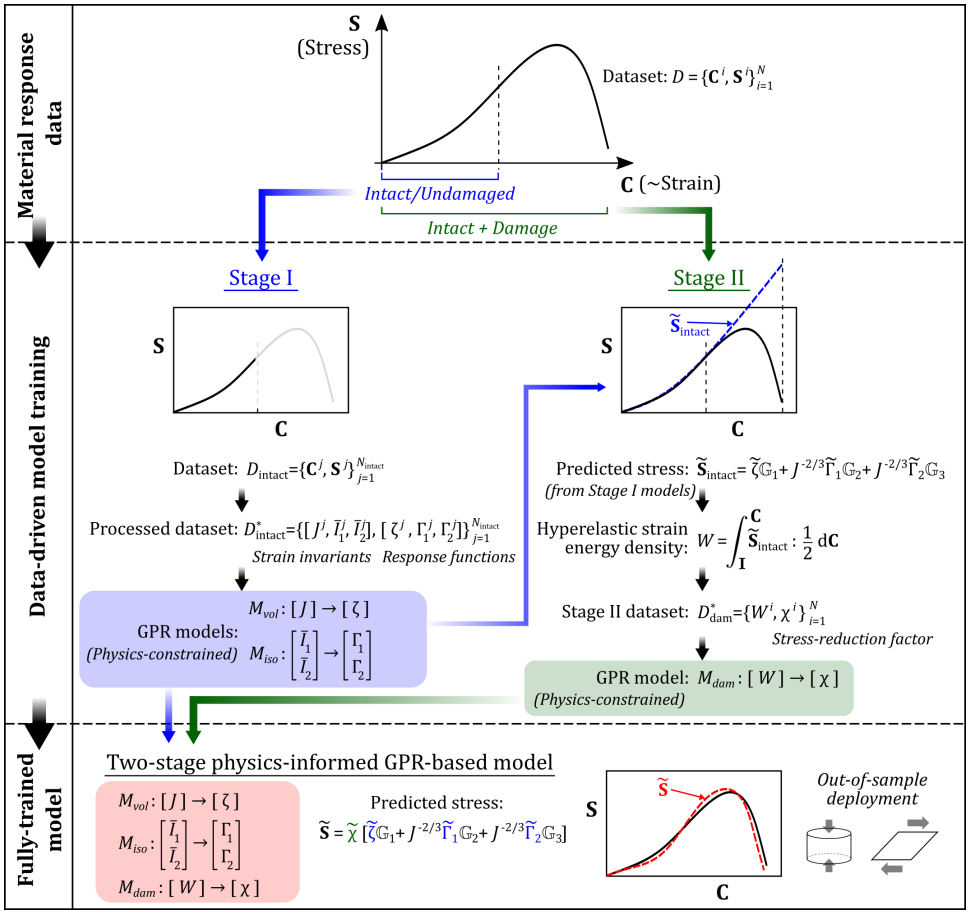

图 1：所提出的物理信息驱动的数据驱动本构建模框架示意图。完整的材料响应数据集（应力与应变的关系）包含未损伤（完整）阶段和损伤阶段。在阶段 I（第 3.2 节）中，对响应的完整部分进行处理，以计算应变不变量（J、$\bar{I}_1$、$\bar{I}_2$）及相应的响应函数（ζ、Γ_1、Γ_2）。这些量作为两个高斯过程回归模型的输入–输出训练数据，分别用于表征体积和等容超弹性响应，记为 $\mathcal{M}_{vol}$ 和 $\mathcal{M}_{iso}$。在第二阶段（第 3.3 节）中，利用训练完成的第一阶段高斯过程回归模型，预测完整（即未损伤）应力响应以及在整个加载历史上的相关完整超弹性应变能密度 W。随后推断表示渐进损伤与失效的应力折减因子 $\chi(W)$，并利用其训练第三个受约束的高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{dam}$。三个高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$、$\mathcal{M}_{iso}$和 $\mathcal{M}_{dam}$ 共同构成所提出的 *two-stage physics-informed GPR-based model*，从而能够在任意变形路径下进行物理一致的应力预测。

涵盖整个变形范围，包括损伤阶段。通过实验应力与预测的完整应力之比，采用线性最小二乘法逐点估计应力折减因子 $\chi(W)$（详见第 3.3 节）。随后训练第三个高斯过程回归模型，以学习从 W 到 χ 的映射，并施加基于物理的约束，确保非负性、单调衰减（即损伤可以累积但不可逆转）以及渐近行为（即当 $W \to \infty$ 时，$\chi \to 0$）。该映射的数学表达式为：

$$\mathcal{M}_{dam} : \left[W\right] \mapsto \left[\chi\right]. \tag{17}$$

这三个高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$、$\mathcal{M}_{iso}$和 $\mathcal{M}_{dam}$共同构成了一个物理信息驱动的数据驱动本构框架。下文将该框架称为两阶段物理信息高斯过程回归模型。训练完成后，该完整模型可用于根据给定的输入变形张量 $\mathbf{C}$ 计算总应力 $\mathbf{S}$，具体如下：

$$\widetilde{\mathbf{S}} = \widetilde{\chi}\left[\widetilde{\zeta}\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\widetilde{\Gamma}_1\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\widetilde{\Gamma}_2\mathbb{G}_3\right], \tag{18}$$

其中，应力、响应函数和应力折减因子上方的重音符号（$\widetilde{\cdot}$）表示由组成部分的高斯过程回归模型预测的量。

3.2. 阶段 I：未损伤超弹性响应建模

3.2.1. 输入–输出数据集生成

在阶段 I，首先收集实验数据集 $\mathcal{D} = \{\mathbf{C}^i, \mathbf{S}^i\}_{i=1}^{N}$，其中可能包含完整和受损响应。此处，上标 i 表示数据集中的某个数据点，N 为数据点总数。为分离完整（未损伤）材料响应，将用户定义的应变（或伸长比）截断值应用于数据，通常设为失效时最大应变（或最大伸长比）的约 50%。由此得到缩减后的完整子集 $\mathcal{D}_{\text{intact}} = \{\mathbf{C}^j, \mathbf{S}^j\}_{j=1}^{N_{\text{intact}}}$，其中 $N_{\text{intact}} < N$和 $\mathcal{D}_{\text{intact}} \subset \mathcal{D}$。

基于这一完整材料响应子集，可生成另一种数据集，

$$\mathcal{D}^*_{\text{intact}} = \{[J^j, \bar{I}_1^j, \bar{I}_2^j], [\zeta^j, \Gamma_1^j, \Gamma_2^j]\}_{j=1}^{N_{\text{intact}}}, \tag{19}$$

以便训练数据驱动映射。该替代数据集通过求解完整应力与张量基分量之间的张量线性关系（参见式 (12)）生成，

$$\mathbf{S}_{\text{intact}} = \zeta\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\Gamma_1\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\Gamma_2\mathbb{G}_3, \tag{20}$$

该关系可表示为一般线性代数形式 ($Ax = b$)：

$$\underbrace{\begin{bmatrix}\text{vec}(\mathbb{G}_1) & J^{-2/3}\text{vec}(\mathbb{G}_2) & J^{-2/3}\text{vec}(\mathbb{G}_3)\end{bmatrix}}_{A}\underbrace{\begin{bmatrix}\zeta\\ \Gamma_1\\ \Gamma_2\end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\text{vec}(\mathbf{S}_{\text{intact}})}_{b}, \tag{21}$$

其中，$\text{vec}(\cdot) \in \mathbb{R}^{9\times 1}$ 表示张量向量化。对于 $\mathcal{D}_{\text{intact}}$中的每个实验数据点，利用已知的 $\mathbf{S}_{\text{intact}}$、$J$、$\mathbb{G}_1$、$\mathbb{G}_2$ 和 $\mathbb{G}_3$（后四项由 $\mathbf{C}$ 根据公式（7）和（13）计算得出），通过最小化残差来求解该方程，以计算三个响应函数：$\min_{\zeta,\ \Gamma_1,\ \Gamma_2} \|Ax - b\|^2$。请注意，已知的 $\mathbf{S}_{\text{intact}}$ 对应于缩减后的未损伤数据集 $\mathcal{D}_{\text{intact}}$中包含的应力测量值。

或者，如果能够分别获得弹性体积响应和等容响应（例如，通过独立的体积压缩试验和等容变形试验），则可以通过求解形式为 $Ax = b$的两个解耦线性方程组来获得响应函数。在这种情况下，体积响应函数 ζ 可通过求解一个涉及 $\text{vec}(\mathbf{S}_{\text{intact},\ vol})$ 和向量化张量基 $\text{vec}(\mathbb{G}_1)$ 的方程提取；而等容响应函数 Γ_1 和 Γ_2 则可由 $\text{vec}(\mathbf{S}_{\text{intact},\ iso})$、$\left(J^{-2/3}\text{vec}(\mathbb{G}_2)\ \ J^{-2/3}\text{vec}(\mathbb{G}_3)\right)$获得。此替代流程会得到相同的数据点集合 $\{\zeta^j, \Gamma_1^j, \Gamma_2^j\}$，用于构建数据集 $\mathcal{D}^*_{\text{intact}}$。

创建数据集 $\mathcal{D}^*_{\text{intact}}$ 后，分别训练两个高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$：$J \mapsto \zeta$（公式（15））和 $\mathcal{M}_{iso}$：$\bar{}\ \bar{}$（I_1，I_2）$\mapsto$（Γ_1，Γ_2）（公式（16））。至此，阶段 I 完成，建立了一个稳健且物理一致的基线模型，用于预测未损伤超弹性响应。

3.2.2. 高斯过程回归实现

在本研究中，高斯过程回归被用作非参数贝叶斯回归框架，以直接从数据 [74]中学习函数关系。给定输入–输出对 $\{\mathbf{z}^j、\mathbf{y}^j\}_{j=1}^{n}$，将输出建模为零均值高斯过程的实现：

$$\mathbf{y}(\mathbf{z}) \sim \mathcal{GP}(0, k(\mathbf{z}, \mathbf{z}')), \tag{22}$$

其中，$\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{d_{\text{in}}}$ 表示输入向量（例如，J和 $[\bar{I}_1, \bar{I}_2]^{\text{T}}$），而 $\mathbf{y(z)} \in \mathbb{R}^{d_{\text{out}}}$ 是相应的向量值输出（例如，ζ或 $[\Gamma_1, \Gamma_2]^{\text{T}}$）。对于体积高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$，$d_{\text{in}} = d_{\text{out}} = 1$；而对于等容高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{iso}$，$d_{\text{in}} = d_{\text{out}} = 2$。

协方差核 $k(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ 编码了关于待学习底层函数的平滑性、相关长度和正则性的先验假设。从本质上说，核决定了两个不同输入位置处的输出在统计上的相关程度，从而决定了 GPR 模型能够表示的函数类。我们采用 Mat´ern 5/2 协方差核 [75, 76], ，并加入块金项以确保数值稳定性：

$$k(\mathbf{z}, \mathbf{z}') = \sigma_f^2\left(1 + \frac{\sqrt{5}r}{\ell} + \frac{5r^2}{3\ell^2}\right)\exp\left(-\frac{\sqrt{5}r}{\ell}\right) + \alpha\delta_{\mathbf{z}\mathbf{z}'}, \tag{23}$$

其中， $r = \|\mathbf{z} - \mathbf{z}'\|$ 表示欧几里得距离，σ_f^2 表示信号方差， l 表示特征长度尺度，α 表示块金参数，$\delta'_{\mathbf{zz}}$ 表示克罗内克δ。

根据 Laurent等人 [77], 的比较研究，选择 Mat´ern 5/2 核；该研究表明，当对底层函数形式几乎没有先验信息时，该核在计算机实验中具有良好的稳健性。重要的是，该核具有可控的平滑性——对应于二阶均方可微性——因此在避免平方指数核 [78, 79]所带来的过度平滑行为的同时，也足以灵活地用于本构建模。请注意，核的可微性对第二阶段损伤模型（第 3.3 节）尤为关键，因为该模型直接对学习函数相对于应变能密度的导数施加约束。

通过最小化负边际对数似然 [80]，即可获得最能描述训练数据集的最优核超参数 $\boldsymbol{\theta} = [\sigma_f, l]$：

$$\widetilde{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}^\star} \left[-\log\, p(\mathbf{Y}|\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta})\right] = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}^\star} \left[\frac{1}{2}\mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Y} + \frac{1}{2}\log(\det(\mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{Z}))) + \frac{n}{2}\log(2\pi)\right], \quad (24)$$

其中，矩阵 $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{n\times d_{\mathrm{in}}}$ 表示完整的输入训练数据集，每一行代表一个样本数据点；同样，$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n\times d_{\mathrm{out}}}$ 包含训练数据集中的所有向量值输出。K(Z, Z) 是使用核 $k(\cdot,\cdot)$构造的 Gram矩阵。

在确定最佳参数后，高斯过程回归模型即被完全定义。给定一个新的输入数据点$\mathbf{z}_\star$，高斯过程回归器的预测输出 ˜y为

$$\widetilde{\mathbf{y}}(\mathbf{z}_\star) = \mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{z}_\star)^{\mathrm{T}}\,\mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{Z})^{-1}\,\mathbf{Y}, \quad (25)$$

其预测方差为

$$\widetilde{\sigma}^2(\mathbf{z}_\star) = k(\mathbf{z}_\star,\mathbf{z}_\star) - \mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{z}_\star)^{\mathrm{T}}\,\mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{Z})^{-1}\,\mathbf{K}(\mathbf{Z},\mathbf{z}_\star). \quad (26)$$

如 $\alpha \to 0$ 式(23)所示，高斯过程回归预测器具有精确推断性质，即在所有训练点 $j = 1$, ..., n处， ˜ y(z^j) = y^j 。利用该性质，通过在训练集中显式纳入数据点 {C = I,S = **0**} ，可强制满足无应力参考状态。就不变量而言，C = I¯ ¯对应于 $J = 1$ 和 $I_1 = I_2 = 3$，而S = **0** 则对应于 $\zeta = \Gamma_1 = \Gamma_2 = 0$。

超参数优化采用Python的SciPy库中的有限内存Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno（L-BFGS-B）算法进行 [81]。

3.3. 阶段 II：通过约束高斯过程回归纳入渐进损伤与失效

3.3.1. 输入–输出数据集生成

在第二阶段中，对表征材料退化的应力折减因子 χ进行显式建模。利用在阶段 I 训练的高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$ 和 $\mathcal{M}_{iso}$ ，在训练数据集 $\mathcal{D}$ 的整个变形范围内（包括损伤区域）预测完整应力 $\mathbf{S}_{\mathrm{intact}}$ ，得到

$$\widetilde{\mathbf{S}}_{\mathrm{intact}} = \widetilde{\zeta}\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\widetilde{\Gamma}_1\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\widetilde{\Gamma}_2\mathbb{G}_3, \quad (27)$$

其中，重音符号（˜）表示第一阶段高斯过程回归模型的预测值。

相应 的每个数据点处的完整超弹性应变能密度 W 通过以下方式计算 ng

$$W = \int_{\mathbf{I}}^{\mathbf{C}} \widetilde{\mathbf{S}}_{\mathrm{intact}} : \frac{1}{2}\,\mathrm{d}\mathbf{C}. \quad (28)$$

在数值计算中，采用梯形法则进行积分，该方法兼顾简便性与准确性，尤其适用于应力张量和变形张量以较精细的间隔采样的情况。利用式（28），针对 $\mathcal{D}$ 中的每个 C^i 计算一个 W（即 $i \in [1, N]$ 对应的 W^i），从而构建第二阶段模型的输入数据集。每次积分计算均使用从 C^1 =I 到 C^i 的完整离散变形状态序列。

随后，通过求解线性关系（见式（12））确定每个数据点处的应力折减因子：

$$\mathbf{S} = \chi\widetilde{\mathbf{S}}_{\mathrm{intact}}, \quad (29)$$

将其表示为向量化形式后，可得到以下线性方程组：

$$\underbrace{\mathrm{vec}(\widetilde{\mathbf{S}}_{\mathrm{intact}})}_{A}\ \underbrace{\chi}_{x} = \underbrace{\mathrm{vec}(\mathbf{S})}_{b}. \quad (30)$$

该函 q数通过最小二乘 q平方最小化求解：$\min_{\chi} \|Ax-b\|^2$.
使用在每个训练数据点处计算得到的 W 和 χ，可构建一个替代训练数据集，

$$\mathcal{D}^*_{\mathrm{dam}} = \{W^i, \chi^i\}_{i=1}^N, \tag{31}$$

由此构建第三个高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{dam}$： $W \mapsto \chi$ （式（17））。与第一阶段高斯过程回归模型不同，第二阶段模型是一个受约束的高斯过程回归器，它明确纳入了基于物理的约束，以确保符合实际的损伤演化行为。

3.3.2. 用于损伤建模的受约束高斯过程回归

为确保物理上可容许的损伤演化，应力折减因子 $\mathcal{M}_{dam}$ 的高斯过程回归模型采用受约束超参数优化策略进行训练，该策略强制满足三个基本物理要求：（i）应力折减因子的非负性；（ii）损伤累积的单调性；以及（iii）在大应变下（即较大的 W 下）材料完全失效。不同于采用标准最小负边际对数似然估计进行训练的第一阶段模型，第二阶段模型通过对在选定约束点处评估的负边际对数似然实施基于惩罚的正则化来纳入这些约束。

