arXiv:2603.06939v1 [cs.LG] 6 Mar 2026

基于损失的验证准则：用于学习微结构介质中变形与指向矢场的物理一致神经网络。

Milad Shirani[1], Pete H . Gueldner[1], Murat Khidoyatov[2], Jeremy L. Warren[1], 和 Federica Ninno [1]

[1]耶鲁大学生物医学工程系，美国康涅狄格州纽黑文[2]耶鲁大学机械工程系，美国康涅狄格州纽黑文

2026年3月10日

摘要

本文采用单一单位指向矢的 Cosserat 弹性框架，研究具有微结构的固体的力学行为。该表述能够捕捉许多结构化材料中变形与取向场之间的耦合。为计算这类介质的平衡构型，我们开发了两种互补的计算方法：一种是基于变分原理的有限元表述，另一种是直接最小化总势能的基于神经网络的求解器。神经网络架构的设计遵循该理论的基本运动学结构。具体而言，它确保能量满足标架不变性，满足指向矢场的单位长度约束，并通过相互独立的网络表示变形场和指向矢场，从而在变分框架中保持二者的运动学独立性。然而，物理解除了满足平衡定律，还必须对应稳定的能量极小值。为评估这一要求，我们推导了 Cosserat 模型的拟凸性条件、秩一凸性条件和 Legendre-Hadamard不等式，并将其表述为适用于评估神经网络预测结果的形式。这些必要的稳定性条件构成了一个基于物理的验证框架：违反这些必要条件的网络输出不可能对应稳定的能量极小值，因此可以予以拒绝。如此一来，我们将经典的变分稳定性理论与现代机器学习求解器相结合，建立了一套计算流程，使平衡解不仅能够被学习，还能接受能量一致性评估。

关键词：物理信息神经网络、Cosserat 弹性、拟凸性条件、秩一凸性条件、Legendre-Hadamard不等式。

1 引言

具有内部方向结构的材料和生物系统需要采用将变形与局部取向场耦合起来的连续介质理论。人们已提出多种理论，以在系统建模中纳入微结构及其取向特性的影响。例如，高阶梯度弹性用于模拟组织或纤维材料中嵌入纤维弯曲的影响 [46, 54, 55, 14, 38, 47, 22, 21,15]。此外，Cosserat 弹性也用于模拟纤维材料时捕捉纤维弯曲和扭转的影响 [46, 50]。采用单指向矢的 Cosserat 弹性用于模拟板和壳 [26, 53, 18, 25, 24], 液晶 [57, 17, 18, 20, 19, 16], 脂质双层和细胞膜 [52,27, 28, 3, 49, 4, 40, 41], 以及细胞单层 [61, 30, 10]的力学行为。

单指向矢 Cosserat 弹性理论的一个实际应用示例，是对向列相弹性体的力学行为进行建模。在向列相弹性体中，聚合物网络的弹性响应不仅取决于变形梯度，还取决于材料内部各向异性结构的取向，因此会表现出仅凭经典弹性无法描述的独特力学行为，例如软弹性和各向异性驱动 [60, 59]。液晶系统中也存在类似的连续介质描述；对于取向序会显著影响力学响应的结构材料，这类描述同样具有重要意义 [57]。除软物质物理学外，含内部场的 Cosserat 连续介质模型也广泛应用于生物力学和生物物理学。例如，集体细胞迁移和极化被建模为连续介质活性材料，其中力学

力和内部极性场相互作用，共同调控组织形态发生、伤口愈合和癌症侵袭 [7]。利用 Cosserat 连续介质力学和液晶理论，可以对脂质双层的力学行为进行建模 [52]。运用这些理论，可以证明脂质双层的力学行为可由物体的平均曲率和高斯曲率描述，从而得到 Helfrich能量 [52]。在这些模型中，弹性弯曲和侧向拉伸在膜变形、蛋白质相互作用以及内吞作用和囊泡形成等细胞过程中发挥着关键作用 [32]。这些示例说明，耦合变形和内部结构场能够描述不同尺度上的复杂力学行为。

从变分力学的角度看，弹性边值问题的解是否存在及其稳定性，取决于能量密度的性质。在非线性弹性中，可以证明，选择凸形式的弹性能泛函会导致唯一解，因此无法描述屈曲等行为 [51]。因此，必须寻找其他条件，以避免因选择凸弹性能而产生不切实际的情形。研究表明，在稳定平衡状态下，当系统的总势能达到最小值时，解必须满足拟凸性、秩一凸性和 Legendre-Hadamard不等式。这些条件是必要条件；要使满足平衡定律和边界条件的解成为能量极小值，解就必须满足这些条件。在 Ball 的开创性研究中 [6], , 研究表明，多凸性条件蕴含拟凸性条件、秩一凸性，进而蕴含 Legendre-Hadamard不等式。这些条件是在对非线性变分问题和弹性理论的经典分析中确立的，为能量泛函的下半连续性以及避免细尺度不稳定性提供了重要判据 [6, 13]。对于板和壳等结构的连续介质描述，类似的能量最小化原理也是通过变分渐近法推导广义板理论的基础，例如针对主动薄片和复合薄片建立的理论 [48, 2]。无论研究何种具体物理系统，这些理论工具都是评估候选解是否不仅为驻定解，而且在允许的扰动下保持稳定的关键。

近期工作已将这些必要的稳定性条件推广到具有附加内部场的连续介质理论。特别是，适用于包含结构场的广义连续介质表述的Legendre-Hadamard条件表明，二阶变分的正性如何对稳定极小化子的本构能量密度施加逐点约束 [45], , 进一步的工作则探讨了具有附加场变量的相关理论中的秩一凸性与拟凸性 [44]。这些进展提供了超越仅满足平衡定律的稳健理论检验，确保解同时与力学平衡和能量最小化相一致。

多种数值方法被用于近似求解具有耦合场的连续介质力学问题。传统离散化方法（如有限元分析）仍是许多工程与生物物理应用的标准方法，包括膜变形和薄结构力学。新兴的基于机器学习的方法也将物理定律直接嵌入网络训练，以近似求解控制方程；物理信息神经网络等框架已被应用于弹性及相关领域，以求解与物理约束相一致的位移及由此导出的应力场 [39]。

物理信息神经网络（PINNs）最初被提出用于解决非线性弹性等经典连续介质力学问题，以求得系统的状态：既可以通过求解平衡定律 [39] ，也可以通过最小化系统的总势能 [43]。相关神经网络方法也被用于预测血管疾病中的组织层级力学行为和生物重塑，包括动脉瘤，通常采用数据驱动或混合建模的方式 [63, 35, 62, 23, 34, 11, 12, 42, 36]。近期研究表明，神经网络、高斯过程、集成方法、支持向量机、回归和物理信息神经网络（PINNs）等方法在拟合高维应力/应变映射方面表现出色 [31]。使用前馈网络进行监督学习，可以直接学习应力-应变关系，甚至在使用人主动脉数据时超越Holzapfel-Gasser-Ogden模型 [37]。类似地，FHCNN-Bio模型通过嵌入纤维/不变量结构，提高了可解释性和训练稳定性，并在实验与合成组织数据集上表现出强大的泛化能力 [56]。符号回归方法直接搜索明确且可解释的方程，并利用进化/深度超分辨率（SR）降低模型形式偏差 [1]。物理信息神经网络（PINNs）通过在训练过程中施加偏微分方程/能量原理，从有限或间接测量数据中学习本构行为，在利用稀疏数据进行超弹性识别方面展现出潜力 [8]。

然而，即使采用这类方法，仅满足平衡方程仍然不够：必须依据能量极小性的必要条件验证数值近似，以避免出现伪解或不稳定解。尽管已有这些进展，但尚未对这些方法进行形式化分析，以检验其解是否满足能量极小条件；这在非经典连续介质力学中尤为明显。不过，一些文献 [9, 33] 提出了用于非线性经典弹性的网络，这些网络能够生成多凸弹性能。值得注意的是，正如 Ball [6,51], 所示，如果弹性能是多凸的，那么系统的解会自动满足拟凸性，进而满足秩一凸性条件和 Legendre–Hadamard不等式。

在本文中，我们 建立控制平衡定律，并推导必要的变分稳定性准则 ia

适用于具有单位指向矢的 Cosserat 连续体，将经典能量极小化原理扩展到这一类耦合场问题。随后，我们展示如何评估这些准则，并将其用作有限元模拟和基于神经网络的求解器所得数值解的验证检查，从而确保解不仅满足力学平衡，也符合能量极小性。通过将理论与计算方法相结合，我们的工作为评估各类定向介质中解的力学一致性和能量一致性提供了统一框架，适用系统涵盖软生物组织、活性凝胶、薄结构元件以及液晶材料。