1. 应力折减因子的非负性：物理可容许性要求应力折减因子满足

$$\chi(W) \geq 0 \quad \forall W. \tag{32}$$

为施加这一条件，在一组约束输入处引入非负性惩罚项，即选取仅用于约束施加的完整应变能密度值：

$$\mathcal{D}_{\mathrm{cons}} = \{W_c^p\}_{p=1}^{N_c}. \tag{33}$$

通过以下二次惩罚项对非负性违背进行惩罚：

$$\mathcal{P}_{\mathrm{nn}}(\boldsymbol{\theta}) = \Lambda_{\mathrm{nn}} \sum_{p=1}^{N_c} \left[\min\left(0, \mathbb{E}\left[\chi(W_c^p)\right]\right)\right]^2, \tag{34}$$

其中， $\mathbb{E}\left[\chi(W_c^p)\right]$ 表示在约束点处计算得到的高斯过程回归预测的后验均值， Λ_{nn} 为用户定义的惩罚权重。

2. 应力折减因子的单调性：为确保损伤不可逆累积，应力折减因子必须是完整超弹性应变能密度的单调递减函数（即非递增函数）：

$$\frac{d\chi}{dW} \leq 0. \tag{35}$$

由于高斯过程的导数本身也是高斯过程，因此可通过协方差核的导数解析地计算导数 $\frac{d\chi}{dW}$。具体而言，对于零均值高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{dam}$，有 [82]

$$\chi(W) \sim \mathcal{GP}\left(0, k(W, W')\right) \implies \frac{d\chi}{dW} \sim \mathcal{GP}\left(0, \frac{\partial^2 k(W, W')}{\partial W \partial W'}\right). \tag{36}$$

约束点处导数的后验均值 W_c^p 由 [82]给出：

$$\mathbb{E}\left[\left.\frac{\partial \chi}{\partial W}\right|_{W=W_c^p}\right] = \frac{\partial \mathbf{K}(\boldsymbol{W}, W_c^p)^{\mathrm{T}}}{\partial W'} \mathbf{K}(\boldsymbol{W}, \boldsymbol{W})^{-1} \boldsymbol{\chi}, \tag{37}$$

其中， $\boldsymbol{W} = [W^1, \ldots, W^N]^{\mathrm{T}}$ 表示数据集$\mathcal{D}^*_{\mathrm{dam}}$中所有第二阶段训练输入组成的向量， $\boldsymbol{\chi} = [\chi(W^1) \ldots, \chi(W^N)]^{\mathrm{T}} = [\chi^1, \ldots, \chi^N]^{\mathrm{T}}$ 是相应的训练输出。这里， $k(\cdot,\cdot)$表示标量协方差核， $\mathbf{K}(\cdot,\cdot)$表示相应的 Gram矩阵。对于本文使用的 Mat´ern 5/2 核 $k(W, W')$（式 (23)），其核导数为：

$$\frac{\partial k(W, W')}{\partial W'} = \sigma_f^2 \left(\frac{5(W - W')}{3\ell^2}\right) \left(1 + \frac{\sqrt{5}r}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5}r}{\ell}\right), \tag{38}$$

其中 $r = |W - W'|$。
为抑制违反单调性的情况，对正导数值（在 $\mathcal{D}_{\text{cons}}$ 中的数据点处计算）施加二次惩罚项：

$$\mathcal{P}_{\text{mono}}(\boldsymbol{\theta}) = \Lambda_{\text{mono}} \sum_{p=1}^{N_c} \left[\min \left(0, -\mathbb{E} \left[\frac{\partial \chi}{\partial W} \Big|_{W=W_c^p} \right] \right) \right]^2, \tag{39}$$

其中， Λ_{mono} 是用户定义的惩罚权重。该公式确保预期损伤演化单调衰减，同时保持数值稳健性，并兼容标准优化算法。

3. 大应变下的完全失效：为表示材料失效，当完整超弹性应变能密度增大时，应力折减因子必须渐近趋于零：

$$\lim_{W \to \infty} \chi(W) = 0. \tag{40}$$

该行为并非通过解析方式强制实现，而是通过数据增强纳入其中。具体而言，在训练数据集 $\mathcal{D}^*_{\text{dam}}$ 中的 $W \in [aW_{\text{peak}}, bW_{\text{peak}}]$ 范围内引入额外的人工数据点，其中 a 和 b （$b > a > 1$）为可调常数， W_{peak} 是数据增强前原始数据集 $\mathcal{D}^*_{\text{dam}}$ 中完整超弹性应变能密度的最大值。在这些人工数据点处，规定 χ（W） $= 0$。

结合似然项与基于惩罚项的约束，第二阶段高斯过程回归超参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的最终优化问题表述如下：

$$\widetilde{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}^\star} \left[-\log\, p(\boldsymbol{\chi}|\boldsymbol{W}, \boldsymbol{\theta}) + \mathcal{P}_{\text{nn}}(\boldsymbol{\theta}) + \mathcal{P}_{\text{mono}}(\boldsymbol{\theta}) \right], \tag{41}$$

其中，增强数据集隐式地满足完全失效约束。该约束优化问题使用 SciPy库中的 L-BFGS-B算法求解 [81]。

训练完成后，三个高斯过程回归模型——$\mathcal{M}_{vol}$、 $\mathcal{M}_{iso}$ 和 $\mathcal{M}_{dam}$——共同构成完整的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型。对于任意变形张量 C，阶段 I 模型 $\mathcal{M}_{vol}$ 和 $\mathcal{M}_{iso}$ 预测体积和等容超弹性响应函数 ζ、 Γ_1 和 Γ_2，这些函数用于重构完整应力响应以及相应的完整超弹性应变能密度。随后，第二阶段模型 $\mathcal{M}_{dam}$ 预测应力折减因子 χ的演化，从而捕捉材料的渐进退化与失效。将预测的响应函数与应力折减因子的演化结合起来，即可利用式(18)预测完整的应力-应变响应。

3.4. 所提出的框架满足的基于物理的约束

如 Tadmor等人 [83]所全面讨论的，所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型天然满足连续介质本构模型所需的若干基本物理原理。这些约束总结如下：

- 决定性原理：该模型建立了输入变形张量 C 与输出应力张量 S 之间的确定性映射。对于任意给定的 C，模型均通过式(18)预测唯一且可重复的应力响应。

- 局部作用原理：该模型使用由局部变形张量 C 导出的应变不变量 J、 I_1和 I_2 。因此，材料点处的应力（式(18)）仅取决于局部变形，而不受相邻点的影响。

- 角动量平衡：由于张量基分量（式(13)）是对称的，且应力张量表示为它们的线性组合（式(18)），因此第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量 S 的对称性自动得到满足，即 $\mathsf{S} = \mathsf{S}^{\mathrm{T}}$，从而满足局部角动量平衡。

- 材料坐标系无差异性（客观性）：由于 S 和 C 均为与参考构形相关的客观张量，因此在叠加刚体运动时保持不变，从而确保材料坐标系无差异性。换言之，$\mathsf{S}(\mathsf{C}) = \mathsf{R}^T\mathsf{S}(\mathsf{R}\mathsf{C}\mathsf{R}^T)\mathsf{R} \quad \forall \mathsf{R} \in SO(3)$，其中 $SO(3)$表示三维正旋转的特殊正交群。。

- 各向同性材料对称性：各向同性直接源于式（6）中的广义本构公式-tion，该公式仅取决于 C 的各向同性不变量： J、 I_1 和 I_2。

• 无应力参考状态（归一化条件）：如阶段 I（第 3.2 节）所述，通过在训练数据集中显式纳入对应于零应变和零应力的数据点（$\mathbf{C} = \mathbf{I}$，$\mathbf{S} = \mathbf{0}$），即可确保未变形构型处于无应力状态。由于采用较小金块噪声值的高斯过程回归具有精确推断性质，训练后的模型能够在参考状态下精确恢复零应力。

• 热力学一致性：阶段 I 学得的完整（未受损）应力响应本质上满足热力学一致性，因为它是通过对完整超弹性应变能密度 W 关于$\mathbf{C}$ 求导得到的（式 (5)），符合 Coleman–Noll 程序 [84]。正如阶段 II（第 3.3 节）所强制实施的，应力折减因子 $\chi(W)$ 还受到约束，必须是 W的非负单调递减函数，即 $\chi \geq 0$ 且 $\frac{d\chi}{dW} \leq 0$。这确保系统所获得的机械功要么以弹性形式储存（直至达到饱和极限），要么通过内部损伤耗散，绝不会导致能量自发产生。在最大观测值 W 之外增加的合成数据点进一步强制满足渐近条件 $\lim_{W\to\infty} \chi(W) = 0$，表示材料完全失效和内部退化达到最大程度。

$\chi(W)$ 的单调衰减会使材料随着变形增加而逐渐软化，表现为材料切线刚度降低。超过峰值载荷后，应力-应变响应可能呈现负斜率，反映材料不稳定性以及失效的开始。在此状态下，局部刚度退化可能导致椭圆性丧失，其特征是声学张量出现负特征值；声学张量是由四阶切线刚度张量导出的二阶张量。在能量受限的超弹性模型中，这种行为与材料完整性的破坏在物理上是一致的（见 Volokh [53]）。切线刚度张量的完整推导对于数值实现（例如有限元公式）至关重要，详见附录 B。

4. 模型评估方法

本节概述用于评估所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型预测性能的数据集和评估流程。研究包括两部分：(i) 使用已知真实本构行为的数值生成合成数据集进行验证；(ii) 将该模型应用于真实软生物组织单轴拉伸实验数据的建模。除非另有说明，模型比较均采用第 4.3 节定义的基于应力的相对误差指标。

为聚焦于数据集设计和评估流程，此处不列举高斯过程回归训练中的具体实现选择（例如金块噪声取值、用于分离完整状态响应的拉伸截断、约束点选择、惩罚权重，以及人工扩增失效点的范围和数量）；这些设置将在结果与讨论部分（第 5 节）中结合相应的拟合和预测结果报告。

4.1. 使用合成数据进行验证

为系统评估准确性和样本外泛化能力，我们通过结合 Simo–Miehe 体积能量密度函数 [85] 、Mooney–Rivlin 等容应变能量密度函数 [11, 12] 和 Volokh 通用能量限制损伤公式 [5]生成合成数据集。总应变能密度表示为

$$\psi = \frac{\Phi}{m}\left\{\Gamma^*\left(\frac{1}{m}, 0\right) - \Gamma^*\left(\frac{1}{m}, \left(\frac{W}{\Phi}\right)^m\right)\right\}, \tag{42}$$

其中

$$W = U(J) + \bar{W}_{iso}(\bar{I}_1, \bar{I}_2) = \frac{\kappa}{2}\left(\frac{J^2-1}{2} - \ln J\right) + A_{10}(\bar{I}_1 - 3) + A_{01}(\bar{I}_2 - 3), \tag{43}$$

且上不完全伽马函数为

$$\Gamma^*(s, x) = \int_x^\infty t^{s-1}\exp(-t)dt. \tag{44}$$

这里，Φ 是伪失效能，m是软化陡峭度参数，κ 是体积模量，A_{10}、A_{01} 是 Mooney–Rivlin 材料参数。相应的临界失效能为$\psi_f = \frac{\Phi}{m}\Gamma^*\left(\frac{1}{m}, 0\right)$ [5]。

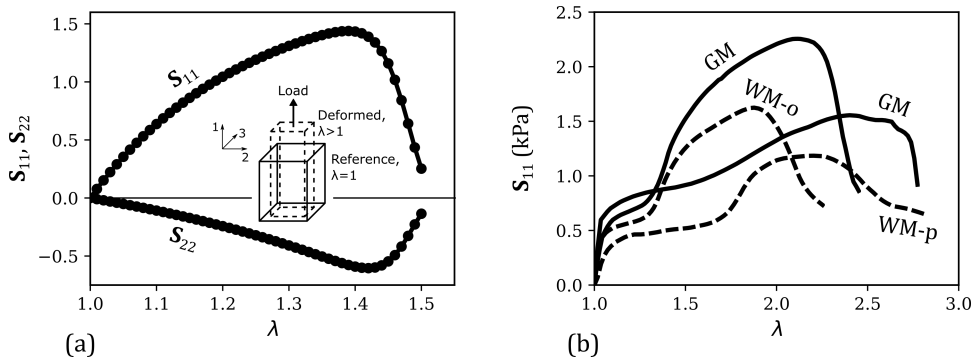

图 2：（a）用于数值验证的合成单轴拉伸数据集中，第二类 Piola–Kirchhoff 应力分量 S_{11} 和 S_{22} 随伸长比 λ 的变化。插图为单轴拉伸变形示意图，展示了参考状态和变形状态，以及 11-加载方向。（b）Franceschini 等人 [86] 报告的脑组织样本的轴向第二类 Piola–Kirchhoff 应力 S_{11} 随 λ 的变化，用于展示模型在真实实验数据中的应用。实线表示丘脑灰质（灰质（GM））；虚线表示来自枕叶（枕叶白质）和顶叶（白质-p）的白质。

训练数据集 $\mathcal{D} = \{\mathbf{C}^i,\mathbf{S}^i\}_{i=1}^N$ （其中 $N = 51$）通过模拟单轴拉伸变形生成，所使用的变形梯度张量如下：

$$\mathbf{F} = \mathrm{diag}\left(\lambda, \lambda^{-\nu}, \lambda^{-\nu}\right), \quad \lambda \in [1, 1.5], \tag{45}$$

其中， λ为轴向伸长比， ν 为泊松比。相应的右柯西–格林张量为

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{F} = \mathrm{diag}\left(\lambda^2, \lambda^{-2\nu}, \lambda^{-2\nu}\right). \tag{46}$$

在本研究中，使用 $\nu = 0.49$近似近不可压缩响应。根据式（11），在每个变形状态下计算第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量 S，得到

$$\mathbf{S} = \exp\left(-\left(\frac{W}{\Phi}\right)^m\right)\left[\frac{\kappa}{2}\left(J^2-1\right)\mathbf{C}^{-1} + J^{-2/3}\left[2(A_{10}+\bar{I}_1 A_{01})\mathrm{Dev}\mathbf{I} - 2A_{01}\mathrm{Dev}\bar{\mathbf{C}}\right]\right], \tag{47}$$

使用参数值 $\Phi = 0.75$、 $m = 10$、 $\kappa = 100$、 $A_{10} = 1$和 $A_{01} = 0.5$。图 2(a) 展示了由此得到的单轴拉伸响应，以非零应力分量 S_{11} 和 S_{22} 表示（其中 S_{22} =S_{33}）。

在使用单轴拉伸数据训练所提出的数据驱动模型后，我们在训练集中未包含的变形模式下评估其样本外泛化能力：(i) $\lambda \in [0.5, 1]$条件下的单轴压缩，以及 (ii) 简单剪切，其特征为

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \gamma & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{48}$$

其中， $\gamma \in [0, 0.8]$ 为剪切应变幅值。

将所提出模型的预测性能与以下模型进行比较：

- 一种基于理论、拟合训练数据的解析本构模型，该模型结合了 neo-Hookean体积应变能密度 [87] 、双参数 Yeoh等体积应变能密度 [88, 89]以及 Volokh 的单参数简化损伤公式 [52]:

$$\psi = \Phi - \Phi\exp\left(-\frac{W}{\Phi}\right), \quad \text{with} \quad W = \frac{\kappa}{2}\left(J-1\right)^2 + C_1(\bar{I}_1 - 3) + C_2(\bar{I}_1 - 3)^2. \tag{49}$$

标定后的模型参数为 $\kappa = 99.28$、 $C_1 = 1.73$、 $C_2 = -0.55$ 和 $\Phi = 3.05$。

- 一个将 C 的分量直接映射到 S 的分量的黑箱高斯过程回归模型：

$$\mathcal{M}_{black-box}: \ \Big[\mathrm{vec}(\mathbf{C})\Big] \mapsto \Big[\mathrm{vec}(\mathbf{S})\Big]. \tag{50}$$

- 一个将不变量（J、I_1、I_2）映射到应力分解（式（12））中缩放响应函数的单阶段（直接）高斯过程回归模型：

$$\mathcal{M}_{direct,vol} : \left[J\right] \mapsto \left[\chi\zeta\right], \tag{51}$$

$$\mathcal{M}_{direct,iso} : \begin{bmatrix}\bar{I}_1\\ \bar{I}_2\end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix}\chi\Gamma_1\\ \chi\Gamma_2\end{bmatrix}. \tag{52}$$

缩放响应函数通过采用所提出框架（式 (12)）中的相同不变量计算和张量基应力分解得到，但直接对完整（未损伤 + 已损伤）数据拟合高斯过程回归映射，并在单一步骤中完成，使学习目标 成为应力表示中出现的乘法系数，即 $\chi\zeta(J)$ 和 $\chi\Gamma_{1,\ 2}(I_1, I_2)$。

Q定量比较采用第 4 节详述的相对误差指标 .3.