2 微结构介质的 Cosserat 力学

在本节中，我们介绍材料的力学建模，其中纳入了微结构对其力学行为的影响。我们采用带单位指向矢的 Cosserat 弹性理论来对这些介质进行建模。

2.1 运动学与标架不变性条件

在本节中，我们介绍由带单一单位指向矢的 Cosserat 弹性理论所描述的物体的运动学。根据该理论，物体的运动学由两个运动学场描述，即从参考构形 κ_0 到当前构形 κ 的变形场，以及当前构形中的单位指向矢场。因此，运动的运动学为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X}) \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{d} = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{X}) \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{X}$ 是参考构形中的一个材料点，$\boldsymbol{x}$ 是同一材料点运动后在当前构形中的位置。在本工作中，我们要求 $\boldsymbol{d}$ 为单位向量，即

$$\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{d} = 1 \tag{2}$$

并且这应被视为问题表述中的一个约束。我们假设存在由 W 表示的、按参考构形单位体积定义的弹性能

$$W = W(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{d}, \nabla \boldsymbol{d}) \tag{3}$$

其中，$\boldsymbol{F}$ 是变形梯度，定义为

$$\boldsymbol{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial X_A} \otimes \boldsymbol{E}_A = \nabla \boldsymbol{\chi} \tag{4}$$

其中，$\boldsymbol{E}_A$ 是参考构形中的正交归一基向量，$\nabla \bullet$ 是量 $\bullet$的参考梯度。我们要求变形 $\boldsymbol{\chi}$可逆，因此得到

$$J = \det \boldsymbol{F} > 0. \tag{5}$$

弹性能必须具有框架不变性，这意味着对于任意一族旋转张量 $\varepsilon - \boldsymbol{Q}(\varepsilon)$，以下关系必须成立

$$W(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{d}, \nabla \boldsymbol{d}) = W(\boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{F}, \boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{d}, \boldsymbol{Q}(\varepsilon)\nabla \boldsymbol{d}). \tag{6}$$

鉴于 式 (6) 的左侧不是 ε的函数，而右侧是，因此我们得出结论 t

$$\frac{d}{d\varepsilon}\left(W(\boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{F}, \boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{d}, \boldsymbol{Q}(\varepsilon)\nabla \boldsymbol{d})\right) = 0 \tag{7}$$

因此

$$\left(\frac{\partial W}{\partial (\boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{F})}\boldsymbol{F}^T + \frac{\partial W}{\partial (\boldsymbol{Q}(\varepsilon)\boldsymbol{d})} \otimes \boldsymbol{d} + \frac{\partial W}{\partial (\boldsymbol{Q}(\varepsilon)\nabla \boldsymbol{d})}(\nabla \boldsymbol{d})^T\right) \cdot \frac{d\boldsymbol{Q}(\varepsilon)}{d\varepsilon} = 0 \tag{8}$$

在所有可能的旋转张量中，选择 $\boldsymbol{Q}(\varepsilon)$，使得 $\boldsymbol{Q}(0) = \boldsymbol{I}$ 且 $\left(\frac{d\boldsymbol{Q}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right)_{|\varepsilon=0} = \boldsymbol{\Omega}$，其中 $\boldsymbol{\Omega}$是任意二阶反对称张量（$\boldsymbol{\Omega} \in$反对称张量空间）。将上述关系在 $\varepsilon = 0$ 处求值，得到

$$\left(\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^T + \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{d}} \otimes \boldsymbol{d} + \frac{\partial W}{\partial \nabla \boldsymbol{d}}(\nabla \boldsymbol{d})^T\right) \cdot \boldsymbol{\Omega} = 0 \tag{9}$$

并且由于 $\boldsymbol{\Omega}$ 是任意反对称张量，我们得出结论

$$\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^T + \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{d}} \otimes \boldsymbol{d} + \frac{\partial W}{\partial \nabla \boldsymbol{d}}(\nabla \boldsymbol{d})^T \in \mathrm{Sym} \tag{10}$$

系统所采用的任何能量都必须满足 (10)，否则它就不是参考系不变弹性能。

2.2 平衡定律和边界条件

系统处于平衡时，其总势能达到最小。因此，可以得出系统总势能的一阶变分必须为零。为此，我们将运用虚功率原理和变分法来求出平衡定律和边界条件。根据虚功率原理，对于任意运动学容许虚变形和虚指向矢量，系统弹性能的变分等于所有施加作用的虚功率。需要注意的是，问题的表述必须考虑约束。在本文中，我们唯一的约束是(2)。因此，我们需要求出满足该约束的指向矢场变分。考虑如下变形场和指向矢场的一族变分： $\varepsilon-$

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\boldsymbol{X},\varepsilon)=\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X})+\varepsilon\delta\boldsymbol{\chi}+\boldsymbol{o}(\varepsilon) \tag{11}$$

$$\hat{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{X},\varepsilon)=\boldsymbol{d}(\boldsymbol{X})+\varepsilon\delta\boldsymbol{d}+\boldsymbol{o}(\varepsilon) \tag{12}$$

其中， $\boldsymbol{\chi}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 是平衡状态下的运动学场， $\delta\boldsymbol{\chi}$和 $\delta\boldsymbol{d}$ 分别是变形和指向矢场的变分。指向矢场的变分必须满足该约束。因此，对式（2）取变分可得

$$\boldsymbol{d}\cdot\delta\boldsymbol{d}=0 \tag{13}$$

由此我们得出， $\delta\boldsymbol{d}=\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{d}$ ，其中 $\boldsymbol{g}$ 是非唯一的任意向量。利用这一点，并以 $\boldsymbol{u}$表示变形的变分，我们可以写出

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}(\boldsymbol{X},\varepsilon)=\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{X})+\varepsilon\boldsymbol{u}+\boldsymbol{o}(\varepsilon) \tag{14}$$

$$\hat{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{X},\varepsilon)=\boldsymbol{d}(\boldsymbol{X})+\varepsilon\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{d}+\boldsymbol{o}(\varepsilon) \tag{15}$$

因此，我们得到 $\delta\boldsymbol{F}$ 和 $\nabla\delta\boldsymbol{d}$ 分别为

$$\delta\boldsymbol{F}=\nabla\boldsymbol{u}\qquad\text{and}\qquad\nabla\delta\boldsymbol{d}=(\boldsymbol{g}_{,A}\times\boldsymbol{d}+\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{d}_{,A})\otimes\boldsymbol{E}_A \tag{16}$$

对弹性能（3）取变分可得

$$\delta W=\boldsymbol{P}\cdot\delta\boldsymbol{F}+\boldsymbol{N}\cdot\delta\boldsymbol{d}+\boldsymbol{M}\cdot\nabla\delta\boldsymbol{d} \tag{17}$$

其中， $\boldsymbol{P}$是广义第一类皮奥拉应力张量， $\boldsymbol{N}$ 是内力偶， $\boldsymbol{M}$ 是偶应力，定义为

$$\boldsymbol{P}=\frac{\partial W}{\partial\boldsymbol{F}},\qquad\boldsymbol{N}=\frac{\partial W}{\partial\boldsymbol{d}},\qquad\boldsymbol{M}=\frac{\partial W}{\partial\nabla\boldsymbol{d}} \tag{18}$$

对 δW 取体积分，得到

$$\int_{\kappa_0}\delta W\,dV=\int_{\kappa_0}(\boldsymbol{P}\cdot\delta\boldsymbol{F}+\boldsymbol{N}\cdot\delta\boldsymbol{d}+\boldsymbol{M}\cdot\nabla\delta\boldsymbol{d})\,dV \tag{19}$$

$$=\int_{\kappa_0}\left(\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{u}\right)-\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{P}\right)\cdot\boldsymbol{u}+\boldsymbol{d}\times(\boldsymbol{N}-\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{M}\right))\cdot\boldsymbol{g}+\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{M}^T\delta\boldsymbol{d}\right)\right)dV \tag{20}$$

其中 dV 是参考构形中的体积元，应用积分的散度定理可得

$$\int_{\kappa_0}\delta W\,dV=\int_{\partial\kappa_0}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{u}+\boldsymbol{d}\times\boldsymbol{M}\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{g})\,dA-\int_{\kappa_0}(\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{P}\right)\cdot\boldsymbol{u}+\boldsymbol{d}\times(\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{M}\right)-\boldsymbol{N})\cdot\boldsymbol{g})\,dV$$