4.2. 软组织力学响应的应用

为评估该模型对软组织实验行为的适用性，本文将所提出的模型用于拟合 Franceschini 等人 [86] 报告的脑组织灰质和白质单轴拉伸数据。原始数据集包含单调拉伸至极大伸长比（超过 2）条件下的名义应力（第一类 Piola–Kirchhoff 应力）P_{11} 与伸长比 λ的测量值，呈现出渐进软化并最终失效的特征。图 2(b) 展示了相应的轴向第二类皮奥拉–基尔霍夫应力分量与伸长比之间的响应，该响应由 $\mathrm{S}_{11} = \mathrm{P}_{11}/(1+\lambda)$ 计算得到。

仅使用单轴数据并施加不可压缩约束进行训练。与合成验证不同，实验数据集不包含体积或静水加载信息。因此，按照许多软材料的常见做法，假定材料响应不可压缩（$J = 1$） [90, 91, 92, 93, 94, 95]。在不可压缩条件下，体积贡献由用于施加约束的拉格朗日乘子 p 取代，且应力分解不再涉及独立建模的体积响应函数 ζ（J）。因此，阶段 I 的训练过程进行了修改：仅提取并学习等容响应函数（即阶段 I 仅训练 $\mathcal{M}_{iso}$），随后按照通用框架进行第二阶段损伤学习。

在不可压缩条件下，第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量的形式为（参见式（12 ））

$$\mathbf{S} = -p\,\mathbb{G}_1 + \chi(W)\left[\Gamma_1(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\mathbb{G}_2 + \Gamma_2(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\mathbb{G}_3\right], \tag{53}$$

其中 p 为拉格朗日乘子。对于不可压缩单轴拉伸，

$$\mathbf{F} = \mathrm{diag}\left(\lambda, \lambda^{-1/2}, \lambda^{-1/2}\right), \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{F} = \mathrm{diag}\left(\lambda^2, \lambda^{-1}, \lambda^{-1}\right). \tag{54}$$

施加侧向无牵引条件（$\mathrm{S}_{22} = \mathrm{S}_{33} = 0$）可得到以 Γ_1 和 Γ_2表示的 p 解析表达式：

$$p = \chi(W)\left(\frac{\Gamma_1(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\,(\mathbb{G}_2)_{22} + \Gamma_2(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\,(\mathbb{G}_3)_{22}}{(\mathbb{G}_1)_{22}}\right). \tag{55}$$

代回公式（53）消去 p，得到

$$\begin{aligned}\mathbf{S} &= \chi(W)\,\mathbf{S}_{\mathrm{intact}}\\ &= \chi(W)\left[\Gamma_1(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\left(\mathbb{G}_2 - \frac{(\mathbb{G}_2)_{22}}{(\mathbb{G}_1)_{22}}\mathbb{G}_1\right) + \Gamma_2(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\left(\mathbb{G}_3 - \frac{(\mathbb{G}_3)_{22}}{(\mathbb{G}_1)_{22}}\mathbb{G}_1\right)\right].\end{aligned} \tag{56}$$

在阶段 I 中，使用用户定义的伸长截止值，从实验应力–伸长对中分离出轴向响应的未损伤部分。利用公式（56），通过在每个数据点求解线性最小二乘问题，提取等容响应函数：

$$\underbrace{\left[\mathrm{vec}\left(\mathbb{G}_2 - \tfrac{(\mathbb{G}_2)_{22}}{(\mathbb{G}_1)_{22}}\mathbb{G}_1\right) \quad \mathrm{vec}\left(\mathbb{G}_3 - \tfrac{(\mathbb{G}_3)_{22}}{(\mathbb{G}_1)_{22}}\mathbb{G}_1\right)\right]}_{A}\underbrace{\begin{bmatrix}\Gamma_1\\ \Gamma_2\end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\mathrm{vec}(\mathbf{S}_{\mathrm{intact}})}_{b}. \tag{57}$$

¯ ¯使用未损伤数据集训练等容 GPR 模型 $\mathcal{M}_{iso}$：$(I_1, I_2) \mapsto (\Gamma_1, \Gamma_2)$。随后，在完整的伸长历史上计算完整应变能密度（参见公式（28））：

$$W = \int_1^{\lambda} \left(\widetilde{\mathbf{S}}_{\text{intact}}\right)_{11} d\lambda, \tag{58}$$

⌣其中，$(\cdot)$ 表示第一阶段模型的预测。随后，根据测量应力与完整应力之间的比例关系（式 (30)）得到损伤因子 $\chi(W)$，并按照第 3.3 节所述的一般流程，由第二阶段训练受约束的高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{dam}$： $W \mapsto \chi$ 。

通过使用第 4.3 节定义的相对误差指标，直接将模型预测与实验应力–伸长数据进行比较，评估所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型的预测性能。与前文的合成数据验证研究不同，后者针对一系列变形模式，对其他模型进行了系统的比较基准测试；本节的目的并非进行比较基准测试，而是展示所提出的框架在真实、含噪且具有生物异质性的软组织数据上的实际适用性。模型仅使用现有的单轴拉伸测量数据进行训练和评估，并从拟合精度以及所推断的弹性–损伤分解的物理相关性与可解释性两方面阐释所得预测结果。

4.3. 模型评估指标

为定量评估模型性能，使用预测的第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量与参考第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量的弗罗贝尼乌斯范数，计算每个数据点的百分比相对误差：

$$e_i = 100 \times \frac{\|\widetilde{\mathbf{S}}_i - \mathbf{S}_i^{\text{true}}\|_F}{\|\mathbf{S}_i^{\text{true}}\|_F}, \tag{59}$$

~其中，$\|\cdot\|_F$ 表示弗罗贝尼乌斯范数，S_i 是模型预测值，$\mathrm{S}_i^{\text{true}}$是参考应力张量（合成真实值或实验推导应力）。对于合成数据集，分别报告训练变形模式（单轴拉伸）和样本外变形模式（单轴压缩和简单剪切）下的误差。对于实验数据集，评估仅限于可用的单轴拉伸范围。

5. 结果与讨论

5.1. 合成力学测试数据下的模型性能

5.1.1. 分布内精度：单轴拉伸

我们首先使用第 4.1 节所述的合成单轴拉伸数据集，考察所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型在分布内的预测性能。由于底层本构响应是精确已知的，该基准测试可严格比较模型预测与完整状态及损伤主导区间内的真实行为。

训练设置与实现方案。合成训练数据集包含在伸长范围 $\lambda \in [1, 1.5]$ 内均匀采样的 $N = 51$ 个变形状态。如第 3.2 节所述，通过伸长截止值 $\lambda = 1.25$ 提取阶段 I 训练所需的完整（未损伤）响应部分。此选择确保体积响应函数和等容响应函数仅根据未损伤区间进行学习，同时涵盖足够丰富的变形状态范围。

第二阶段损伤学习遵循第 3.3 节详述的约束高斯过程回归框架。在应变能范围 $W \in [0.6, 1.25]$ 内选取一组 $N_c = 30$ 个约束点（见式 (33)），并在这些点上对减应力折减因子 $\chi(W)$ 施加单调性和非负性约束，其对应区间约为 $0.8W_{\text{peak}} \le W \le 1.7W_{\text{peak}}$。该区间覆盖 $\chi(W)$ 从 1 快速趋近于 0 的区域，因此对稳定损伤演化至关重要。若不施加这些约束，推断得到的 $\chi(W)$ 可能出现非物理行为，例如在趋近于 0 之前变为负值或局部增大。第 5.1.4 节将进一步考察这些约束的作用。

非负性和单调性惩罚的权重均为 $\Lambda_{\text{nn}} = \Lambda_{\text{mono}} = 10^3$ （式（34）和式（39））。通过数据增强引入人工数据点，在 $W \in [1.3W_{\text{peak}}, 2.6W_{\text{peak}}]$ 范围内设置 $\chi = 0$ （即第 3.3.2 节符号中的 $a = 1.3$ 和 $b = 2.6$），从而确保在较大的无损应变能密度下完全失效。

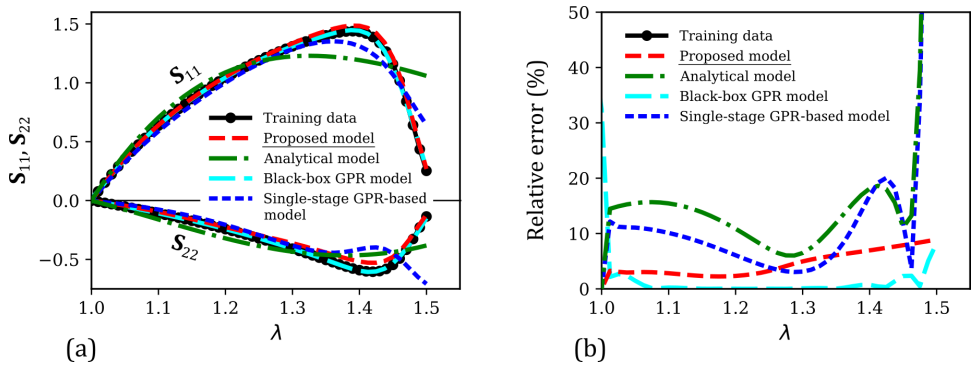

图 3：使用合成数据在单轴拉伸下的分布内模型性能。（a）训练范围内轴向和横向第二类 Piola–Kirchhoff 应力分量 S_{11} 和 S_{22}，随伸长比 λ 的变化，对比所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型与解析本构模型、黑箱高斯过程回归模型和单阶段（直接）高斯过程回归模型。（b）相应的百分比相对误差随伸长比的变化，该误差使用应力张量的弗罗贝尼乌斯范数计算。

最后，为平衡数值条件性和保真度，针对每个高斯过程回归模型分别选择块金参数 α （式（23））。对于体积模型 $\mathcal{M}_{vol}$，在无应力参考状态下赋值 $\alpha = 10^{-5}$，其余训练点则使用 $\alpha = 10^{-2}$。对于等容模型 $\mathcal{M}_{iso}$，所有训练点均采用较大的块金 $\alpha = 10^{0}$，以增强数值稳定性并减轻双输出回归中的过拟合。对于损伤模型 $\mathcal{M}_{dam}$，所有训练点均使用 $\alpha = 10^{-4}$。

为确保模型比较的一致性，也为基线数据驱动模型指定了块金参数。黑箱高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{black\text{-}box}$ 在所有训练点均采用统一的块金值 $\alpha = 10^{-2}$。对于单阶段（直接）高斯过程回归模型，体积映射和等容映射$\mathcal{M}_{direct,vol}$ 以及 $\mathcal{M}_{direct,iso}$采用与其在所提出框架中对应的阶段 I 映射相同的块金值，即在无应力参考状态下为 $\alpha = 10^{-5}$，在其他位置为 $\alpha = 10^{-2}$，对于$\mathcal{M}_{direct,vol}$；而对于 $\mathcal{M}_{direct,iso}$，所有训练点均采用 $\alpha = 10^{0}$。这一选择确保了模型性能比较的公平性和一致性。

应力–伸长率预测与误差分析。图3(a–b)共同比较了四种模型在训练范围内随伸长比变化所预测的轴向和横向第二类 Piola–Kirchhoff 应力分量，以及相应的逐点百分比相对误差（式（59））：(i) 所提出的两阶段物理信息高斯过程回归模型，(ii) 式（49）中的解析本构模型，(iii) 式（50）中的黑箱高斯过程回归模型，以及 (iv) 式（51）和（52）中的单阶段（直接）高斯过程回归模型，该模型将不变量直接映射为缩放响应函数。

在未损伤阶段（$\lambda \lesssim 1.25$），所有数据驱动模型都能以较小误差再现真实应力–伸长率响应，这一点从图3(a)中曲线高度重合以及图3(b)中相对误差始终较低可以看出。随着响应转入损伤主导区间，各模型之间开始显现明显差异。黑箱高斯过程回归模型在整个伸长范围内几乎能够精确插值应力–伸长数据，因此总体上逐点误差最小。如图3(b)所示，除参考状态附近外，黑箱模型的相对误差始终接近于零。这种较高的拟合精度是预期之中的，因为黑箱模型将变形张量分量直接映射为应力分量，而无需借助响应函数或损伤变量等中间表示。在单轴拉伸条件下，输入空间和输出空间的有效维数都较低（分别仅有两个独立的变形分量和应力分量），因此，在这一特定的分布内情形中，所提出框架的降维和基于物理的分解优势并未转化为更高的插值精度。

相比之下，所提出的两阶段模型引入了完整超弹性响应与损伤演化之间的中间分解。尽管与黑箱方法相比，这种结构在纯插值精度方面略有局限，但它为材料响应提供了具有物理可解释性且热力学可容许的表示。如图3(a)所示，这表现为与真实应力响应之间的微小偏差，而图3(b)中相对误差的小幅增加也反映了这一点。尽管如此，所提出的模型仍能以高保真度捕捉非线性弹性和软化行为。

重要的是，所提出的模型显著优于解析本构模型，后者的固定函数形式限制了其捕捉从完整状态行为到渐进

软化的非线性转变的能力。单阶段GPR模型在峰值区域和峰后区域附近也表现出明显偏差；在这些区域，响应变得高度非线性且由损伤主导，因此直接映射难以表征不断演化的本构行为。这些差异在图3(a)中表现为对应力响应的低估或过度平滑，并直接反映在图3(b)中较大的相对误差尖峰上。

表1总结了训练范围内的平均百分比相对误差和最大百分比相对误差。虽然黑箱高斯过程回归模型的平均误差最小，但其相对较高的最大误差并不意味着它在损伤阶段表现不佳；相反，该误差集中在无应力参考构型附近，此处相对误差指标的分母非常小，即使绝对偏差很小也会被放大。总体而言，所提出的两阶段模型在响应中完整和损伤主导的部分均保持了较低且稳定的误差，其表现显著优于解析模型和单阶段高斯过程回归模型，同时保留了具有物理可解释性的结构。尽管在单轴拉伸条件下，其纯插值精度不及黑箱高斯过程回归模型，但在灵活性与物理结构之间实现了更好的平衡。如下文第5.1.3节所示，这种平衡对于在样本外变形模式下获得稳健且具有物理意义的预测至关重要；在这些模式下，纯数据驱动的黑箱模型无法实现良好的泛化。

5.1.2. 过程层面解释：所提出的两阶段模型

除了预测准确性之外，所提出的框架的一项关键目标是通过明确区分弹性响应与渐进损伤，对材料行为提供具有物理可解释性的描述。图4展示了合成单轴拉伸数据集中的这一过程级分解，并突出说明两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型如何恢复具有意义的内部变量，而这些变量在其他数据驱动方法中并不存在。

完整弹性与损伤效应的分离。图4(a)比较了训练后的阶段 I 高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{vol}$ 和 $\mathcal{M}_{iso}$ 根据式 (27) 得到的预测完整（未损伤）第二类 Piola–Kirchhoff 应力 $\mathrm{S}_{\mathrm{intact}}$ 的轴向和横向$\tilde{}$分量，与完整两阶段模型根据式(18) 得到的总应力。在未损伤阶段（$\lambda \lesssim 1.25$），完整应力紧密贴合训练数据，证实阶段 I 高斯过程回归模型准确学习了潜在的超弹性响应。随着变形进入损伤主导区间，完整应力继续平稳增加，反映出在不存在损伤时所能获得的外推弹性响应。相比之下，最终应力响应偏离这一完整应力轨迹，并因第二阶段学得的应力折减因子的乘法作用而呈现渐进软化，最终失效。

完整应力响应与总应力响应之间的明显差异表明，所提出的框架实现了弹性与损伤之间清晰、明确的分离。重要的是，这种分离并非通过预先规定的解析形式强加，而是在遵循基本物理约束的同时直接从数据中学习得到。

通过具有物理意义的内部变量描述损伤演化。图 4(b) 显示了经训练的第二阶段约束高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{dam}$ 预测的应力折减因子 χ 的演化。推断得到的 χ 与 λ 响应表现出单调、非负的衰减：随着变形增加，其数值从接近 1 逐渐趋近于零。这一行为符合将 χ 解释为材料完整性的标量度量。尽管在材料完好的$\tilde{}$阶段，χ 并不严格等于 1，这是因为用于计算 $\mathrm{S}_{\mathrm{intact}}$的第一阶段高斯过程回归模型存在微小预测误差，但在损伤起始之前（即在 $\lambda \approx 1.4$之前，对应于轴向应力峰值），其数值仍保持在 1 的约 10% 范围内。关键的是，χ 从未变为负值，在峰后区域也不会增加，否则将表明材料发生了非物理的愈合。

表1：合成数据集中单轴拉伸训练区域内的平均（$\bar{e}$）和最大（e_{max}）相对误差百分比，对比所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型与解析本构模型、黑箱高斯过程回归模型以及单阶段（直接）高斯过程回归模型。误差采用式（59）中定义的相对度量计算。

模型	平均误差，$\bar{e}$ (%)	最大误差，e_{max} (%)
两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型（本研究）	4.52	8.92
解析本构模型（式（49））	21.65	276.71
黑箱高斯过程回归模型（式（50））	1.62	32.44
单阶段（直接）高斯过程回归模型（式（51））	18.20	283.04

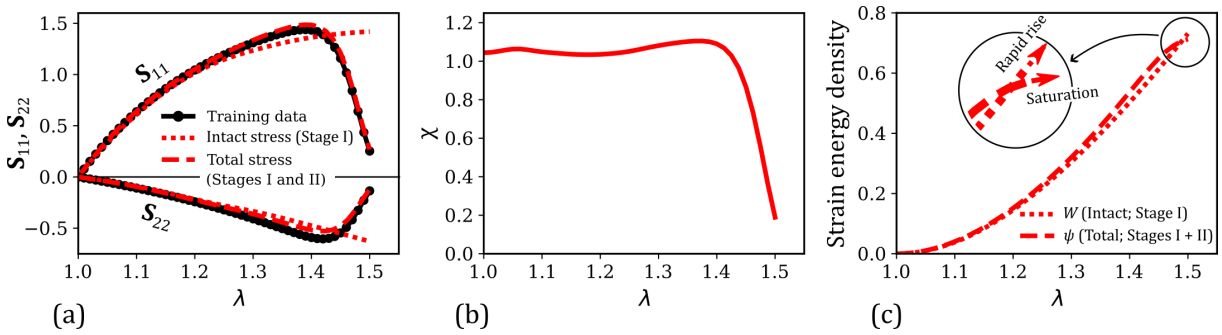

图4：单轴拉伸（合成数据）下两阶段物理信息驱动的基于高斯过程回归的本构模型的过程级解释。(a) 预测的完整应力 $\tilde{\mathrm{S}}_{\mathrm{intact}}$（来自阶段 I 高斯过程回归模型）和完整两阶段模型的总应力 $\tilde{\mathrm{S}}$ 的轴向（11）与横向（22）分量，并与训练数据进行比较。(b) 所提出的两阶段模型预测的应力折减因子χ 随伸长比 λ的变化，呈现出向零单调且非负的衰减。(c) 预测的完整超弹性应变能密度 W（来自阶段 I 高斯过程回归模型）和总应变能密度ψ（来自完整模型）随伸长比的变化，表明在损伤阶段能量趋于饱和，而完整能量仍持续增加。

χ 平滑地衰减至零，反映了渐进损伤累积并最终失效的过程，且没有出现异常振荡或反转。如第5.1.1节简要讨论并在第 5.1.4 节详细考察的那样，这种符合物理规律的演化直接源于第二阶段训练过程中施加的单调性和非负性约束。若没有这些约束，所学习到的损伤演化可能变得不符合物理规律，这凸显了物理信息惩罚形式的必要性。

基于能量的损伤与失效解释。图4(c)通过比较预测的完整超弹性应变能密度 W（式（28））与总应变能密度 ψ，从基于能量的角度阐释了两阶段分解；后者采用与式（28）相同的积分定义 $\tilde{\quad}$ $\tilde{\quad}$，但将完整应力 $\mathrm{S}_{\mathrm{intact}}$ 替换为完整两阶段模型预测的总应力 S。在未损伤阶段，两种能量度量几乎相同，并且都随伸长比呈凸增长，表明损伤效应可以忽略，响应主要由弹性能量储存主导。随着变形超过损伤起始点，两条曲线开始出现分离。完整应变能密度继续以凸增长方式增加，反映出潜在的超弹性响应。相比之下，总应变能密度趋于饱和并接近渐近极限，如图4(c)的插图所清楚展示。

这种饱和行为是能量受限超弹性模型的典型特征，并为材料失效提供了具有物理意义的描述：超过临界阈值的额外机械功会耗散为损伤，而非以弹性形式储存。所提出的两阶段物理信息高斯过程回归模型仅凭数据便能再现这一行为，无需预先设定明确的解析损伤定律；这一事实凸显了该模型发现物理一致的本构结构的能力。

与其他数据驱动模型的比较。图 4 所展示的过程层面的可解释性，在其他数据驱动方法中并不存在。黑箱高斯过程回归模型没有明确的内部损伤变量，因此无法区分弹性响应与损伤诱导软化。同样，单阶段（直接）高斯过程回归模型将弹性与损伤纠缠在单一映射中，因而无法以具有物理意义的方式单独识别损伤起始、发展过程或失效。相比之下，所提出的两阶段模型引入了清晰且可解释的内部变量 χ，该变量以符合能量受限超弹性框架的方式控制损伤演化。

从这个意义上说，所提出的框架结合了解析与数据驱动本构建模各自的优势。与带有能量限制器的经典超弹性模型一样，该框架能够以结构化且可解释的方式描述弹性和损伤。同时，它保留了基于机器学习的方法所具有的灵活性、自动化能力和高拟合精度，无需专家干预或手动选择模型。正如第5.1.3节将要展示的，这些优势并不局限于训练范围，还使模型能够对训练中未包含的变形模式实现稳健且具有物理意义的泛化，进一步彰显了所提出的模型在单一数据驱动本构框架中兼顾可解释性与泛化能力的优势。

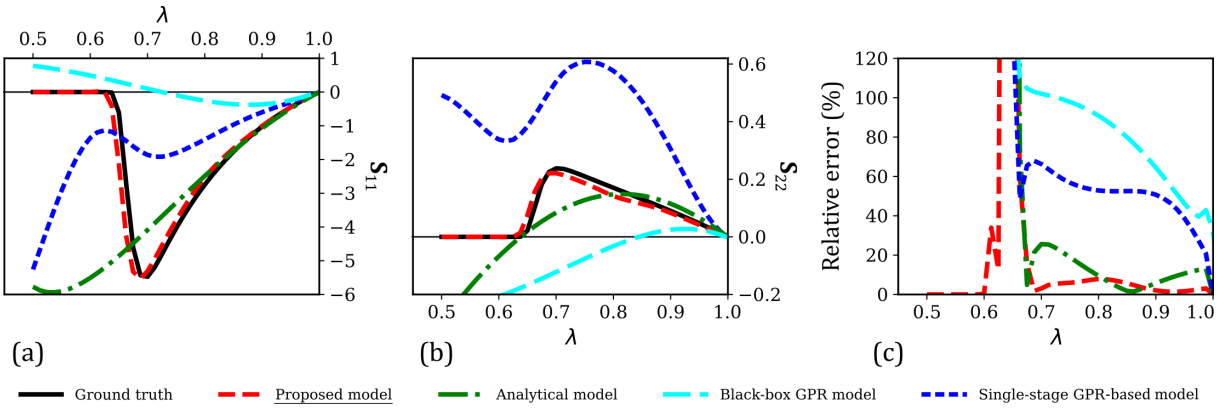

图 5：使用合成数据进行单轴压缩时的样本外泛化。(a) 轴向第二类皮奥拉–基尔霍夫应力分量 S_{11} 和 (b) 侧向应力分量 S_{22} 随伸长比 $\lambda \in [1, 0.5]$的变化。将所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型的预测结果，与解析本构模型、黑箱高斯过程回归模型和单阶段（直接）高斯过程回归模型的预测结果进行比较，并以真实响应为参照。(c) 对应的逐点百分比相对误差随伸长比的变化，该误差使用应力张量的弗罗贝尼乌斯范数计算。

5.1.3. 样本外泛化：压缩与剪切

接下来，我们通过评估所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型在训练中未使用的变形模式下的预测结果，考察其样本外泛化能力；这些变形模式包括单轴压缩和简单剪切（式（48））。本研究的目的并非单纯展示数值精度，而是考察学习得到的本构结构能否在标定范围之外以符合物理规律的方式进行外推。本节所示的所有参考响应均采用与合成数据生成时相同的底层本构模型（即式（47））生成，因此将其视为真实值。

单轴压缩性能。图 5(a–b) 展示了所比较的四种模型在单轴压缩下预测的轴向和侧向第二类 Piola–Kirchhoff 应力分量 S_{11} 和 S_{22}, 随伸长比 $\lambda \in [1, 0.5]$ 的变化。图 5(c) 给出了对应的逐点百分比相对误差。真实响应在 $\lambda = 1$ 至约 $\lambda \approx 0.7$的范围内呈现初始非线性弹性阶段，随后逐渐软化，并在 $\lambda \approx 0.64$ 附近发生完全应力坍塌，表明压缩失效。值得注意的是，响应的弹性部分在压缩时比拉伸时更硬（参见图 3），这体现了拉压不对称性。这是许多软材料的常见特征，源于压缩载荷下的微观结构约束和体积阻力[96]。

所提出的模型准确再现了这一定性行为。如图 5(a–b)所示，压缩过程中，轴向和侧向应力分量均非线性上升，随后平滑衰减至零应力，此后应力始终为零。这一行为符合损伤主导材料的预期演化规律，反映了阶段 I 学得的完整弹性响应与第二阶段学得的单调非负应力折减因子的综合作用。尽管模型仅使用拉伸数据进行训练，但也捕捉到了弹性阶段观察到的拉压不对称性。值得注意的是，这些预测仅使用了来自单轴拉伸的 $N = 51$ 个训练数据点。

解析本构模型同样预测了压缩下先升后降的响应；然而，其侧向应力分量 S_{22} 在 $\lambda \approx 0.64$附近改变了符号。尽管 S_{22} 的幅值相对于 S_{11}, 较小，但这种符号反转在物理上值得质疑，并表明固定函数形式在捕捉多轴损伤效应方面存在局限性。

单阶段（直接）高斯过程回归模型存在更严重的缺陷。其预测的应力起初上升，随后开始软化，但在较大的压缩应变下，响应又再次变硬，导致应力演化呈现非单调性。这种行为不符合物理规律，直接反映出单阶段映射缺少显式的损伤变量和单调性约束。

黑箱高斯过程回归模型在压缩情况下的表现最差。该模型预测的 S_{11} 和 S_{22} 均发生符号反转，尤其值得注意的是，模型在压缩变形下预测出轴向拉应力。此外，模型未预测出失效，且在较大的压缩应变下，应力仍不为零。这些结果凸显了纯数据驱动映射在超出训练范围进行外推时的根本局限性。

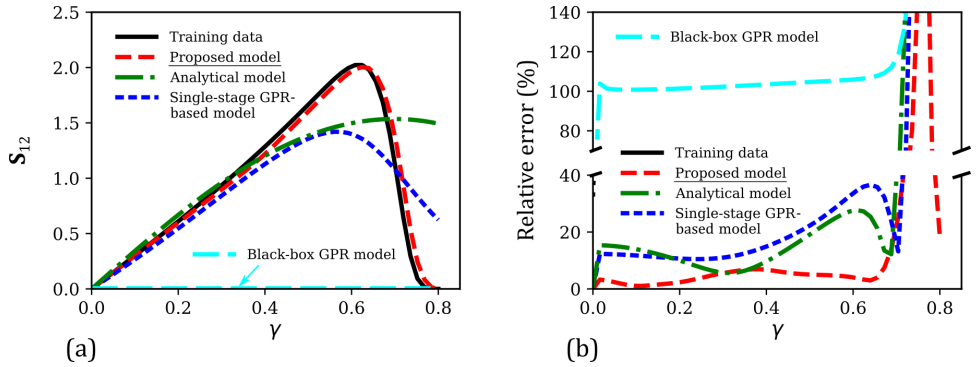

图 6：利用合成数据进行简单剪切时的样本外泛化。（a）剪切应力分量 S_{12}随剪切应变 γ的变化；（b）对应的逐点百分比相对误差随 γ的变化。将所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型与解析本构模型、黑箱高斯过程回归模型和单阶段（直接）高斯过程回归模型进行比较，并以真实响应为基准。

图 5(c) 中的百分比相对误差图证实了这些趋势：尽管此处未着重强调绝对误差的大小——因为该模型仅使用拉伸数据进行校准——但所提出的模型在所有模型中始终表现出最低的误差。所有模型在失效点附近均出现误差峰值，这是意料之中的，因为当应力趋近于零时，相对误差指标的分母也趋近于零（见式 (59)）。

尽管本节未明确展示应变能密度的演化，但图 5(a–b) 中的应力–伸长响应隐含地揭示了模型间重要的能量差异。随着变形的推进，所提出的模型和解析本构模型均表现出总应变能密度明显趋于饱和，这与其明确的能量限制表述相一致。相比之下，黑箱高斯过程回归模型和单阶段高斯过程回归模型均未施加此类能量界限，导致在大压缩应变下出现非物理应力持续或再硬化。重要的是，所提出的模型是唯一能够同时再现正确应力变化趋势和预期的能量受限失效行为的数据驱动方法。

简单剪切下的性能。图 6(a) 展示了对比的四种模型所预测的剪切应力分量 S_{12} 随剪切应变 γ变化的情况，而图 6(b) 则给出了相应的百分比相对误差。简单剪切是一项尤为严苛的泛化测试，因为它涉及变形梯度的非对角分量，而这些分量在单轴拉伸训练数据中完全不存在（$N = 51$ 个数据点）。

尽管如此，所提出的模型仍能准确捕捉真实响应。预测的剪切应力先呈现非线性弹性上升，随后软化并最终发生应力坍塌，与参考解高度吻合。这使得模型在大部分变形范围内的相对误差较低，较大的误差仅出现在应力迅速下降的峰后区。与压缩情况一样，这种应力演化意味着所提出的模型在剪切作用下的总应变能密度有界且趋于饱和，而黑箱高斯过程回归模型和单阶段高斯过程回归模型则不具备这种能量一致性。

解析本构模型和单阶段GPR模型均预测出定性上合理的剪切下应力先升后降响应，表明材料在弹性加载后会发生软化并最终失效，且这一过程符合物理规律。尽管它们的峰值大小和软化速率与真实响应有所不同，但这些偏差在此处并不那么重要，因为本研究的目标并非追求定量精度，而是考察模型在未见过的变形模式下是否具有物理合理性。

相比之下，黑箱高斯过程回归模型表现出一种显著的失效模式：对于所有 γ值，它都预测$S_{12} = 0$。这一结果直接源于模型的构建方式。由于该模型仅使用单轴拉伸数据进行训练，而此类数据中的变形张量C和应力张量S均为对角矩阵，因此模型并未获得任何关于非对角分量应如何影响应力响应的信息。因此，模型默认剪切应力为零，导致图6(b)中的相对误差极大。值得注意的是，同一模型在训练范围内是插值精度最高的模型（第5.1.1节），这凸显了插值精度与物理可泛化性之间的脱节。

样本外模型性能评估。综合压缩和剪切结果可以看出，所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型能够稳健地泛化到未用于训练的变形模式。与学习张量分量之间高维

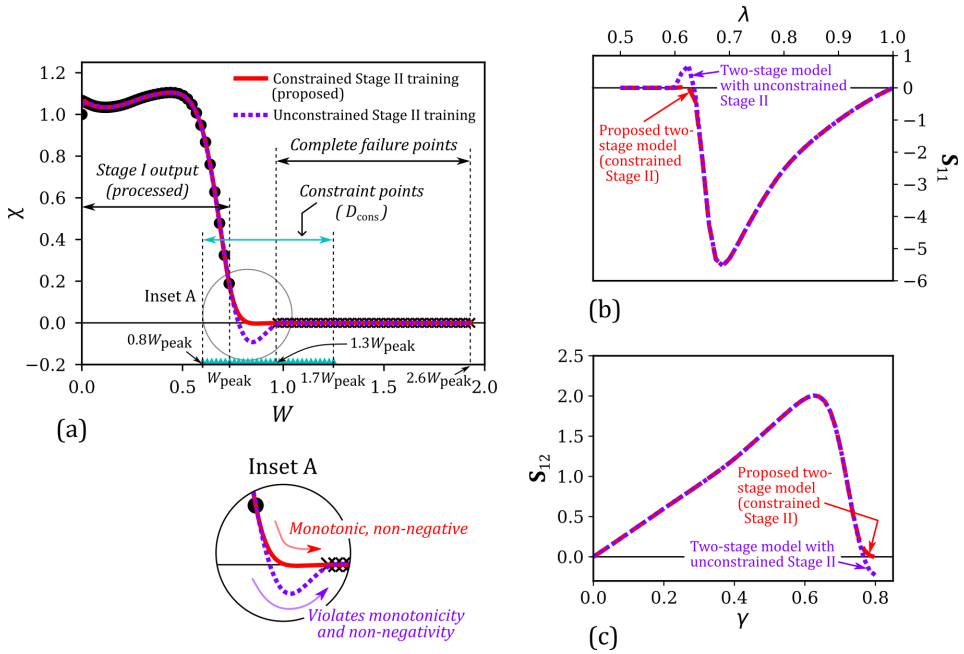

图 7：基于惩罚项的约束优化在第二阶段损伤学习中的作用。(a) 学得的应力折减因子 $\chi(W)$ 随完整超弹性应变能密度 W 的变化，对比所提出的框架在第二阶段约束训练下的结果与采用其他方面完全相同但未施加约束训练的框架。黑色标记表示经处理的第一阶段输出（$\mathcal{D}^*_{\mathrm{dam}}$，增强前），青色标记表示约束点 $\mathcal{D}_{\mathrm{cons}}$，并在较大的 W 处添加人工完全失效点（$\chi = 0$）。第二阶段约束训练确保 $\chi(W)$ 单调且非负，而无约束训练会导致非物理行为（插图 A）。(b) 轴向第二类 Piola–Kirchhoff 应力 S_{11} 随压缩伸长比 λ 的变化，以及 (c) 剪切应力分量 S_{12} 随剪切应变 γ 的变化，对比采用第二阶段约束与无约束训练的完整两阶段模型预测结果。