其中， dA 是参考面积元， $\boldsymbol{\nu}$ 是参考构形中物体边界的外单位法向量， $\partial\kappa_0$ 是参考构形中的物体边界。根据虚功率原理，在平衡状态下，有

$$\int_{\kappa_0}\delta W\,dV=\mathcal{P} \tag{21}$$

其中， $\mathcal{P}$ 是外部作用的虚功率，即:

$$\mathcal{P}=\int_{\kappa_0}(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{u}+\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{d})\,dV+\int_{\partial\kappa_{p_0}}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{u}\,dA+\int_{\partial\kappa_{d_0}}\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{d}\,dA \tag{22}$$

其中， $\boldsymbol{f}$、 $\boldsymbol{l}$、 $\boldsymbol{p}$和 $\boldsymbol{m}$ 分别是外体力、体偶力、表面力和偶力牵引； $\partial\kappa_{p_0}$和 $\partial\kappa_{d_0}$ 是物体边界的一部分， $\boldsymbol{p}$和 $\boldsymbol{m}$ 分别作用于其上。注意，在规定变形和指向矢场的边界部分，变形和指向矢场的变化量为零。应用虚功率原理，可以得到以下平衡定律和边界条件

$$\begin{aligned} \mathrm{Div}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{f}=\boldsymbol{0} \quad &\in \kappa_0 \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{P\nu}=\boldsymbol{p} \quad \text{on } \partial\kappa_{p_0} && (23)\\ \boldsymbol{d}\times\left(\mathrm{Div}\left(\boldsymbol{M}\right)-\boldsymbol{N}+\boldsymbol{l}\right)=\boldsymbol{0} \quad &\in \kappa_0 \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{d}\times\boldsymbol{M\nu}=\boldsymbol{d}\times\boldsymbol{m} \quad \text{on } \partial\kappa_{d_0} && (24)\end{aligned}$$

鉴于在本工作中我们提出基于变分方法的神经网络方法，以模拟材料微结构对物体力学行为的影响，在以下各节中，我们将给出网络输出必须满足的条件，这些条件适用于作为网络损失函数一部分的任何形式的弹性能。我们得到拟凸性条件、秩一凸性条件以及Legendre–Hadamard不等式，这些平衡定律和边界条件的解必须满足它们，才能对应于稳定能量极小值。

2.3 能量极小值

在本节中，我们推导(23)和(24)的解必须满足的能量极小化条件。因此，这些条件是这些解的必要条件；如果解不满足这些必要条件，它们就不能对应于稳定极小化子。这些条件很重要，因为它们提供了一个基准真值，用以检验通过数值方法或解析方法得到的、处于平衡状态的保守系统解的有效性。因此，我们在神经网络中使用系统的总势能作为损失函数，以确保网络的解遵循并满足物理定律和热力学定律。我们得出结论：对于任何给定的损失函数，网络的输出也必须满足这些能量极小化条件。因此，如果神经网络得到的解不满足这些条件，我们便认定该网络的解无效。

在稳定平衡处，系统的总势能取最小值。将保守系统的总势能视为

$$\mathcal{E}\left(\boldsymbol{\chi},\boldsymbol{d}\right)=\int_{\kappa_0} W\left(\boldsymbol{F},\boldsymbol{d},\nabla\boldsymbol{d}\right)dV-\mathcal{L} \tag{25}$$

其中 $\mathcal{L}$为外部作用势能。本文考虑死载荷情形，因而

$$\mathcal{L}=\int_{\kappa_0}\left(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{\chi}+\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{d}\right)\,dV+\int_{\partial\kappa_{p_0}}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\chi}\,dA+\int_{\partial\kappa_{d_0}}\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{d}\,dA \tag{26}$$

对于满足边界条件且并非平衡处运动学场的任意变形与指向矢场，系统的总势能应大于平衡处运动学场对应的总势能值。也就是说

$$\mathcal{E}\left(\tilde{\boldsymbol{\chi}},\tilde{\boldsymbol{d}}\right)-\mathcal{E}\left(\boldsymbol{\chi}_e,\boldsymbol{d}_e\right)\geq 0 \tag{27}$$

其中 $\boldsymbol{\chi}_e$ 与 $\boldsymbol{d}_e$ 是由求解(23)和(24)得到的稳定平衡处的运动学场，而 $\tilde{\boldsymbol{\chi}}$、 $\tilde{\boldsymbol{d}}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 是偏离平衡的运动学场。注意 $\boldsymbol{d}$ 与 $\boldsymbol{d}_e$ 都必须满足(2)中的约束。在以下各节中，我们通过最小化系统的总势能得到拟凸性条件、秩一凸性条件以及Legendre–Hadamard不等式。这些条件必须由(23)和(24)在稳定平衡处的解所满足。因此，这些条件是平衡定律的解在平衡处有效所必须满足的必要条件。

2.3.1 拟凸性条件

考虑以下形变

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}\left(\boldsymbol{X},\mu\right)=\boldsymbol{\chi}_e\left(\boldsymbol{X}\right)+\mu\boldsymbol{\Phi}\left(\boldsymbol{Z}\right) \qquad \text{and} \qquad \tilde{\boldsymbol{d}}\left(\boldsymbol{X},\mu\right)=\boldsymbol{R}\left(\boldsymbol{Z},\mu\right)\boldsymbol{d}_e \qquad \text{with} \qquad \boldsymbol{R}\left(\boldsymbol{Z},\mu\right)\in\mathrm{Orth}^{+} \tag{28}$$

其中 $\boldsymbol{\Phi}\left(\boldsymbol{Z}\right)$ 和 $\boldsymbol{R}\left(\boldsymbol{Z},\mu\right)-\boldsymbol{I}$ 是在 $\mathcal{D}\subset\kappa$ 中足够光滑的紧支撑函数，并且

$$\boldsymbol{Z}=\frac{\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}_0}{\mu} \tag{29}$$

˜ ˜其中 $\boldsymbol{X}_0$是 κ_0内部的一个材料点， μ是一个标量。注意，选取 $\boldsymbol{d}(\boldsymbol{X},\mu) = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{Z},\mu)\,\boldsymbol{d}_e$满足约束 (2)，因此它是一个有效的指向矢场。旋转张量有多种表示方法，我们采用其中的 Cayley 旋转张量表示。根据这种表示，对于任意反对称张量 $\boldsymbol{W}$，量 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{W})^{-1}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{W})$ 是一个旋转张量。因此，使用这种表示，我们选取

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{Z},\mu) = \left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{Z})\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I}+\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{Z})\right) \tag{30}$$

其中， $\boldsymbol{W}(\boldsymbol{Z})$ 是定义在 $\mathcal{D}\subset\kappa_0$ 上的光滑紧支撑张量值函数。利用 (28) 和 (30)，可得

$$\tilde{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{F}_e + \nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi} \tag{31}$$

$$\nabla\tilde{\boldsymbol{d}} = \frac{1}{\mu}\frac{\partial\boldsymbol{R}}{\partial Z_A}\boldsymbol{d}_e\otimes\boldsymbol{E}_A + \boldsymbol{R}\nabla\boldsymbol{d}_e \tag{32}$$

其中

$$\nabla_{\boldsymbol{Z}}\bullet = \frac{\partial\bullet}{\partial Z_A}\otimes\boldsymbol{E}_A \tag{33}$$

是向量量 $\bullet$的梯度。注意

$$\frac{1}{\mu}\frac{\partial\boldsymbol{R}}{\partial Z_A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1}\left(\frac{\partial\boldsymbol{W}}{\partial Z_A}\right)(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{I}) \tag{34}$$

其中用到了恒等式

$$\frac{\partial}{\partial Z_A}\left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1}\left(\frac{\mu}{2}\frac{\partial\boldsymbol{W}}{\partial Z_A}\right)\left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1} \tag{35}$$

˜，将 (35) 代入 (34) 并利用结果 (32)，可得 $\nabla\boldsymbol{d}$

$$\nabla\tilde{\boldsymbol{d}} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1}\left(\frac{\partial\boldsymbol{W}}{\partial Z_A}\right)(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{d}_e\otimes\boldsymbol{E}_A + \boldsymbol{R}\nabla\boldsymbol{d}_e \tag{36}$$