但脆弱映射关系的黑箱模型不同，所提出的框架在降维后的不变量空间中运行，并通过具有物理依据的张量基重构应力。显式的两阶段分解还能够通过单调性、非负性和完全失效约束，直接保证损伤演化符合物理规律。

因此，尽管训练数据中完全不包含压缩和剪切这两种变形模式，所提出的模型仍能在这两种模式下再现正确的定性趋势——弹性加载、损伤起始、软化和失效。值得注意的是，该模型仅使用非常小的训练数据集（$N = 51$）便实现了稳健的泛化，表明尽管它基于机器学习，仍具有很高的数据效率，因此非常适用于大型、多样化数据集鲜少可用的固体力学和材料应用。下一小节第 5.1.4 节将进一步探讨约束优化和基于惩罚项的学习在实现这种稳健性方面的作用。

5.1.4. 基于惩罚项的约束优化在第二阶段学习中的作用

本小节考察在损伤模型 $\mathcal{M}_{\mathrm{dam}}$ （第 3.3 节）的第二阶段训练过程中，基于惩罚项的约束优化所发挥的作用。具体而言，我们比较所提出的两阶段框架——该框架在第二阶段训练中对 stress-reduction factor$\chi(W)$施加单调性和非负性约束——与一个其他方面完全相同、但第二阶段训练不施加此类约束的变体。通过这一比较，可以单独考察约束施加对损伤演化的影响，以及这种影响对训练范围内外应力预测的后果。

约束对学习得到的损伤定律的影响。图 7(a) 展示了第二阶段损伤模型的学习过程及其预测结果。黑色圆形标记对应于用于构建初始损伤数据集 $\mathcal{D}^*_{\mathrm{dam}}$ （式（31））的处理后第一阶段输出，其中，完整应变能密度 W 根据式（28），利用第一阶段模型的完整应力预测计算得到；相应的 χ 值则通过求解式（30）获得。该数据集中的 W 最大值记为 W_{peak}。图中还展示了在 $W \in [1.3W_{\mathrm{peak}},\, 2.6W_{\mathrm{peak}}]$ 至该范围内引入的、具有 $\chi = 0$ 的人工完全失效点，以确保渐近失效。处理后的第一阶段输出与这些人工数据点共同构成用于第二阶段训练的增强数据集。

如前所述，在一组离散的约束点 $\mathcal{D}_{\mathrm{cons}}$ (Eq. (33)) 上，通过基于惩罚函数的优化 (Eq. (41)) 在第二阶段训练期间施加单调性和非负性约束。

这些约束点在图 7(a) 中以青色标记表示，覆盖范围为 $W \in [0.8W_{\text{peak}}, 1.3W_{\text{peak}}]$。该区间对应临界损伤转变区域，在此区域中，$\chi(W)$ 从接近 1 快速下降至接近 0。

图 7(a) 中的红色实线表示使用受约束的第二阶段模型（所提出的框架）得到的预测结果。应力折减因子单调递减，始终非负，并渐近趋于零，体现了渐进损伤累积直至完全失效的过程。放大的插图 A 突出了这一行为。相比之下，紫色虚线表示未采用基于惩罚项的约束训练的同一第二阶段模型（即采用式 (24) 中的标准高斯过程回归优化）。尽管使用了完全相同的数据，无约束训练仍会产生非物理的演化：$\chi(W)$ 变为负值，并在局部增大，最终才回到零。这种行为违反热力学一致性，若不显式施加约束，则无法避免。

对样本外应力预测的影响。图 7(b) 和 7(c) 分别展示了单轴压缩和简单剪切条件下的相应应力预测，并对比了所提出的框架（采用受约束的第二阶段训练）与其他方面完全相同、但采用无约束第二阶段训练的框架。值得注意的是，训练过程中既未使用压缩数据，也未使用剪切数据。

在两种变形模式下，两种框架在弹性阶段和软化初期产生的应力响应几乎相同。然而，随着变形接近失效，两者之间出现了显著差异。所提出的框架预测应力平滑且单调地衰减至零，这与材料完全失效相符。相比之下，不受约束的第二阶段训练会导致失效附近出现应力符号反转和应力部分恢复，表明存在虚假愈合行为。这些非物理响应直接反映了图 7(a) 中观察到的 $\chi(W)$ 无约束演化。

值得注意的是，尽管单调性和非负性约束仅利用拉伸数据施加，但由于其以标量完整应变能密度 W 为基础进行定义，因此在所有变形模式下均持续有效。这凸显了所提出框架的一项关键优势：损伤演化由基于不变量的内部变量控制，而非由特定变形路径的量控制，因此能够一致地外推至未见加载条件。

约束范围的选择及其影响。图 7 中的结果也证明了所选约束点范围 $\mathcal{D}_{\text{cons}}$ 的合理性。通过将约束施加集中在损伤转变区域（$W \in [0.8W_{\text{peak}}, 1.3W_{\text{peak}}]$）附近，所提出的方法能够在最关键的区域确保物理可接受的行为，同时避免对回归问题施加不必要的过度约束。在远宽于此的范围内施加约束，可能会增加计算成本、导致数值病态或造成过度正则化，却无法带来额外的物理效益。

总体而言，这些结果表明，在第二阶段高斯过程回归训练中采用基于惩罚项的约束优化，对于实现热力学一致的损伤演化，以及在训练范围内和样本外均获得具有物理意义的应力预测至关重要。约束形式使所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型在遵循基本物理原理的同时，保留了数据驱动学习的灵活性，因此在提升框架的稳健性和泛化能力方面发挥着核心作用。

5.2. 脑组织力学应用

接下来，我们将所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型应用于 Franceschini 等人报告的脑组织单轴拉伸数据 [86] （图 2(b)）。该应用展示了这一框架在真实且高度非线性的软组织数据中的实用价值，并评估其从有限的实验测量中提取具有物理意义的弹性特征和损伤特征的能力。如第 4.2 节所述，由于本案例缺少体积响应数据（这是软组织力学中的常见局限），我们对第一阶段方案进行了调整，以明确施加不可压缩性约束：仅通过高斯过程回归学习等容模型 $\mathcal{M}_{iso}$，而体积贡献则由确定性的拉格朗日乘子取代，以施加 $J = 1$。第二阶段损伤建模以及对压力折减因子的受约束高斯过程回归学习则保持不变。

训练设置与实现方案。本文考虑四个实验数据集：来自丘脑区域的两个灰质（GM）样本，以及来自不同脑亚结构的两个白质样本——枕叶（WM-o）和顶叶（WM-p）。将每条实验应力–伸长曲线插值到 $N = 101$ 个均匀分布的变形状态。为更好地捕捉测量响应中的局部特征，此处采用的分辨率高于合成数据验证中所用的分辨率（$N = 51$）。

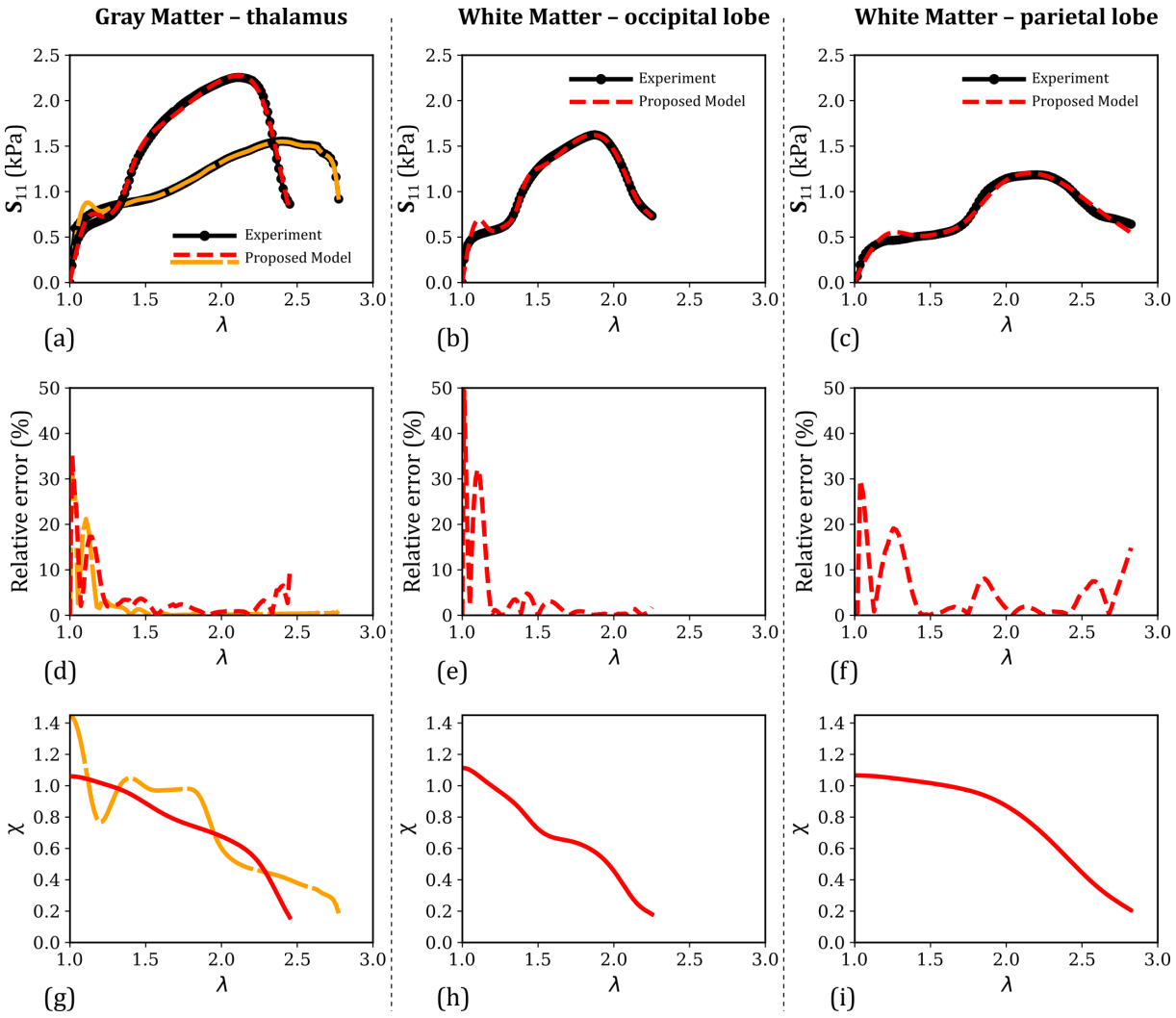

图 8：将所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型应用于脑组织单轴拉伸实验数据（来自 [86]）。(a–c) 丘脑灰质（GM）、枕叶白质（WM-o）和顶叶白质（WM-p）的轴向第二类 Piola–Kirchhoff 应力 S_{11} 与伸长比 λ 的关系，并比较实验测量值与模型预测值。(d–f) 相应的逐点百分比相对误差随伸长比的变化。(g–i) 三种脑组织亚结构的预测应力折减因子 χ 随伸长比的变化。

由于这些数据集中的弹性刚度和损伤起始存在显著差异，因此根据应力–伸长曲线的目视检查，为每种情况单独选取阶段 I 的伸长截止值，以分离完整状态响应。具体而言，两个灰质数据集的截止值分别为 $\lambda = 1.89$ 和 1.38；枕叶白质（WM-o）和白质-p（WM-p）的截止值分别为 $\lambda = 1.37$ 和 1.80。

其余所有实现方案在各数据集之间均保持一致。在第二阶段，在覆盖应变能范围 $W \in [6, 15]$ kPa（等价于 kJ/m^3）的 $N_c = 30$ 个约束点处，对应力折减因子施加单调性和非负性约束，惩罚权重为 $\Lambda_{\mathrm{nn}} = \Lambda_{\mathrm{mono}} = 10^3$。通过在范围 $W \in [1.3W_{\mathrm{peak}}, 2.6W_{\mathrm{peak}}]$内进行数据增强来施加完全失效，这与合成数据验证方案一致。

对于高斯过程回归块金参数，所有训练点的等容模型 $\mathcal{M}_{iso}$ 使用 $\alpha = 0.5$，而损伤模型 $\mathcal{M}_{dam}$ 使用 $\alpha = 2.5 \times 10^{-3}$。这些值经过选择，旨在兼顾拟合精度与数值稳定性，并减轻高度非线性数据导致的过拟合。

应力–伸长率拟合性能。图 8 评估了所提出的模型再现脑组织各亚结构实验应力–伸长率行为的能力。第一行（图 8(a–c)）比较了灰质、枕叶白质和白质-p 的实验测量轴向应力 S_{11} 与模型预测值；第二行（图 8(d–f)）则给出了相应的百分比相对误差随伸长比的变化。

在　　在所有数据集中，所提出的模型都能以高保真度再现整体弹性响应以及最终导致失效的渐进软　t-

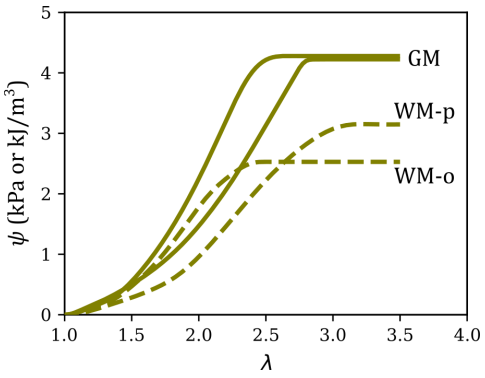

图 9：单轴拉伸下脑组织的总应变能密度 ψ 随伸长比 λ 变化的预测结果，展示了两个灰质（GM）数据集和两个白质亚结构（WM-o 和 WM-p）的结果。预测结果是将训练好的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型外推至实验范围之外得到的。在所有情况下，$\psi(\lambda)$均渐近趋近于一个饱和值，该值确定了与能量受限损伤演化导致材料完全失效相关的临界失效能 ψ_f。

化过程。不过，在应力–伸长响应的早期阶段仍观察到系统性偏差。具体而言，在所有数据集中均出现明显应力跃变的附近，模型高估了实验应力；此处的响应先表现出极高的初始刚度，随后斜率迅速下降，应力则更为缓慢地增加。如图 8(d–f) 所示，这种类屈服转变使该区域的相对误差局部放大。

尽管在阶段 I 中选用较小的块金参数可以减轻这一行为，但研究发现，这样做会导致未损伤阶段出现过拟合，并使模型在完整拉伸截止值附近学习到的应力响应在物理上不允许。具体而言，过小的块金值会导致预测的完整状态响应在截止伸长比处出现虚假应力不连续，这种不连续会传递至总应力预测，从而导致误差增大，并可能在模拟中引发数值问题（例如通过相关的刚度张量）。补充材料 S1 节展示了一项敏感性研究，说明了未损伤阶段的局部插值精度与整体物理稳健性之间的权衡；该研究针对一个具有代表性的脑组织数据集，比较了基于 $\mathcal{M}_{iso}$ 模型在不同块金参数取值下的完整状态和总应力–伸长率预测结果。

对于本研究采用的金块噪声值（ $\alpha = 0.5$ ，对应 $\mathcal{M}_{iso}$），所有组织类型的平均相对误差百分比均较低：2.93%（灰质，两个数据集的平均值）、4.06%（枕叶白质）和5.11%（白质-p）。相应的最大误差分别为33.21%（灰质，平均值）、49.34%（枕叶白质）和29.77%（白质-p）；这些误差集中在参考状态附近，因此对应的绝对应力偏差较小。

损伤演化与内部变量的解读。图8(g–i)分别显示了所提模型推断出的应力折减因子 χ 随灰质、枕叶白质和白质-p的伸长比变化的情况。在所有情况下，随着变形增加， χ 均从接近1的数值逐渐下降至0，反映了渐进损伤累积。与合成示例中观察到的从完整状态行为到失效的相对急剧转变不同（见图4(b)），本例中的 χ（λ）曲线更加平滑、渐进。这一行为与实验应力–伸长响应一致：纯弹性阶段仅占变形范围的一小部分，而在发生完全失效之前，损伤会在较大的伸长比范围内逐步累积，直至伸长比达到极端值（$\lambda \approx 2.25$–2.8）。这种渐进退化与许多合成弹性体的行为形成对比；在这些弹性体中，损伤会在临界拉伸附近开始，并迅速发展至失效 [97]。所提出的两阶段框架能够自然地捕捉这种差异，无需预先规定函数形式，即可直接从实验数据中发现内部损伤变量的渐进演化。

应变能密度饱和与临界失效能的预测。除了预测应力之外，所提出的模型还能够估算总应变能密度 ψ ，更重要的是，还能估算临界失效能 ψ_f——即组织储存机械能的能量极限，超过该极限后，组织将无法再储存机械能。利用针对每个数据集训练的模型，可在扩展的伸长范围内预测 ψ ，最高达到 $\lambda = 3.5$，超出实验范围，以确保捕捉到完全失效。

图 9 展示了两个灰质数据集和两个白质子结构对应的 ψ–λ 曲线。在所有情况下， $\psi(\lambda)$ 均先增大，随后渐近趋于一个常数值，即 ψ_f，在较大的

表 2：采用所提出的两阶段物理信息高斯过程回归模型得到的脑组织亚结构临界失效能 ψ_f 预测值。灰质（GM）的结果报告了两个独立样本及其平均值。白质（WM）的结果对应枕叶（WM-o）和顶叶（WM-p）。

组织类型 / 数据集	临界失效能，ψ_f (kPa)
灰质（GM–1）	4.22
灰质（GM–2）	4.28
灰质（GM，平均值）	**4.25**
白质（枕叶白质）	2.53
白质（白质-p）	3.15
白质（白质，平均值）	**2.84**

伸长比下，这表明完全失效和能量饱和。这种渐近行为直接源于阶段 II 中对应力折减因子 $\chi(W)$ 的受约束的高斯过程回归学习，该学习过程确保了单调性、非负性和完全失效。

对应的 ψ_f 数值汇总于表 2。值得注意的是，尽管两组灰质数据集呈现出显著不同的应力–伸长响应，其失效能却趋于几乎相同的数值（4.22 和 4.28 kPa），灰质失效能的平均值为 4.25 kPa。相比之下，白质（枕叶白质和白质-p）的平均失效能约为 2.84 kPa，约为灰质数值的 66.8%。这一发现表明，与白质相比，灰质对力学失效的抵抗能力显著更强，这可能源于这些脑亚结构已知的结构和组成差异 [90]。尽管仍需更多实验数据来确立稳健的统计趋势，但这些结果凸显了所提出的框架直接从力学测试数据中揭示组织失效相关能量指标的潜力。

6. 总结与结论

本研究提出了一种用于发生渐进损伤与失效的超弹性软材料的物理信息驱动、数据驱动本构建模框架，核心目标是协调物理可解释性、自动化和预测准确性之间相互竞争的需求。针对经典理论驱动的解析模型的局限性——其固定函数形式限制了灵活性——以及纯数据驱动黑箱模型的局限性——其缺乏结构会削弱泛化能力和物理一致性——我们开发了一种两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型，该模型明确区分完整弹性与损伤演化，施加基于物理的约束，并直接从数据中学习这两个部分。

所提出的公式建立在能量受限超弹性框架之上，其中材料失效的特征是应变能密度在有限临界值处达到饱和。借助应力的不可约张量基分解，该框架将本构响应表示为标量超弹性响应函数和一个控制损伤的应力折减因子。在阶段 I，训练高斯过程回归模型以学习体积响应函数和等容响应函数（或在不可压缩条件下仅学习等容响应函数），并通过 Coleman–Noll程序从标量应变能密度推导完整应力，从而确保严格满足确定性原理与局部作用原理、材料坐标系无关性、各向同性、角动量平衡、无应力参考状态以及热力学可容许性。在第二阶段，另一个高斯过程回归模型学习应力折减因子随完整应变能密度的演化，并通过基于惩罚项的约束优化施加额外的物理约束——非负性、单调衰减以及大变形下的完全失效，以确保热力学一致性。

通过使用具有已知真实本构行为的合成数据集进行全面验证，结果表明，所提出的模型在单轴拉伸条件下具有较高的分布内精度，并且在捕捉非线性软化和失效方面显著优于解析模型和单阶段GPR模型。尽管黑箱高斯过程回归模型在训练范围内的插值误差最小，但在外推至未见过的变形模式时却彻底失效。相比之下，所提出的框架对单轴压缩和简单剪切表现出稳健的样本外泛化能力；这些变形模式在训练中并未使用，但框架仍成功再现了物理上预期的应力变化趋势、能量饱和和完全失效。这些结果凸显了两阶段构建的一项关键成果：通过在降维后的不变量空间和响应函数空间中运作，并基于能量考量确保损伤演化符合可容许条件，该框架实现了有意义的泛化

能力，超越了标定范围，而纯数据驱动映射则无法做到。值得注意的是，这种精度和泛化能力是通过相对较小的训练数据集实现的，符合实际实验中可获得的数据规模，凸显了所提出框架的数据效率；这一特性传统上与理论驱动的本构模型相关联。

除了预测准确性之外，该框架还提供了其他机器学习方法所不具备的过程层面可解释性。通过明确地还原完整应力、损伤演化和应变能密度，可以清晰地从物理角度解释刚度逐步退化和失效。具体而言，学习得到的应力折减因子呈现平滑、单调的衰减，没有虚假的振荡；预测的总应变能密度则渐近趋近于有限的饱和值，这与能量限制失效理论相一致。对约束高斯过程回归优化作用的专门研究进一步表明，单调性和非负性约束不仅对热力学一致性至关重要，也能确保模型在训练和测试变形模式下均作出稳定且符合物理规律的预测。

该框架在脑组织单轴拉伸实验数据上的应用，展示了其实际效用。脑组织是一种具有代表性的软生物材料，其特点是数据存在噪声、非线性强且变形模式有限。在不可压缩假设下，该模型准确再现了灰质和白质数据集中的弹性响应和损伤主导响应。重要的是，该框架能够推断内部损伤演化并预测临界失效能，由此揭示灰质的失效能显著高于白质——这是一个具有能量意义的差异，仅凭传统本构拟合难以提取。这些结果凸显了该框架的能力：无需预先指定解析损伤定律，即可从有限的实验数据中提取具有物理意义的材料指标。

综上所述，本研究表明，所提出的两阶段物理信息引导的高斯过程回归模型兼具解析与数据驱动本构建模的优势。与经典能量受限超弹性公式类似，该模型能够以结构化、可解释且符合热力学规律的方式描述弹性和损伤。同时，它保留了现代机器学习方法的自动化、灵活性和高保真度，无需专家驱动的本构形式选择即可实现准确建模。因此，该框架代表了软材料失效数据驱动建模领域的一项重要进展，并为新兴的材料测试 2.0 和数据驱动材料发现范式中的自动化、符合物理规律的本构关系发现提供了可行路径。

与经典能量受限超弹性公式一致，达到临界能量阈值后，可通过历史相关开关参数将卸载过程中的不可逆性纳入模型[98]；在当前两阶段框架中，这一扩展很容易实现，但本文不予考虑，因为本文重点关注单调加载直至失效的过程。

局限性与未来工作。尽管所提出的框架具有诸多优势，但仍存在若干局限，有待未来研究解决。首先，尽管该模型由数据驱动，仍需选择若干可调的建模选项，包括高斯过程回归块金参数、核类型，以及用于分离完整状态响应的截止值。脑组织应用案例（并在补充材料 S1 节中进一步展示）表明，这些选择会同时影响拟合精度和物理可解释性：块金参数过小可能导致过拟合，并在完整拉伸截止值附近产生物理上不允许的行为；而参数过大则可能导致过度平滑，使学得的完整状态响应和损伤演化失去保真度。因此，开发系统性策略，以自动选择这些建模选项、开展敏感性分析并实施自适应正则化，仍是未来工作的重要方向。

其次，尽管两阶段构建和高斯过程回归的使用在一定程度上提升了可解释性，但在固体力学背景下，高斯过程回归参数（如核结构和特征长度尺度）的物理意义尚未得到充分理解。进一步明确这些统计量与底层材料行为之间的联系，将有助于提升该框架的可解释性和稳健性。

最后，包括本文所研究的经典能量受限超弹性公式在内，均预测临界失效能不随变形模式而变化。我们近期的工作 [8] 已表明，通过基于Lode不变量的应变能密度公式引入变形模式依赖性，可以克服这一局限。由于所提出的两阶段框架直接从数据中学习标量能量度量的损伤演化规律，因此可以自然地扩展到此类公式。更广泛地说，将该框架扩展至考虑各向异性、率相关性、循环损伤和热力耦合，是未来研究中自然而

且前景广阔的方向。此外，基于能量受限超弹性领域已有的进展，本文框架还可纳入失效与局部化的数值模拟中；本文尚未对此进行研究，未来将进一步探索。

致谢

本研究得到美国国家科学基金会资助，资助编号 2331294。

附录 A. 能量受限超弹性中的超弹性响应函数和应力折减因子示例

第 2 节介绍的广义应力表示将第二类 Piola–Kirchhoff 应力表示为不可约张量基分量的加权和（式 (12)），其中标量响应函数 $\zeta(J)$、$\Gamma_1(I_1, I_2)$ 和 $\Gamma_2(I_1, I_2)$ 描述体积和等容弹性行为，而应力折减因子 $\chi(W)$ 则控制损伤和失效。

在传统唯象本构模型中，响应函数和应力折减因子均采用显式解析形式，其形式由针对 $\psi(W)$、$U(J)$ 和 $W_{iso}(I_1, I_2)$ 所选的本构方程决定。表 A.1 和表 A.2 汇总了若干常用体积和等容超弹性模型所对应的响应函数，表 A.3 则列出了能量受限损伤公式中采用的代表性应力折减因子解析表达式。这些示例共同说明，经典本构定律能够自然地纳入本文采用的广义不可约张量基框架。

重要的是，所提出的物理信息驱动的数据驱动框架并不局限于这些固定的函数形式。相反，它利用高斯过程回归直接从数据中学习映射 $\zeta(J)$、$\Gamma_1(I_1, I_2)$、$\Gamma_2(I_1, I_2)$ 和 $\chi(W)$，从而克服显式解析表达式灵活性有限的问题，同时保留物理结构、热力学一致性和可解释性。

表 A.1：常用体积能量密度函数 ($U(J)$) 的响应函数 $\zeta(J)$：Simo–Miehe 模型 [85], 体积新胡克模型 [87],和体积 Ogden 模型 [99]。

模型	U	ζ
Simo–Miehe 模型	$\frac{\kappa}{2}\left(\frac{J^2-1}{2} - \ln J\right)$	$\frac{\kappa}{2}\left(J^2-1\right)$
体积 neo-Hookean 模型	$\frac{\kappa}{2}(J-1)^2$	$\kappa J(J-1)$
体积 Ogden 模型	$\frac{\kappa}{\beta^2}\left(\frac{1}{J^\beta} - 1 + \beta \ln J\right)$	$\frac{\kappa}{\beta}\left(1 - \frac{1}{J^\beta}\right)$

表 A.2：常用等容超弹性应变能密度函数（$\bar{W}_{iso}(\bar{I}_1, \bar{I}_2)$）的响应函数 $\Gamma_1(\bar{I}_1, \bar{I}_2)$ 和 $\Gamma_2(\bar{I}_1, \bar{I}_2)$：新胡克模型 [9, 10], Mooney–Rivlin 模型 [11, 12], Yeoh 模型 [89], Gent模型 [14], 和 Gent–Gent 模型 [100]。

模型	$\bar{W}_{iso}$	Γ_1	Γ_2
新胡克模型	$A_{10}\left(\bar{I}_1 - 3\right)$	$2A_{10}$	0
Mooney–Rivlin 模型	$A_{10}\left(\bar{I}_1 - 3\right) + A_{01}\left(\bar{I}_2 - 3\right)$	$2\left(A_{10} + \bar{I}_1 A_{01}\right)$	$-2A_{01}$
Yeoh 模型	$C_1\left(\bar{I}_1 - 3\right) + C_2\left(\bar{I}_1 - 3\right)^2$	$2C_1 + 4C_2\left(\bar{I}_1 - 3\right)$	0
Gent模型	$-\frac{\mu J_m}{2}\ln\left(1 - \frac{\bar{I}_1 - 3}{J_m}\right)$	$\frac{\mu}{1 - \frac{\bar{I}_1 - 3}{J_m}}$	0
Gent–Gent 模型	$-\frac{\mu J_m}{2}\ln\left(1 - \frac{\bar{I}_1 - 3}{J_m}\right) + \frac{3C_2}{2}\ln\left(\frac{\bar{I}_2}{3}\right)$	$\frac{\mu}{1 - \frac{\bar{I}_1 - 3}{J_m}} + 3C_2\frac{\bar{I}_1}{\bar{I}_2}$	$-3\frac{C_2}{\bar{I}_2}$

附录 B. 能量受限超弹性的切线刚度张量

在本附录中，我们推导了本文所研究的一般类能量受限超弹性本构模型的四阶材料切线刚度张量（在物质描述中也称为弹性张量），记为 $\mathbb{C}$。所得表达式与所采用的超弹性响应函数和应力折减因子的具体函数形式无关，

表 A.3：可用的能量受限超弹性模型（$\psi(W)$）的应力折减因子 $\chi(W)$：Volokh 简化损伤模型 [52]，Volokh 通用损伤模型 [5]，以及 Chandrashekar–Upadhyay 模型 [8]。

模型	ψ	χ
Volokh 简化损伤模型	$\Phi - \Phi$指数 $\left(-\frac{W}{\Phi}\right)$	指数 $\left(-\frac{W}{\Phi}\right)$
Volokh 通用损伤模型	$\frac{\Phi}{m}\left\{\Gamma^*\left(\frac{1}{m},0\right) - \Gamma^*\left(\frac{1}{m},\left(\frac{W}{\Phi}\right)^m\right)\right\}$	指数 $\left(-\left(\frac{W}{\Phi}\right)^m\right)$
Chandrashekar–Upadhyay 模型†	$\frac{\Phi^-}{m^-}\Gamma^*\left(\frac{1}{m}0\right) + \beta\left[\frac{\Phi^+}{m^+}\Gamma^*\left(\frac{1}{m^+},0\right) - \frac{\Phi^-}{m^-}\Gamma^*\left(\frac{1}{m^-},0\right)\right] - \frac{\Phi^-}{m^-}\Gamma^*\left(\frac{1}{m^-},\left(\frac{W}{\Phi^-}\right)^{m^-}\right) - \beta\left[\frac{\Phi^+}{m^+}\Gamma^*\left(\frac{1}{m^+},\left(\frac{W}{\Phi^+}\right)^{m^+}\right) - \frac{\Phi^-}{m^-}\Gamma^*\left(\frac{1}{m^-},\left(\frac{W}{\Phi^-}\right)^{m^-}\right)\right]$	$\beta\text{exp}\left(-\left(\frac{W}{\Phi^+}\right)^{m^+}\right) + (1-\beta)\text{exp}\left(-\left(\frac{W}{\Phi^-}\right)^{m^-}\right)$

† 在 Chandrashekar–Upadhyay 模型中，β 是为刻画损伤与失效的变形模式依赖性（例如以拉伸、压缩和剪切为主的加载）而引入的依赖洛德角的权重函数。

并且是　因此适用于解析形式和数据驱动形式，在能量限
的超弹性框架内。在

能量受限超弹性框架中，第二类 Piola–Kirchhoff 应力张 ts
广义　　表示（与式（12）相同）：

$$\mathbf{S} = \chi(W)\left(\zeta(J)\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\Gamma_1(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\Gamma_2(\bar{I}_1,\bar{I}_2)\mathbb{G}_3\right), \tag{A.1}$$

其中，$\mathbb{G}_1 = \mathbf{C}^{-1}$、$\mathbb{G}_2 = \text{Dev(I)}$，且 $\mathbb{G}_3 = \text{Dev}(\bar{\ }\mathbf{C})$，偏量算子的定义为　　s:

$$\text{Dev}(\mathbf{A}) = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\mathbf{A}:\mathbf{C})\mathbf{C}^{-1}. \tag{A.2}$$

四阶材料切线刚度张量定义为 [15]

$$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}}. \tag{A.3}$$

将广义应力表示代入此定义可得

$$\mathbb{C} = 2\frac{\partial}{\partial \mathbf{C}}\left(\chi\left(\zeta\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\Gamma_1\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\Gamma_2\mathbb{G}_3\right)\right). \tag{A.4}$$

为简化记号，在本附录余下部分中省略标量响应函数和应力折减因子对各自自变量（即不变量和应变能密度）的显式函数依赖。此外，我们引入完整（未损伤）应力张量，其定义为完整应变能密度的导数（与式（20）相同），

$$\mathbf{S}_{\text{intact}} := 2\frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} = \zeta\mathbb{G}_1 + J^{-2/3}\Gamma_1\mathbb{G}_2 + J^{-2/3}\Gamma_2\mathbb{G}_3. \tag{A.5}$$