将 (28)、(31) 和 (36) 代入 (27)，并利用以下事实： $\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{0}$ 在边界 $\partial\kappa_{p_0}$ 上，且 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}$ 在 $\partial\kappa_{d_0}$ 上，可得

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\left(\tilde{\boldsymbol{\chi}},\tilde{\boldsymbol{d}}\right)-\mathcal{E}(\boldsymbol{\chi}_e,\boldsymbol{d}_e) = &\int_{\mathcal{D}} W\left(\boldsymbol{F}_e+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{R}\boldsymbol{d}_e,\boldsymbol{R}\nabla\boldsymbol{d}_e+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{I}-\frac{\mu}{2}\boldsymbol{W}\right)^{-1}\left(\frac{\partial\boldsymbol{W}}{\partial Z_A}\right)(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{d}_e\otimes\boldsymbol{E}_A\right)\mu^3 dV_Z\\ &-\int_{\mathcal{D}} W(\boldsymbol{F}_e,\boldsymbol{d}_e,\nabla\boldsymbol{d}_e)\,\mu^3 dV_Z - \int_{\mathcal{D}}\left(\boldsymbol{f}\cdot\mu\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{Z})+\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{d}_e\right)\mu^3 dV_Z \geq 0\end{aligned} \tag{37}$$

其中， dV_Z 是区域 $\mathcal{D}$的体积元。将此关系除以 μ^3，令 $\mu\to 0$趋于极限，并且由于 $\lim_{\mu\to0}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}$和 $\lim_{\mu\to0}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}_0$，我们得到

$$\int_{\mathcal{D}}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{W}}{\partial Z_A}\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e})\right]dV_Z\geq 0 \tag{38}$$

其中，下标为 $0e$ 的量表示平衡时的量，它们在 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}_0$.处取值。关系式（38）称为拟凸性条件，是要求 $\boldsymbol{d}_e$ 和 $\boldsymbol{\chi}_e$ 处于稳定平衡的必要条件。对于任意紧支撑函数 $\boldsymbol{\Phi}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 、任意区域 $\mathcal{D}\subset\kappa_0$ 以及每个材料点 $\boldsymbol{X}_0$，该关系都必须成立。B

因为 $\boldsymbol{W}$ 是一个kew s对称张量，我们使用其轴向量 $\boldsymbol{w}=$ax（$\boldsymbol{W}$），并将上述关系改写为

$$\int_{\mathcal{D}}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{w}}{\partial Z_A}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e})\right]dV_Z\geq 0. \tag{39}$$

可以看出，拟凸性条件是一个积分不等式，对于任意区域 $\mathcal{D}$以及每个材料点处的任意紧支撑函数 $\boldsymbol{\Phi}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 都必须成立。因此，可以得出结论：不可能使用该条件来检验解的有效性。在下一节中，我们将得到秩一凸性条件，这是一种逐点条件， $\boldsymbol{\chi}_e$ 和 $\boldsymbol{d}_e$必须满足该条件。

2.3.2 秩一凸性条件

本节中，我们将得到具有单个单位指向矢场的Cosserat介质的秩一凸性条件。 $\boldsymbol{Z}$ 的原点位于 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}_0$，因此，通过坐标变换，并在点 $\boldsymbol{X}_0$处附加一个正交右手基 $\{\boldsymbol{L}_1,\boldsymbol{L}_2,\boldsymbol{L}_3\}$，我们可以定义一个新的坐标系（$\xi_1$，$\xi_2$，$\xi_3$），使得 $\xi_1=\boldsymbol{Z}\cdot\boldsymbol{L}_1$、$\xi_2=\boldsymbol{Z}\cdot\boldsymbol{L}_2$和 $\xi_3=\boldsymbol{Z}\cdot\boldsymbol{L}_3$；因此，我们可以将 $\boldsymbol{Z}$ 写成

$$\boldsymbol{Z}=\xi_1\boldsymbol{L}_1+\xi_2\boldsymbol{L}_2+\xi_3\boldsymbol{L}_3 \tag{40}$$

注意，鉴于 $\{\boldsymbol{L}_A\}$ 和 $\{\boldsymbol{E}_A\}$ 是正交归一基向量，存在一个旋转张量 $\boldsymbol{\mathcal{S}}$，使得$\boldsymbol{E}_A=\boldsymbol{\mathcal{S}}\boldsymbol{L}_A$。此外，考虑一个区域 $\mathcal{R}\subset\mathcal{D}$，满足

$$\mathcal{R}=\left\{(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\,|\,|\xi_3|<B\left(\xi_1,\xi_2\right)=h^2-\left(\xi_1^2+\xi_2^2\right)\qquad\text{and}\qquad B\left(\xi_1,\xi_2\right)\geq 0\right\} \tag{41}$$

其中 h 足够小。考虑互不相交的区域 $\mathcal{R}_0,\mathcal{R}_+$ 和 $\mathcal{R}_-$，满足 $\mathcal{R}=\mathcal{R}_-\cup\mathcal{R}_0\cup\mathcal{R}_+$

$$\mathcal{R}_+=\{(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\qquad|\qquad\theta\,B\left(\xi_1,\xi_2\right)<\xi_3\leq B\left(\xi_1,\xi_2\right)\} \tag{42}$$

$$\mathcal{R}_0=\{(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\qquad|\qquad-\theta\,B\left(\xi_1,\xi_2\right)\leq\xi_3\leq\theta\,B\left(\xi_1,\xi_2\right)\} \tag{43}$$

$$\mathcal{R}_-=\{(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\qquad|\qquad-B\left(\xi_1,\xi_2\right)\leq\xi_3<-\theta\,B\left(\xi_1,\xi_2\right)\} \tag{44}$$

其中 $0<\theta\leq 1$。考虑以下函数

$$f\left(\boldsymbol{Z}\right)=\begin{cases}-\theta\left[\xi_3-B\left(\xi_1,\xi_2\right)\right] & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_+\\ (1-\theta)\,\xi_3 & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_0\\ -\theta\left[\xi_3+B\left(\xi_1,\xi_2\right)\right] & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_-\\ 0 & ,\boldsymbol{Z}\notin\mathcal{R}\end{cases} \tag{45}$$

注意，$f(\boldsymbol{Z})$ 是一个紧支撑函数，并且在区域 $\mathcal{D}$之外为零。此外，可以看出 $f(\boldsymbol{Z})$ 处处连续。然而，通过简单计算可以求得 f 的梯度，并令 $h\to 0$趋于极限，我们发现 $\lim_{h\to 0}\nabla_{\boldsymbol{Z}}f$ 出现有限跳跃，因为

$$\lim_{h\to 0}\nabla_{\boldsymbol{Z}}f=\begin{cases}-\theta\boldsymbol{L}_3 & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_+\\ (1-\theta)\,\boldsymbol{L}_3 & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_0\\ -\theta\boldsymbol{L}_3 & ,\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}_-\\ 0 & ,\boldsymbol{Z}\notin\mathcal{R}\end{cases} \tag{46}$$

其中我们利用了取极限 $h\to 0$可得 $\xi_1,\ \xi_2\to 0$这一事实。将式 (28) 和 (30) 中的函数 $\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{Z})$和$\boldsymbol{w}\left(\boldsymbol{Z}\right)=\mathrm{ax}\left(\boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{Z}\right)\right)$定义为

$$\boldsymbol{\Phi}\left(\boldsymbol{Z}\right)=\boldsymbol{a}f\left(\boldsymbol{Z}\right)\qquad\text{and}\qquad\boldsymbol{w}\left(\boldsymbol{Z}\right)=\boldsymbol{b}f\left(\boldsymbol{Z}\right) \tag{47}$$

其中，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 是当前构形中的固定向量。定义

$$\mathcal{F}=\frac{1}{V\left(\mathcal{R}\right)}\int_{\mathcal{R}}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{w}}{\partial Z_A}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W\left(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right)\right]dV_Z \tag{48}$$