对式 (A.4) 应用链式法则，并利用式 (A.5)，可将切线刚度张量展开为

$$\begin{aligned}
\mathbb{C} = &\frac{d\chi}{dW}\mathbf{S}_{\text{intact}} \otimes \mathbf{S}_{\text{intact}} \\
&+ 2\chi\Bigg[\mathbb{G}_1 \otimes \frac{d\zeta}{dJ}\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} + \zeta\frac{\partial \mathbb{G}_1}{\partial \mathbf{C}} + \Gamma_1\mathbb{G}_2 \otimes \left(-\frac{2}{3}J^{-5/3}\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}}\right) \\
&\quad + J^{-2/3}\mathbb{G}_2 \otimes \left(\frac{\partial \Gamma_1}{\partial \bar{I}_1}\frac{\partial \bar{I}_1}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \Gamma_1}{\partial \bar{I}_2}\frac{\partial \bar{I}_2}{\partial \mathbf{C}}\right) + J^{-2/3}\Gamma_1\frac{\partial \mathbb{G}_2}{\partial \mathbf{C}} \\
&\quad + \Gamma_2\mathbb{G}_3 \otimes \left(-\frac{2}{3}J^{-5/3}\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}}\right) + J^{-2/3}\mathbb{G}_3 \otimes \left(\frac{\partial \Gamma_2}{\partial \bar{I}_1}\frac{\partial \bar{I}_1}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \Gamma_2}{\partial \bar{I}_2}\frac{\partial \bar{I}_2}{\partial \mathbf{C}}\right) \\
&\quad + J^{-2/3}\Gamma_2\frac{\partial \mathbb{G}_3}{\partial \mathbf{C}}\Bigg],
\end{aligned} \tag{A.6}$$

其中，标准并矢积 $\otimes$ 定义为 $(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})_{ijkl}=A_{ij}B_{kl}.$。上述表达式中的第一项源于应力折减因子 $\chi(W)$ 对完整应变能密度 W 的依赖。由于 $\mathbf{S}_{\text{intact}}=2\,\partial W/\partial\mathbf{C}$，这一项表示损伤演化与弹性变形之间的能量耦合。

计算 $\mathbb{C}$ 所需的式 (A.6) 中各导数项的显式表达式如下：

- J 对 $\mathbf{C}$ 的导数：

$$\frac{\partial J}{\partial\mathbf{C}}=\frac{1}{2}J\mathbf{C}^{-1}. \tag{A.7}$$

- $\mathbb{G}_1$ 对 $\mathbf{C}$ 的导数：

$$\frac{\partial\mathbb{G}_1}{\partial\mathbf{C}}=-\mathbf{C}^{-1}\odot\mathbf{C}^{-1}, \tag{A.8}$$

其中，符号 $\odot$ 表示遵循以下规则的张量积：$(\mathbf{A}\odot\mathbf{B})_{ijkl}=\frac{1}{2}(\mathbf{A}_{ik}\mathbf{B}_{jl}+\mathbf{A}_{il}\mathbf{B}_{jk})$ [15]。

- I_1 和 I_2 对 $\bar{\mathbf{C}}$ 的导数：

$$\frac{\partial\bar{I}_1}{\partial\mathbf{C}}=J^{-2/3}\left(\mathbf{I}-\frac{1}{3}(\mathrm{tr}\mathbf{C})\mathbf{C}^{-1}\right), \tag{A.9}$$

$$\frac{\partial\bar{I}_2}{\partial\mathbf{C}}=J^{-4/3}\left[(\mathrm{tr}\mathbf{C})\mathbf{I}-\mathbf{C}-\frac{\mathbf{C}^{-1}}{3}\left((\mathrm{tr}\mathbf{C})^2-\mathrm{tr}(\mathbf{C}^2)\right)\right]. \tag{A.10}$$

- $\mathbb{G}_2$ 对 $\mathbf{C}$ 的导数：

$$\frac{\partial\mathbb{G}_2}{\partial\mathbf{C}}=-\frac{1}{3}\left[\mathbf{C}^{-1}\otimes\mathbf{I}-\mathrm{tr}\mathbf{C}\left(\mathbf{C}^{-1}\odot\mathbf{C}^{-1}\right)\right]. \tag{A.11}$$

- $\mathbb{G}_3$的导数：

$$\frac{\partial\mathbb{G}_3}{\partial\mathbf{C}}=J^{-2/3}\left[\mathbb{I}-\frac{2}{3}\mathbf{C}^{-1}\otimes\mathbf{C}+\frac{1}{3}\mathrm{tr}(\mathbf{C}^2)\left(\mathbf{C}^{-1}\odot\mathbf{C}^{-1}\right)-\frac{1}{3}\mathbf{C}\otimes\mathbf{C}^{-1}+\frac{1}{9}\mathrm{tr}(\mathbf{C}^2)\left(\mathbf{C}^{-1}\otimes\mathbf{C}^{-1}\right)\right], \tag{A.12}$$

其中，$\mathbb{I}$ 表示四阶单位张量（$\mathbb{I}_{ijkl}=\delta_{ik}\delta_{jl}$）。

至此，完成了能量受限超弹性本构模型的材料切线刚度张量 $\mathbb{C}$的推导。该模型以不可约张量基、应变不变量、标量响应函数和应力折减因子表示。相应的空间（欧拉）切线刚度张量$\mathbb{c}$——在空间描述中也称为弹性张量——可通过标准推前运算得到： [15]

$$\mathbb{c}_{ijkl}=J^{-1}F_{ip}F_{jq}F_{kr}F_{ls}\,\mathbb{C}_{pqrs}, \tag{A.13}$$

其中，$\mathbf{F}$为变形梯度。

由于上述切线刚度张量的推导不依赖任何特定的函数形式，因此所得切线算子同样适用于能量受限超弹性框架中的解析形式和数据驱动形式。这为所提出的两阶段物理信息高斯过程回归模型提供了数值实现（例如有限元分析）所需的本构线性化。

参考文献

[1] G. Puglisi, G. Saccomandi, 《橡胶类材料和软组织的多尺度建模：评述》，《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》472 (2187) (2016年) 20160060。doi:10.1098/rspa.2016.0060.

[2] K. Volokh, 《软材料力学》，新加坡施普林格，2016年。doi:https://doi.org/10.1007/978-981-13-8371-7.

[3] S. Avril, 《软组织超弹性与相关反问题》，载于：CISM国际力学科学中心《课程与讲座》，第573卷，施普林格国际出版，2017年，第37–66页。doi:10.1007/978-3-319-45071-1_2.[4] Y. Xiang, D. Zhong, S. Rudykh, H. Zhou, S. Qu, W. Yang, 《软材料物理学基础与基于热力学的本构模型综述》，《应用力学杂志》，美国机械工程师学会汇刊 87 (11) (2020) 1–21。doi:10.1115/1.4047776.[5] K. Volokh，类橡胶材料失效建模，《力学研究通讯》37 (8) (2010) 684–689。doi:10.1016/j.mechrescom.2010.10.006.[6] A. Konale, V. Srivastava，软聚合物断裂建模，《材料力学》206 (4月) (2025年) 105346。doi:10.1016/j.mechmat.2025.105346.[7]S. N. S. H. Chittajallu, A. Richhariya, K. M. Tse, V. Chinthapenta，软组织损伤与破裂建模综述，《生物工程》9 (1) (2022年) 26。doi:10.3390/ bioengineering9010026.[8] Y. C. Chandrashekar, K. Upadhyay, 软材料拉伸-压缩失效不对称性的本构框架 (2025年)。arXiv:2512.12614。URL https://arxiv.org/abs/2512.12614[9] L. R. G. Treloar，长链分子网络的弹性——II，《法拉第学会汇刊》39 (1943年) 241–246。doi:10.1039/TF9433900241.[10] R. Rivlin，各向同性材料的大弹性变形。I. 基本概念，《伦敦皇家学会会刊：A辑，数学与物理科学》240 (822) (1948年) 459–490。doi:10.1098/rsta.1948.0002.[11] M. Mooney，大弹性变形理论，《应用物理学杂志》11 (9) (1940年) 582–592。doi:10.1063/1.1712836.[12] R. Rivlin，各向同性材料的大弹性变形 IV. 一般理论的进一步发展，《伦敦皇家学会会刊：A辑，数学与物理科学》241 (835) (1948年) 379–397。doi:10.1098/rsta.1948.0024.[13] R. W. Ogden，大变形各向同性弹性——不可压缩类橡胶固体理论与实验的相关性，《伦敦皇家学会会刊：A辑，数学与物理科学》326 (1567) (1972年) 565–584。doi:10.1098/rspa.1972.0026.[14] A. N. Gent，一种新的橡胶本构关系，《橡胶化学与技术》69 (1) (1996年) 59–61。doi:10.5254/1.3538357.[15] G. A. Holzapfel，《非线性固体力学：工程连续体方法》，约翰·威立父子出版公司，奇切斯特，英格兰，2000年。[16] K. Upadhyay, G. Subhash, D. Spearot, 各向同性超弹性固体本构方程的基于热力学的稳定性判据，《固体力学与物理学杂志》124 (2019年) 115–142。doi:10.1016/j.jmps.2018.09.038.[17] M. Destrade, G. Saccomandi, I. Sgura，类橡胶材料数学模型的系统拟合，《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》473 (2198) (2017年) 20160811。doi:10.1098/rspa.2016.0811.[18] K. Upadhyay, G. Subhash, D. Spearot，基于基本变形模式的水凝胶超弹性本构建模及其在三维应力状态下的验证，《国际工程科学杂志》154 (2020年) 103314。doi:10.1016/j.ijengsci.2020.103314.[19] T. Beda，超弹性模型构建与参数估计方法：本构模型综述，《欧洲高分子杂志》50 (1) (2014年) 97–108。doi:10.1016/j.eurpolymj. 2013.10.006.[20] C. Wex, S. Arndt, A. Stoll, C. Bruns, Y. Kupriyanova，用于模拟生物组织力学行为的各向同性不可压缩超弹性模型：综述，《生物医学工程》60 (6) (2015年) 577–592。doi:10.1515/bmt-2014-0146.

[21] H. B. Khaniki, M. H. Ghayesh, R. Chin, M. Amabili, 《超弹性结构：力学与生物力学综述》, 《国际非线性力学期刊》148（2022年9月）（2023）104275。doi:10.1016/j.ijnonlinmec.2022.104275.[22]J. N. Fuhg, G. Anantha 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》, 《工程计算方法档案》32（3）（2025年）1841–1883。doi:10.1007/s11831-024-10196-2.[23] S. Kumar, D. M. Kochmann，机器学习能为计算固体力学做些什么，载于:《计算力学的当前趋势与开放问题》，施普林格国际出版，Cham，2022年，第275–285页。doi:10.1007/978-3-030-87312-7_27.[24] G. Chen，循环神经网络（RNN）学习黏弹性本构定律，《计算力学》67（3）（2021年）1009–1019。doi:10.1007/s00466-021-01981-y.[25] S. Tang, Y. Li, H. Qiu, H. Yang, S. Saha, S. Mojumder, W. K. Liu, X. Guo，MAP123-EP：一种用于数值弹塑性分析的基于机理的数据驱动方法，《计算机在应用力学与工程中的方法》364（2020年）112955。doi:10.1016/j.cma.2020.112955.[26] S. Tang, G. Zhang, H. Yang, Y. Li, W. K. Liu, X. Guo, MAP123：一种利用一维数据对三维非线性弹性材料进行建模的数据驱动方法，《计算机在应用力学与工程中的方法》357（2019年）112587。doi:10.1016/j.cma.2019.112587.[27] L. Lu, M. Dao, P. Kumar, U. Ramamurty, G. E. Karniadakis, S. Suresh，通过深度学习从仪器化压痕中提取材料力学性能，《美国国家科学院院刊》117（13）（2020年）7052–7062。doi:10.1073/pnas.1922210117.[28] F. As’ad, P. Avery, C. Farhat，一种用于数据驱动本构建模的力学信息引导人工神经网络方法，《国际工程数值方法期刊》123（12）（2022年）2738–2759。doi:10.1002/nme.6957.[29] A. Ostadrahimi, A. Teimouri, K. Upadhyay, G. Li，多轴循环载荷下可压缩非线性软材料的物理信息数据驱动本构建模，《国际机械科学杂志》312（2025年4月）（2026年）111250。doi:10.1016/j.ijmecsci.2026.111250.[30] M. Peirlinck, J. A. Hurtado, M. K. Rausch, A. B. Tepole, E. Kuhl，软物质系统的通用材料模型子程序，《计算机辅助工程》（0123456789）（2024年）。doi:10. 1007/s00366-024-02031-w.[31] Q. He, D. W. Laurence, C. H. Lee, J. S. Chen, 基于流形学习的软生物组织数据驱动建模，《生物力学杂志》117（2021年）110124。doi:10.1016/j.jbiomech. 2020.110124.[32]K. Linka, M. Hillg¨artner, K. P. Abdolazizi, R. C. Aydin, M. Itskov, C. J. Cyron，本构人工神经网络：一种通过深度学习实现预测性数据驱动本构建模的快速通用方法，《计算物理学杂志》429（2021年）110010。doi: 10.1016/j.jcp.2020.110010.[33] K. A. Kalina, L. Linden, J. Brummund, P. Metsch, M. K¨astner，基于人工神经网络的各向同性超弹性自动本构建模，《计算力学》69（1）（2022年）213–232。doi:10.1007/s00466-021-02090-6.[34] F. Masi, I. Stefanou，Evolution TANN与固体力学中内部变量及演化方程的识别，《固体力学与物理学杂志》174（2022年9月）（2023年）105245。doi:10.1016/j.jmps.2023.105245.[35] M. Flaschel, S. Kumar, L. De Lorenzis，无监督发现可解释的超弹性本构定律，《计算机在应用力学与工程中的方法》381（2021年）113852。doi:10.1016/j.cma.2021.113852.[36] M. Flaschel, S. Kumar, L. De Lorenzis，在无应力数据的情况下发现塑性模型，《npj计算材料》8（1）（2022年）1–10。doi:10.1038/s41524-022-00752-4.

[37] 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，《薄壁结构》205（2025年）112495。doi:https://doi.org/10.1016/j.tws.2024.112495.[38] I. Jeong, M. Cho, H. Chung, D.-N. Kim，基于结合全场数据的物理信息神经网络对材料行为进行数据驱动的非参数识别，《计算机在应用力学与工程中的方法》418（PB）（2024年）116569。doi:10.1016/j.cma.2023.116569.[39] R. Eggersmann, T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, M. Ortiz，无模型数据驱动非弹性，《计算机在应用力学与工程中的方法》350（2019年）81–99。doi:10.1016/j.cma.2019.02.016.[40] T. Kirchdoerfer, M. Ortiz，数据驱动计算力学，《计算机在应用力学与工程中的方法》304（2016年）81–101。doi:10.1016/j.cma.2016.02.001.[41] Z. Yang, C. H. Yu, M. J. Buehler，利用深度学习模型预测层级复合材料中的复杂应力场和应变场，《Science Advances》7（15）（2021年）。doi:10.1126/SCIADV.ABD7416.[42] D. K. Klein, M. Fern´andez, R. J. Martin, P. Neff, O. Weeger，利用神经网络实现多凸各向异性超弹性，《固体力学与物理学杂志》159（2021年6月）（2022年）104703。doi:10.1016/j.jmps.2021.104703.[43] P. Thakolkaran, Y. Guo, S. Saini, M. Peirlinck, B. Alheit, S. Kumar，KAN CAN吗？作为超弹性本构人工神经网络（CAN）的输入凸Kolmogorov-Arnold 网络（KAN），《计算机在应用力学与工程中的方法》443（2025年）。doi:10.1016/j. cma.2025.118089.[44] J. Wang, T. Li, F. Cui, C. Y. Hui, J. Yeo, A. T. Zehnder，利用高斯过程机器学习对本构模型进行元建模，《固体力学与物理学杂志》154（6月）（2021年）104532。doi:10.1016/j.jmps.2021.104532.[45] J. N. Fuhg, M. Marino, N. Bouklas，用于数据驱动本构模型的局部近似高斯过程回归：开发及与神经网络的比较，《计算机在应用力学与工程中的方法》388（2022年）114217。doi:10.1016/j.cma.2021.114217.[46] J. N. Fuhg, N. Bouklas，通过概率机器学习和空间填充采样建立物理信息数据驱动的各向同性与各向异性本构模型，《计算机在应用力学与工程中的方法》394（2022年）114915。doi:10.1016/j.cma.2022.114915.[47] A. L. Frankel, R. E. Jones, L. P. Swiler，超弹性材料的张量基高斯过程模型，《机器学习建模与计算杂志》1（1）（2020年）1–17。doi: 10.1615/jmachlearnmodelcomput.2020033325.[48] M. Liu, L. Liang, W. Sun，一种用于软生物组织的通用物理信息神经网络本构模型，《计算机在应用力学与工程中的方法》372（2020年）113402。doi:10.1016/j.cma.2020.113402.[49] A. Konale, V. Srivastava，一种无需梯度损伤的断裂建模物理信息神经网络：公式、应用与评估，《固体力学与物理学杂志》206（PA）（2026年）106395。doi:10.1016/j.jmps.2025.106395.[50]A. Ostadrahimi, A. Teimouri, K. Upadhyay, G. Li，强非线性黏弹性软材料中的应力软化损伤：一种具有时间–温度耦合的物理信息数据驱动本构模型，《国际塑性杂志》197（2025年12月）（2026年）1–31。doi:10.1016/j.ijplas.2025.104582.[51] K. Upadhyay, J. N. Fuhg, N. Bouklas, K. T. Ramesh，将物理信息数据驱动方法用于本构模型发现及其在应变率敏感软材料中的应用，《计算力学》（2024年6月）。doi:10.1007/s00466-024-02497-x.[52] K. Y. Volokh，用于材料失效建模的软化超弹性，《固体力学与物理学杂志》55（10）（2007年）2237–2264。doi:10.1016/j.jmps.2007.02.012.

[53] K. Volokh，弹性力学中采用能量限制器时的椭圆性丧失，《欧洲力学杂志 A辑：固体》63 (2017年) 36–42。doi:10.1016/j.euromechsol.2016.10.003。[54] S. Abu-Qbeitah、M. Jabareen、K. Y. Volokh，利用材料汇理论研究软材料中的准静态裂纹扩展，《国际机械科学杂志》248 (2022年12月) (2023年) 108160。doi:10.1016/j.ijmecsci.2023.108160。[55] A. Faye、Y. Lev、K. Y. Volokh，局部惯性对软材料动态断裂中裂纹尖端周围区域的影响，《软材料力学》1 (1) (2019年)。doi:10.1007/s42558-019-0004-2。[56] Y. Lev、A. Faye、K. Volokh，类橡胶材料的热弹性变形与失效，《固体力学与物理学杂志》122 (2019年) 538–554。doi:10.1016/j.jmps.2018.09.033。[57] V. Tac、E. Kuhl、A. B. Tepole，内置物理约束的数据驱动连续损伤力学，《极端力学快报》71 (2024年8月) (2024年) 102220。doi:10.1016/j.eml.2024.102220。[58] D. Gaetano、F. Greco、L. Leonetti、A. Pascuzzo，采用高效数据驱动多尺度策略研究各向异性复合结构的失效，《力学》60 (10-11) (2025年) 3235–3256。doi:10.1007/s11012-025-02008-z。[59] D. Liu、X. Shao、X. Fu、C. Chen、K. Elkhodary、S. Tang，数据驱动的非局部损伤力学与壳体断裂，《工程断裂力学》316 (2024年11月) (2025年) 110864。doi: 10.1016/j.engfracmech.2025.110864。[60] C. J. Rojas、J. L. Boldrini、M. L. Bittencourt，利用物理信息神经网络识别损伤相场模型的参数，《理论与应用力学快报》13 (3) (2023年) 100450。doi:10.1016/j.taml.2023.100450。[61] R. Abdusalamov、J. Weise、M. Itskov，通过深度符号回归重新发现Mullins 效应，《国际塑性杂志》179 (2024年6月) (2024年) 104037。doi:10.1016/j.ijplas.2024. 104037。[62] A. Ani、R. Nakka、G. Subhash、J.-F. Molinari、S. A. Ponnusami，机器学习在计算断裂与损伤力学中的应用——现状与展望，《工程断裂力学》332 (2025年9月) (2026年) 111778。doi:10.1016/j.engfracmech.2025.111778。[63] K. Y. Volokh，能量限制器方法在橡胶失效建模中的综述，《橡胶化学与技术》86 (3) (2013年) 470–487。doi:10.5254/rct.13.87948。[64] E. A. Kearsley，注：以平均伸长比表示应变不变量，《流变学杂志》33 (5) (1989年) 757–760。doi:10.1122/1.550063。[65] H. G. Kilian，对大应变网络中应变不变量的解释，《胶体与聚合物科学》263 (1) (1985年) 30–34。doi:10.1007/BF01411245。[66] P. K. Currie，弹性材料应变不变量空间的可达区域，《国际非线性力学期刊》39 (5) (2004年) 833–842。doi:10.1016/S0020-7462(03)00059-3。[67] F. Xing-gui、X. Jin-sheng、C. Xiong、L. Hui、T. Bing-dong，带能量限制器的三元乙丙橡胶超弹性模型及其数值应用，《物理学杂志：会议系列》2235 (1) (2022年) 012088。doi:10.1088/1742-6596/2235/1/012088。[68] P. Mythravaruni、K. Y. Volokh，橡胶支座在剪切与压缩联合作用下的失效，《应用力学杂志》85 (7) (2018年) 1–4。doi:10.1115/1.4040018。[69] P. Mythravaruni、K. Y. Volokh，软固体的不可压缩约束与裂纹方向，《应用力学杂志》86 (10) (2019年10月)。doi:10.1115/1.4044089。[70] A. Pissarenko、M. A. Meyers，皮肤材料科学：分析、表征与建模，《材料科学进展》110 (2020年) 100634。doi:10.1016/j.pmatsci.2019.100634。[71] W. Li、X. Y. Luo，人类与动物皮肤的基于不变量的损伤模型，《生物医学工程年鉴》44 (10) (2016年) 3109–3122。doi:10.1007/s10439-016-1603-9。

[72] K. Volokh，基于软化微观结构双层纤维–基质模型预测动脉失效，《生物力学杂志》41 (2) (2008年) 447–453。doi:10.1016/j.jbiomech.2007. 08.001。[73] K. Volokh，软各向异性材料失效建模及其在动脉中的应用，《生物医学材料力学行为杂志》4 (8) (2011年) 1582–1594。doi:10.1016/j.jmbbm. 2011.01.002。[74]C. Williams、C. Rasmussen，用于回归的高斯过程，载于：D. Touretzky、M. Mozer、M. Hasselmo（编），《神经信息处理系统进展》，第8卷，麻省理工学院出版社，1995年。网址 https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/1995/file/7cce53cf90577442771720a370c3c723-Paper.pdf[75] M. L. Stein，《空间数据插值》，施普林格统计学丛书，施普林格纽约，纽约州纽约市，1999年。doi:10.1007/978-1-4612-1494-6。网址 http://link.springer.com/10.1007/978-1-4612-1494-6[76] B. Mat´ern，《空间变异》，统计学讲义第36卷，施普林格纽约，纽约州纽约市，1986年。doi:10.1007/978-1-4615-7892-5。网址 http://link.springer.com/10.1007/978-1-4615-7892-5[77] L. Laurent、R. Le Riche、B. Soulier、P.-A. Boucard，梯度增强元模型概述及其应用，《工程计算方法档案》26 (1) (2019年) 61–106。doi:10.1007/s11831-017-9226-3。[78] Y. M. Thant、T. Wakamiya、M. Nukunudompanich、K. Kameda、M. Ihara、S. Manzhos，用于预测材料性质的核回归方法：最新进展，《化学物理评论》6 (1) (2025年3月)。doi:10.1063/5.0242118。[79] P. S. Palar、L. Parussini、L. Bregant、K. Shimoyama、L. R. Zuhal，关于双保真度高斯过程回归的核函数，《结构与多学科优化》66 (2) (2023年) 37。doi:10.1007/s00158-023-03487-y。[80] M. Kuss、C. Rasmussen，强化学习中的高斯过程，载于：S. Thrun、L. Saul、B. Sch¨olkopf（编），《神经信息处理系统进展》，第16卷，麻省理工学院出版社，2003年。网址 https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2003/file/7993e11204b215b27694b6f139e34ce8-Paper.pdf[81] P. Virtanen、R. Gommers、T. E. Oliphant、M. Haberland、T. Reddy、D. Cournapeau、E. Burovski、P. Peterson、W. Weckesser、J. Bright、S. J. van der Walt、M. Brett、J. Wilson、K. J. Millman、˙N. Mayorov、A. R. J. Nelson、E. Jones、R. Kern、E. Larson、C. J. Carey、I. Polat、Y. Feng、E. W. Moore、J. VanderPlas、D. Laxalde、J. Perktold、R. Cimrman、I. Henriksen、E. A. Quintero、C. R. Harris、A. M. Archibald、A. H. Ribeiro、F. Pedregosa、P. van Mulbregt，SciPy 1.0 贡献者，SciPy 1.0：Python科学计算的基础算法，《自然·方法》17 (2020年) 261–272。doi:10.1038/s41592-019-0686-2。[82] J. Riihim¨aki、A. Vehtari，带单调性信息的高斯过程，载于：第十三届国际人工智能与统计学会议论文集，第9卷，PMLR，2010年，第645–652页。[83] E. B. Tadmor、R. E. Miller、R. S. Elliott，《连续介质力学与热力学》，剑桥大学出版社，剑桥，2011年。doi:10.1017/CBO9781139017657。[84] G. H¨utter，经典与广义连续介质理论的Coleman–Noll程序，载于：《连续介质力学百科全书》，施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡，2018年，第1–8页。doi:10.1007/978-3-662-53605-6_57-1。网址 http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-53605-6_57-1[85] J. Simo、C. Miehe，有限应变下的关联耦合热塑性：公式、数值分析与实现，《计算机在应用力学与工程中的方法》98 (1) (1992年) 41–104。doi:10.1016/0045-7825(92)90170-O。

[86] G. Franceschini、D. Bigoni、P. Regitnig、G. A. Holzapfel，脑组织的变形方式与填充弹性体相似，并遵循固结理论，《固体力学与物理学杂志》54 (12) (2006) 2592–2620。doi:10.1016/j.jmps.2006.05.004。[87] R. De Rooij、E. Kuhl，脑组织本构建模：当前观点，《应用力学评论》68 (1) (2016) 1–16。doi:10.1115/1.4032436。[88] O. H. Yeoh，炭黑填充硫化橡胶的弹性性质表征，《橡胶化学与技术》63 (5) (1990) 792–805。doi:10.5254/1.3538289。[89] O. H. Yeoh，橡胶应变能函数的几种形式，《橡胶化学与技术》66 (5) (1993) 754–771。doi:10.5254/1.3538343。[90] S. Budday、T. C. Ovaert、G. A. Holzapfel、P. Steinmann、E. Kuhl，大脑的五十个色度：脑组织力学测试与建模综述，《工程计算方法档案》27 (4) (2020) 1187–1230。doi:10.1007/s11831-019-09352-w。[91] Z. Liu、R. Ortigosa、A. J. Gil、J. Bonet，软可压缩与不可压缩固体的大应变本构建模：广义各向同性与各向异性黏弹性，《固体力学与物理学杂志》203 (June) (2025) 106194。doi:10.1016/j.jmps.2025.106194。[92] S. Chockalingam、T. Cohen，不可压缩软固体中的剪切冲击演化，《固体力学与物理学杂志》134 (2020) 103746。doi:10.1016/j.jmps.2019.103746。[93] K. Upadhyay、D. Spearot、G. Subhash，软材料应变率依赖性的经验证拉伸表征，《国际冲击工程学杂志》156 (June) (2021) 103949。doi:10.1016/j.ijimpeng.2021.103949。[94] K. Upadhyay、A. Bhattacharyya、G. Subhash、D. E. Spearot，软聚合物的准静态与高应变率简单剪切表征，《实验力学》59 (5) (2019) 733–747。doi:10.1007/s11340-019-00507-1。[95] K. Upadhyay、G. Subhash、D. Spearot，应变率敏感软材料的黏超弹性本构建模，《固体力学与物理学杂志》135 (2020) 103777。doi:10.1016/j.jmps.2019.103777。[96] Z. Du、G. Zhang、T. Guo、S. Tang、X. Guo，有限应变下的拉压不对称性：理论模型与精确解，《固体力学与物理学杂志》143 (2020) 104084。doi:10.1016/j.jmps.2020.104084。[97] D. E. Hanson、R. L. Martin，橡胶分子在断裂前能伸长多远？单分子聚异戊二烯和聚丁二烯拉伸弹性与失效的从头算研究，《化学物理学杂志》130 (6) (2009) 064903。doi:10.1063/1.3071196。[98] K. Y. Volokh，关于超弹性软化中的不可逆性与耗散，《应用力学杂志》81 (7) (2014) 1–3。doi:10.1115/1.4026853。[99] R. Ogden，《非线性弹性变形》，多佛土木与机械工程丛书，多佛出版社，1997年。URL https://books.google.com/books?id=2u7wCaojfbEC[100] E. Pucci、G. Saccomandi，关于橡胶类材料Gent模型的注记，《橡胶化学与技术》75 (5) (2002) 839–852。doi:10.5254/1.3547687。

一种用于渐进损伤和失效超弹性材料建模的物理信息驱动数据驱动框架

Kshitiz Upadhyay*

明尼苏达大学航空航天工程与力学系，美国明尼苏达州明尼阿波利斯市，邮编55455

补充材料

S1 第一阶段等容高斯过程回归模型中块金参数的影响

本节考察所提出的框架对第一阶段等容 GPR 模型$\mathcal{M}_{iso}$中所用块金参数 α 选择的敏感性。其他所有建模选择，包括核类型、训练数据、完整状态截止伸长以及第二阶段约束损伤学习，均保持不变。

图 S1 比较了针对一个具有代表性的脑组织灰质数据集，采用四个具有代表性的块金值 $\alpha = 10^{-4}$、 10^{-2}、10^{0}和 10^{2},得到的完整状态及总轴向应力–伸长预测。块金值非常小时（$\alpha = 10^{-4}$ 和 10^{-2}），完整状态响应几乎精确地插值训练数据；然而，这种近似插值行为会在完整状态截止伸长处引入虚假应力不连续。该不连续会传递至总应力预测，在物理上不可接受，导致全局误差增大，并且由于相关刚度张量，可能在模拟中引发数值问题。

随着块金参数增大，这些过拟合引起的伪影逐渐减轻。对于 $\alpha = 10^{0}$，完整状态和总应力响应

*通讯作者。电子邮箱：kshitizu@umn.edu

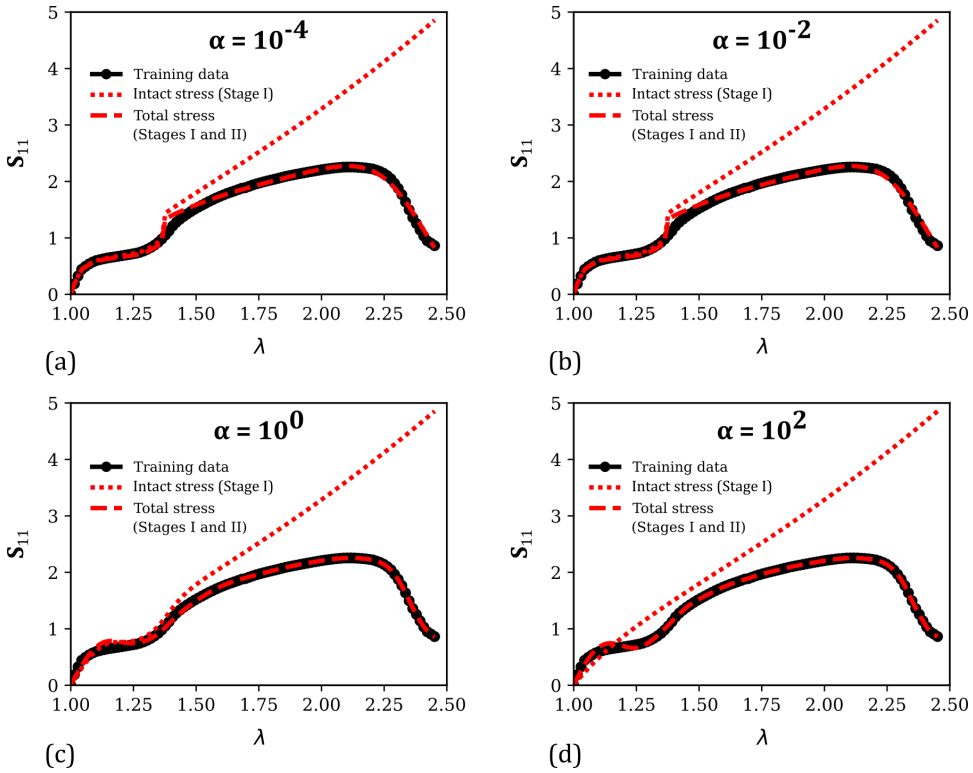

图 S1：第一阶段等容高斯过程回归模型 $\mathcal{M}_{iso}$中，完整状态和总轴向应力–伸长率预测对块金参数 α 的敏感性。结果展示了 $\alpha = 10^{-4}$、10^{-2}、10^{0}和 10^{2}。块金参数过小会导致过拟合，并在完整状态截止伸长处产生虚假应力不连续，进而影响总应力响应。中等取值可消除这种不连续，并得到平滑且具有物理意义的预测；而块金参数过大则会导致过度平滑并降低可解释性。

在完整状态截止点处变得平滑，虚假的应力跃变也随之消失。尽管在从弹性行为向损伤主导行为过渡的区域附近观察到轻微的过高预测——这与主文稿中的讨论一致——但整体响应仍保持物理合理性，且数值表现良好。根据对本研究所涉及的所有脑组织数据集进行的系统评估，结果发现，中等的块金值 $\alpha = 0.5$在平滑性、保真度和物理可解释性之间实现了最佳平衡。

当金块噪声值（$\alpha = 10^{2}$）过大时，即使在

名义完整状态下，完整状态响应也会过度平滑，并明显偏离总响应。因此，在小应变下，推断出的应力折减因子χ 会明显偏离 1，从而降低弹性–损伤分解的物理可解释性。

总体而言，这项敏感性研究表明，在阶段 I 中恰当地选择金块噪声，不仅对拟合精度至关重要，也有助于避免不合理的应力不连续、确保数值稳健性，并维持所提出的两阶段框架中有意义的损伤演化。