其中，$V(\mathcal{R})$是区域 $\mathcal{R}$ 的总体积，根据式 (39)，我们得出 $\mathcal{F}\geq 0$。现在通过计算以下极限来求秩一凸性条件

$$\lim_{h\to 0}\mathcal{F}\geq 0 \tag{49}$$

注意到 $V(\mathcal{R}_+)=V(\mathcal{R}_-)=(1-\theta)\,V(\mathcal{R})/2$和 $V(\mathcal{R}_0)=\theta V(\mathcal{R})$，因此我们可以将 $\mathcal{F}$写为

$$\begin{aligned}\mathcal{F}=&\frac{(1-\theta)}{2V\left(\mathcal{R}_+\right)}\int_{\mathcal{R}_+}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{w}}{\partial\xi_A}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W\left(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right)\right]dV_Z\\&+\frac{\theta}{V\left(\mathcal{R}_0\right)}\int_{\mathcal{R}_0}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{w}}{\partial Z_A}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W\left(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right)\right]dV_Z\\&+\frac{(1-\theta)}{2V\left(\mathcal{R}_-\right)}\int_{\mathcal{R}_-}\left[W\left(\boldsymbol{F}_{0e}+\nabla_{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{\Phi},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}+\frac{\partial\boldsymbol{w}}{\partial Z_A}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{E}_A\right)-W\left(\boldsymbol{F}_{0e},\boldsymbol{d}_{0e},\nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right)\right]dV_Z.\end{aligned}$$

令 $h \to 0$ 趋于极限，并应用积分中值定理，我们得到

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0}\mathcal{F} = (1-\theta)\, W\left(\boldsymbol{F}_{0e} - \theta\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} - \theta\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3\right)\\ + \theta W\left(\boldsymbol{F}_{0e} + (1-\theta)\,\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} + (1-\theta)\,\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3\right)\\ - W\left(\boldsymbol{F}_{0e}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right) \geq 0\end{aligned}$$

其中我们使用了关系式 $\boldsymbol{E}_3 = \boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3$。将下列方程按 θ 展开后，我们得到 d

$$\begin{aligned}W\left(\boldsymbol{F}_{0e} - \theta\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} - \theta\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3\right) = W\left(\boldsymbol{F}_{0e}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right)\\ - \theta\boldsymbol{P}_{0e}\cdot\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3 - \theta\boldsymbol{M}_{0e}\cdot\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3 + o\left(\theta^2\right)\end{aligned} \tag{50}$$

其中 $\boldsymbol{P}_{0e} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{F}_{0e},\ \boldsymbol{d}_{0e},\ \nabla\boldsymbol{d}_{0e})$ 和 $\boldsymbol{M}_{0e} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{F}_{0e},\ \boldsymbol{d}_{0e},\ \nabla\boldsymbol{d}_{0e})$。将上式代入 $\lim_{h\to 0}\mathcal{F}$，再将结果除以 θ 并令 $\theta \to 0$ 趋于极限，我们得到

$$\begin{aligned}W\left(\boldsymbol{F}_{0e} + \boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} + \boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3\right)\\ - W\left(\boldsymbol{F}_{0e}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right) \geq \boldsymbol{P}_{0e}\cdot\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3 + \boldsymbol{M}_{0e}\cdot\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3\end{aligned} \tag{51}$$

此外，鉴于 $\boldsymbol{L}_3$ 和 $\boldsymbol{\mathcal{S}}$ 均为任意的，我们得出 $\boldsymbol{\mathcal{S}}^T\boldsymbol{L}_3$ 也是任意向量。因此，我们可以使用任意其他向量 $\boldsymbol{T}$，并将上述关系式改写为

$$W\left(\boldsymbol{F}_{0e} + \boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{T}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} + \boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right) - W\left(\boldsymbol{F}_{0e}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right) \geq \boldsymbol{P}_{0e}\cdot\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{T} + \boldsymbol{M}_{0e}\cdot\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T} \tag{52}$$

关系式（52）称为秩一凸性条件。对于当前构形中的任意向量 $\boldsymbol{a}$、 $\boldsymbol{b}$ 以及参考构形中的任意向量 $\boldsymbol{T}$，该条件必须在每个材料点处由 $\boldsymbol{\chi}_e$ 和 $\boldsymbol{d}_e$ 满足。接下来，我们推导 Legendre–Hadamard不等式。

2.3.3 Legendre–Hadamard不等式

考虑（52）中使用的以下向量

$$\boldsymbol{a} = \epsilon\boldsymbol{s} \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{b} = \epsilon\boldsymbol{q} \tag{53}$$

其中，$\epsilon \ll 1$ 为一个固定标量，并将以下能量函数 $W(\boldsymbol{F}_{0e} + \epsilon\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T},\ \boldsymbol{d}_{0e},\ \nabla\boldsymbol{d}_{0e} + \epsilon\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T})$ 按 ϵ 展开为

$$\begin{aligned}&W\left(\boldsymbol{F}_{0e} + \epsilon\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e} + \epsilon\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right) - W\left(\boldsymbol{F}_{0e}, \boldsymbol{d}_{0e}, \nabla\boldsymbol{d}_{0e}\right) =\\ &+\epsilon\left(\boldsymbol{P}_{0e}\cdot\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T} + \boldsymbol{M}_{0e}\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right)\\ &+\frac{\epsilon^2}{2}\left(\mathscr{M}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T} + 2\mathscr{N}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T} + \mathscr{L}\left[\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right)\\ &+o\left(\epsilon^2\right).\end{aligned} \tag{54}$$

其中

$$\mathscr{M} = \left(\frac{\partial^2 W}{\partial\boldsymbol{F}^2}\right)_{|\boldsymbol{d}=\boldsymbol{d}_{0e},\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{\chi}_{0e}} \tag{55}$$

$$\mathscr{N} = \left(\frac{\partial^2 W}{\partial\boldsymbol{F}\partial\nabla\boldsymbol{d}}\right)_{|\boldsymbol{d}=\boldsymbol{d}_{0e},\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{\chi}_{0e}} = \left(\frac{\partial^2 W}{\partial\nabla\boldsymbol{d}\partial\boldsymbol{F}}\right)_{|\boldsymbol{d}=\boldsymbol{d}_{0e},\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{\chi}_{0e}} \tag{56}$$

$$\mathscr{L} = \left(\frac{\partial^2 W}{\partial\left(\nabla\boldsymbol{d}\right)^2}\right)_{|\boldsymbol{d}=\boldsymbol{d}_{0e},\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{\chi}_{0e}} \tag{57}$$

将（54）代入秩一凸性条件（52），并将结果除以 ϵ^2，再令$\epsilon \to 0$ 趋于极限，我们得到

$$\mathscr{M}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T} + 2\mathscr{N}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T} + \mathscr{L}\left[\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{0e}\otimes\boldsymbol{T} \geq 0 \tag{58}$$

关系式（58）称为 Legendre–Hadamard不等式，对于满足（23）和（24）的解，任意向量 $\boldsymbol{s}$、$\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{T}$ 都必须满足该不等式。Legendre–Hadamard不等式的强形式称为椭圆性条件。违反椭圆性条件，即椭圆性丧失，与材料失稳有关。

3 数值模拟

本节使用有限元分析（FEA）和两个多层感知机网络来求得数值解。

3.1 本构关系

本节将采用以下弹性能作为一般弹性能的代表，以捕捉定向介质的力学行为。该能量的灵感来自 [64, 58] 中介绍的向列相弹性体所用的能量。模拟考虑在二维空间中拉伸一个嵌入其中的二维物体（以便比较神经网络和有限元分析所得的解），因此，我们采用以下能量形式

$$W = \frac{\mu}{2}(\operatorname{tr}(\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{F}) - 2 - 2\ln J) + \frac{\alpha\gamma^2}{2}\nabla\boldsymbol{d}\cdot\nabla\boldsymbol{d} \tag{59}$$

其中，μ 和 α 分别为剪切模量和弗兰克弹性模量，γ 为尺寸效应，$J = \det \boldsymbol{F}$，而 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{L}_0$ 定义如下

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I} + (r-1)\boldsymbol{d}\otimes\boldsymbol{d} \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{L}_0 = \boldsymbol{I} + (r-1)\boldsymbol{D}\otimes\boldsymbol{D} \tag{60}$$

其中，$\boldsymbol{D}$ 为参考构形中指向矢场的初始取向，$r = \frac{\ell_\parallel}{\ell_\perp}$ 为网络的形状各向异性，其中 $\ell_\perp$和 $\ell_\parallel$ 是材料参数，分别对应于垂直于和平行于指向矢的有效步长 [64, 58]。I

n all simulatio在本工作其余部分所报告的ns中，归一化材料参数取为

$$\mu = 1, \qquad r = 2, \qquad \frac{\gamma^2\alpha}{2} = 5\times 10^{-4}, \tag{61}$$

在进行数值分析之前，我们证明该弹性能满足(10)和(58)先验。因此，损失函数具有框架不变性，且网络产生的解满足这些必要条件，具体而言即Legendre–Hadamard不等式。利用(18)，我们得到

$$\boldsymbol{P} = \mu\left(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_0 - \boldsymbol{F}^{-T}\right) \tag{62}$$

$$\boldsymbol{N} = \mu\left(\frac{1}{r} - 1\right)\left(\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{F}^T\right)\boldsymbol{d} \tag{63}$$

$$\boldsymbol{M} = \alpha\gamma^2\nabla\boldsymbol{d} \tag{64}$$

然后，将这些应力和力矩代入(10)，我们可以看到

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{F}^T + \boldsymbol{N}\otimes\boldsymbol{d} + \boldsymbol{M}\left(\nabla\boldsymbol{d}\right)^T = \mu\left(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{F}^T + \boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{L}^{-1} - \boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{F}^T - \boldsymbol{I}\right) + \alpha\gamma^2\nabla\boldsymbol{d}\left(\nabla\boldsymbol{d}\right)^T \in \operatorname{Sym} \tag{65}$$

此外，可以证明

$$\mathscr{M}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T} = \mu\left(\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{s}\right)\left(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{T}\right) + 2J^{-1}\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{F}^{-T}\boldsymbol{T}\right)^2\right) \tag{66}$$

其中，通过选取 $\boldsymbol{s}$ 和 $\boldsymbol{T}$ 为单位向量，我们得到

$$\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{s}\right)\left(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{T}\right) = \frac{1}{4r}\left(r+1-(r-1)\cos 2\lambda\right)\left(r+1+(r-1)\cos 2\lambda_0\right) \tag{67}$$

其中 $\cos\lambda = \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{d}$ 和 $\cos\lambda_0 = \boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{D}$。在此示例中，我们有 $r = \frac{\ell_\parallel}{\ell_\perp} = 2$，因此得到

$$\left(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{s}\right)\left(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{L}_0\boldsymbol{T}\right) = \frac{1}{8}\left(3-\cos 2\lambda\right)\left(3+\cos 2\lambda_0\right) > 0 \tag{68}$$

由此可见，满足以下强椭圆性条件，即 Legendre–Hadamard 不等式的强形式

$$\mathscr{M}\left[\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{s}\otimes\boldsymbol{T}>0. \tag{69}$$

因此，所采用的本构模型满足强椭圆性条件，从而确保在所考虑的可容许变形状态范围内材料稳定。同样，可以看出

$$\mathscr{L}\left[\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{e0}\otimes\boldsymbol{T}\right]\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}_{e0}\otimes\boldsymbol{T}>0 \tag{70}$$

因此，网络得到的解满足 Legendre–Hadamard不等式先验地，由此可知，对于所选的本构模型和参数集，在所考虑的范围内，每个材料点均满足椭圆性条件。从式（69）和式（70）可以看出，椭圆性条件均得到满足，因此，对于所选参数，该材料模型具有强椭圆性。

3.2 有限元分析

有限元模拟用于计算定向弹性介质的平衡构型，并为与基于神经网络的求解器进行比较提供参考解。模拟采用开源有限元框架 FEniCSx [5], 进行，该框架为非线性偏微分方程的变分公式及求解提供自动化环境。数值实现遵循第（2.2）节介绍的变分公式，并计算式（59）定义的弹性能的驻点。参考域取为矩形区域

$$\kappa_0=[0,L]\times[0,W],\qquad L=1.0,\qquad W=0.2, \tag{71}$$

其中，所有尺寸均以 $H_0=1$ cm 归一化。参考域采用结构化四边形网格离散，纵向包含 $N_x=25$ 个单元，横向包含 $N_y=5$ 个单元。

未知场为位移 $\boldsymbol{u}$ 和单指向矢场 $\boldsymbol{d}$。在二维情况下，指向矢由角度场表示

$$\varphi:\kappa_0\to\mathbb{R},\qquad \boldsymbol{d}=(\cos\varphi,\sin\varphi), \tag{72}$$

从而恒等地满足单位长度约束 $|\boldsymbol{d}|=1$ 。未知场采用连续拉格朗日有限元进行近似,

$$\boldsymbol{u}_h\in[\mathcal{P}_2]^2,\qquad \varphi_h\in\mathcal{P}_2. \tag{73}$$

所有面积分和边界线积分均采用求积阶数为 4 的数值积分。为方便记述，将矩形的四条边记为

$$\Gamma_L=\{X=0\},\quad \Gamma_R=\{X=L\},\quad \Gamma_B=\{Y=0\},\quad \Gamma_T=\{Y=W\}. \tag{74}$$

通过狄利克雷边界条件施加位移控制载荷,

$$\boldsymbol{u}=(0,0) \qquad \text{on } \Gamma_L, \tag{75}$$
$$\boldsymbol{u}=(\Delta u(t),0) \qquad \text{on } \Gamma_R, \tag{76}$$
$$\varphi=\varphi_0 \qquad \text{on } \Gamma_L. \tag{77}$$

其中，载荷参数 t 表示用于施加位移的伪时间（增量计数器），将位移分为 N 个相等增量施加，而 Δu（t）是

$$\Delta u(t)=\Delta u_{\max}\,\frac{t}{N},\qquad \Delta u_{\max}=0.1\,L,\qquad N=300. \tag{78}$$

在参考构形中，指向矢场均匀初始化为

$$\varphi(X)=\varphi_0\qquad \forall X\in\kappa_0, \tag{79}$$

这与 Γ_L 上规定的边界条件一致。

在每个荷载增量下，通过对总能量进行交错最小化来求得平衡。首先，在固定指向矢场的情况下，通过施加条件求解位移场

$$\delta\Pi(\boldsymbol{u},\varphi;\delta\boldsymbol{u})=0, \tag{80}$$

并采用牛顿迭代。接着，在固定位移的情况下，通过求解来更新指向矢场

$$\delta\Pi(\boldsymbol{u}, \varphi; \delta\varphi) = 0. \tag{81}$$

在规定位移的每个增量处重复此交替过程。

所有非线性问题均采用牛顿法求解，并通过自动微分获得一致线性化。收敛性采用增量判据评估，相对容差为 10^{-6}。线性化系统采用克雷洛夫子空间方法求解，并使用标准代数预条件。

3.2.1 网格无关性研究

针对 $\varphi_0 = \pi/3$ 的情况开展了网格无关性研究，以确保数值解不受网格分辨率影响。y 方向的离散数（n_y）范围为 5 至 20。相应的 x 方向离散数为 $5 \times n_y$。在所测试的范围内，指向矢取向响应已基本实现网格收敛，因为随着网格细化，指向矢取向角的最小值、平均值和最大值均保持不变。因此，基于这些结果得出的结论对于这些网格而言具有网格无关性。

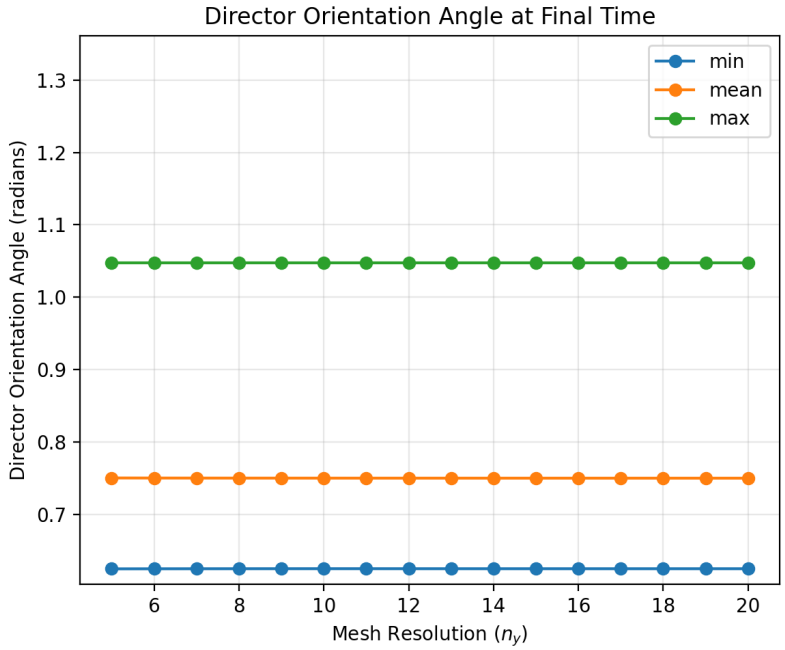


图 1：网格无关性研究，展示最终模拟时间指向矢取向角的最小值、平均值和最大值随网格分辨率（n_y）的变化。

3.3 基于神经网络的求解器

本节介绍一种基于神经网络的方法，用于求解变形下微结构材料的问题。该问题中的运动学场为变形映射 $\boldsymbol{\chi}$ 和指向矢场 $\boldsymbol{d}$。原则上，可以构建一个将材料点映射到 $\boldsymbol{\chi}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 的单一网络，同时使总势能最小化。然而，由于变形场和指向矢场在运动学上相互独立，且在最小化过程中应分别进行变分，因此我们改用两个独立的神经网络。整体架构如图（2）所示。

在该图中，两个网络均将参考构形中的材料点（记为 $\boldsymbol{X} = (X,\ Y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ ）作为输入。变形网络 生成位移场（$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X})$），据此可获得变形映射$\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{X} + \boldsymbol{u}$ 。DirectorNet 生成标量指向矢角（$\varphi(\boldsymbol{X})$），再利用公式（72）构造指向矢 $\boldsymbol{d}$ 。通过这种构造，约束（2）得以自动满足。

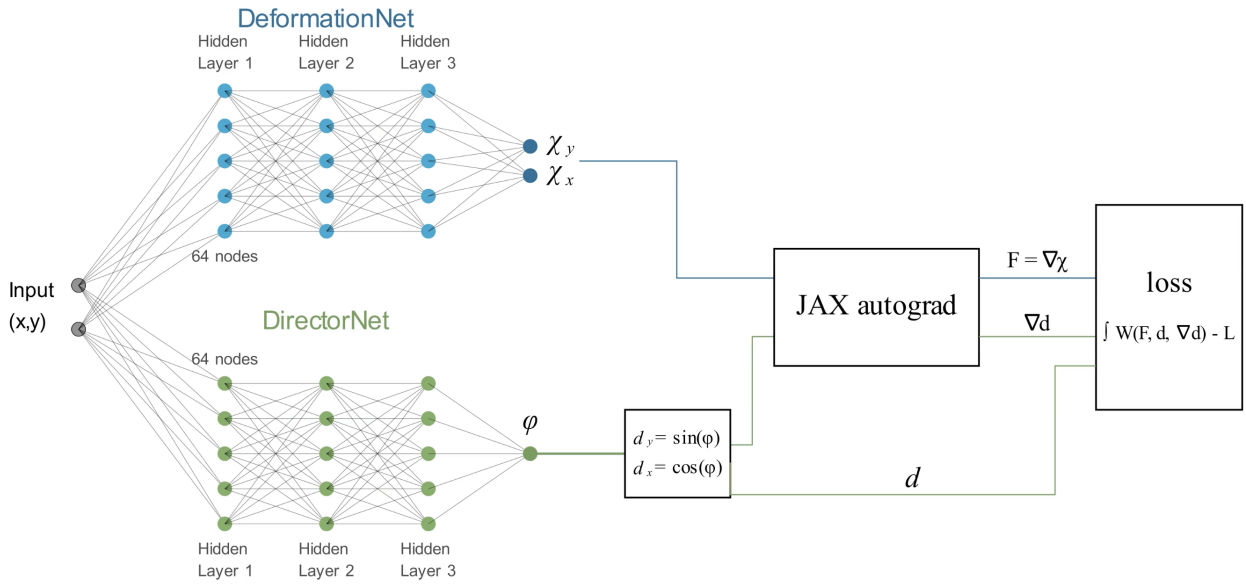


图2：包含 DeformationNet 和 DirectorNet 的神经网络架构

变形网络。 原始位移输出 $\tilde{\boldsymbol{u}}_\theta(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^2$ 由一个具有三个宽度为 64 的隐藏层并采用 tanh激活函数的全连接神经网络进行参数化

$$\boldsymbol{h}_1^u = \tanh(\boldsymbol{W}_1^u \boldsymbol{X} + \boldsymbol{b}_1^u), \tag{82}$$
$$\boldsymbol{h}_2^u = \tanh(\boldsymbol{W}_2^u \boldsymbol{h}_1^u + \boldsymbol{b}_2^u), \tag{83}$$
$$\boldsymbol{h}_3^u = \tanh(\boldsymbol{W}_3^u \boldsymbol{h}_2^u + \boldsymbol{b}_3^u), \tag{84}$$
$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}_\theta(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{W}_4^u \boldsymbol{h}_3^u + \boldsymbol{b}_4^u. \tag{85}$$

可训练参数集为 $\theta = \{\boldsymbol{W}_\ell^u, \boldsymbol{b}_\ell^u\}_{\ell=1}^4$。

方向网络。 *DirectorNet* 生成标量角度场 $\tilde{\varphi}_\eta(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}$

$$\boldsymbol{h}_1^\theta = \tanh\big(\boldsymbol{W}_1^\theta \boldsymbol{X} + \boldsymbol{b}_1^\theta\big), \tag{86}$$
$$\boldsymbol{h}_2^\theta = \tanh\big(\boldsymbol{W}_2^\theta \boldsymbol{h}_1^\theta + \boldsymbol{b}_2^\theta\big), \tag{87}$$
$$\boldsymbol{h}_3^\theta = \tanh\big(\boldsymbol{W}_3^\theta \boldsymbol{h}_2^\theta + \boldsymbol{b}_3^\theta\big), \tag{88}$$
$$\tilde{\varphi}_\eta(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{W}_4^\theta \boldsymbol{h}_3^\theta + \boldsymbol{b}_4^\theta, \tag{89}$$

with 可训练参数 $\eta = \{\boldsymbol{W}_\ell^\theta, \boldsymbol{b}_\ell^\theta\}_{\ell=1}^4$。随后构造指向矢场 $\boldsymbol{d}(\boldsymbol{X})$，其 s

$$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{X}) = \big(\cos\varphi(\boldsymbol{X}), \sin\varphi(\boldsymbol{X})\big), \tag{90}$$

这对应于式 (72)，并满足单位长度约束 (2)。

为在不向损失函数中添加惩罚项的情况下施加边界条件，我们采用试探函数。物理位移场定义为

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}) = (\frac{X}{L}\,\Delta L, 0) + X(L - X)\,\tilde{\boldsymbol{u}}_\theta(\boldsymbol{X}), \tag{91}$$

其满足在 $X = 0$ 和 $X = L$处规定的位移边界条件。指向矢角构造如下

$$\varphi(\boldsymbol{X}) = \varphi_0 + X\,\tilde{\varphi}_\eta(\boldsymbol{X}), \tag{92}$$

从而在 $X = 0$处强制施加初始取向 φ_0。

损失函数对应于式 (25) 中定义的总势能，其中弹性贡献由式 (59) 给出。由于边界条件是通过试探函数 [29]，施加的，因此不会作为惩罚项显式出现在损失函数中。

3.4 神经网络与有限元分析的验证

为评估基于神经网络的求解器的准确性，我们将其最终平衡解与有限元分析（FEA）得到的解进行比较，考察三种不同的初始指向矢取向： $\varphi_0 = \pi/3$、 $\pi/4$和 $\pi/6$。在所有情况下，图（3 - 5）均展示了最终变形构型，包括归一化位移幅值（$|\boldsymbol{u}|^2 = u_x^2 + u_y^2$）、归一化位移分量（$u_x$ 和 u_y），以及平衡时的指向矢取向 φ。参数φ_0 表示载荷施加前参考构形中规定的均匀初始指向矢取向，该取向在狄利克雷边界条件上保持固定（$X = 0$， $Y \in (0,\ W)$）。

3.4.1 情况1： $\varphi_0 = \pi/3$

对于指向矢初始取向为 $\varphi_0 = \pi/3$ （见图（3））且相对于 x轴而言的情况，施加的右边界位移会产生以 u_x 拉伸为主的变形，同时，大变形以及变形与指向矢场之间的耦合会引发次要的横向效应。在平衡状态下，有限元分析的解显示，试样上呈现平滑的 x向位移梯度，其中 u_x 主导力学响应，而 u_y 虽较小但仍不可忽略。

神经网络再现了整体变形和指向矢场。 u_x 中的归一化位移幅值和空间梯度与有限元分析的解相似，最大差异出现在 X–梯度最陡的区域。这是预期之中的，因为 u_x 承载主要的力学响应，因此会累积最大的绝对误差。横向位移场 u_y 则符合得更好。

值得注意的是，尽管神经网络以随机初始化值开始训练，最终预测的φ 场仍与有限元分析的平衡构型高度吻合。指向矢在拉伸作用下平滑地重新取向，而网络捕捉到了这种重新取向的幅值和空间变化。差值图证实，偏差很小且空间分布平滑，没有出现虚假振荡或局部失稳。

3.4.2 情况2： $\varphi_0 = \pi/4$

当指向矢的初始取向为 $\varphi_0 = \pi/4$ （如图（4）所示）时，它位于 X 轴与 Y 轴的中间位置。这种构型使变形与指向矢演化之间的耦合更加对称。在最终平衡态中，有限元分析和神经网络得到的解都呈现出平滑的 u_x ，并在 Y 方向上略有弯曲。

在这种情况下，两种方法的结果尤其吻合。在绘图分辨率下， u_x 场和 u_y 场几乎无法区分，且差值场在整个区域内始终很小。神经网络预测的最终指向矢取向与有限元分析解高度一致，表明该网络正确捕捉了载荷作用下能量优选的重取向。由于初始取向既未与拉伸方向高度对齐，也未与其形成显著倾斜，因此该情况为耦合运动学提供了一个均衡的测试。

3.4.3 情况3： $\varphi_0 = \pi/6$

对于 $\varphi_0 = \pi/6$ ，如图（5）所示，指向矢的初始取向更接近加载方向。这使变形响应呈现出略强的各向异性，在 X 方向上的耦合更强，且 u_y中存在细微变化。在最终状态下，有限元分析解的位移分量均呈现平滑梯度，指向矢也持续向拉伸方向旋转。神经网络再次以高度吻合的结果复现了位移幅值和分量场。在边界附近以及梯度最大的区域可以看到细微差异，但这些差异仍然很小且分布平滑。预测的指向矢场收敛至有限元分析模拟中观察到的相同平衡模式，说明$DirectorNet$即使从随机初始化开始，也能成功捕捉变形与取向能之间的耦合。

3.4.4 总体评估

对于三种初始指向矢取向，神经网络都能准确再现有限元分析得到的最终平衡位移和指向矢场。最大偏差始终出现在主要加载方向（X），该方向上的梯度最强；而 u_y 和 φ 则高度吻合。尤为重要的是，该网络并未使用有限元分析数据进行训练，而是直接最小化总势能。因此，最终状态所呈现的一致性表明，结合变分损失形式的 $DeformationNet$–$DirectorNet$ 架构，足以求得耦合Cosserat模型中稳定且能量一致的平衡解。

4 结论

在这项工作中，我们运用有向介质理论（又称Cosserat 弹性）为具有微结构的材料推导了能量最小化条件，其中采用单个单位指向矢。我们设计并实现了两个多层感知机网络，通过最小化这些材料的总势能来模拟微结构介质的力学行为。该架构确保网络输出在运动学上相互独立；此外，由于采用了特定的边界条件施加形式，这些输出在运动学上也是可容许的。我们证明了损失函数满足标架不变条件。此外，我们还证明所选本构模型满足 Legendre–Hadamard不等式的强形式，因此网络输出具有材料稳定性。最后，我们将网络结果与有限元法进行对比验证，结果之间的良好一致性证实了网络输出的有效性。

5 代码库与数据可用性

本研究未使用任何数据。论文发表后，通讯作者将提供代码库。

6 贡献

MS：撰写和编辑原稿、形式分析、理论开发、神经网络设计与实现、有限元分析设计与实现、基于有限元分析的网络验证以及监督。PHG：撰写和编辑原稿、神经网络设计、基于有限元分析的网络验证以及可视化。MK：基于有限元分析的网络验证以及可视化。JLW：撰写和编辑原稿、网格敏感性分析。FN：撰写和编辑原稿以及可视化。

7 致谢

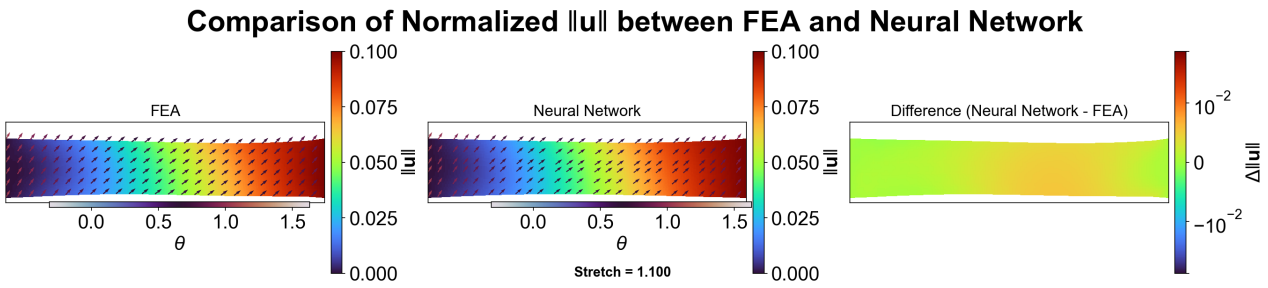
作者谨此感谢耶鲁大学的 Jay D. Humphrey 教授在本研究准备过程中给予的宝贵建议和指导

参考文献

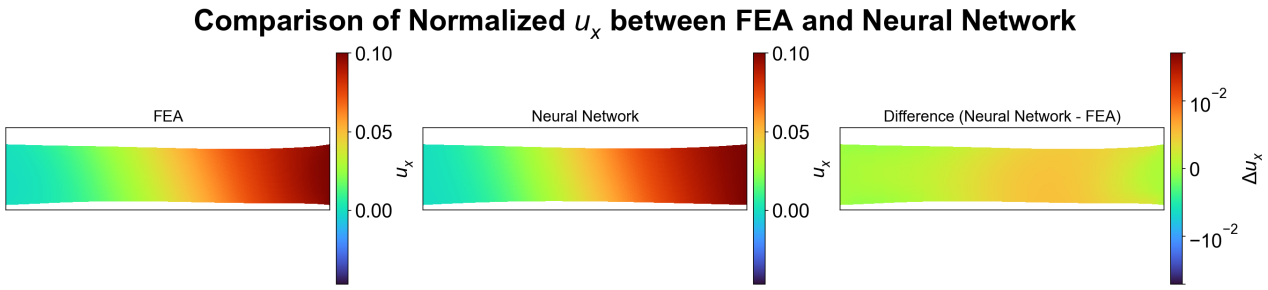
[1] Rasul Abdusalamov 和 Mikhail Itskov。《通过深度符号回归重新发现超弹性》。载于：《国际工程数值方法杂志》127（2026年1月2日）。ISSN：0029-5981。doi：10. 1002/nme.70258。[2] Virginia Agostiniani 和 Antonio DeSimone。《向列相弹性体薄片主动板模型的严格推导》。载于：Mathematics and Mechanics of Solids 25.10（2020），第 1804–1830 页。[3] A. Agrawal 和 D. J. Steigmann。《从三维液晶理论视角看不对称脂质双层》。载于：《连续介质力学与热力学》33（2021），第 591–602 页。[4] A. Agrawal 和 D. J. Steigmann。《脂质膜理论中的边值问题》。载于：《连续介质力学与热力学》21（2009），第 57–82 页。[5] Martin S Alnaes 等。《FEniCS 项目 1.5 版》。载于：《数值软件档案》3（100，2015）。ISSN：2197-8263。[6] John M Ball。《非线性弹性中的凸性条件与存在性定理》。载于：Archive for Rational Mechanics and Analysis 63.4（1976），第 337–403 页。[7] Shiladitya Banerjee 和 M Cristina Marchetti。《集体细胞迁移的连续体模型》。载于：《细胞迁移：成因与功能》（2019），第 45–66 页。[8] Jorge Luis Barrera 等。《液晶弹性体主动响应的液晶取向与形状优化》。载于：《聚合物》16（2024年5月10日），第 1425 页。ISSN：2073-4360。doi：10 .3390 / polym16101425。[9] Peiyi Chen 和 Johann Guilleminot。《用于超弹性本构模型的多凸神经网络：一种修正方法》。载于：《力学研究通讯》125（2022），第 103993 页。[10] M. Chiang 等。《细胞间摩擦与运动性驱动细胞单层中的取向序》。载于：《美国国家科学院院刊》121.40（2024），e2319310121。[11] Timothy K Chung、Nathan L Liang 和 David A Vorp。《用于预测腹主动脉瘤壁应力的人工智能框架》。载于：《工程科学应用》10（2022），第 100104 页。[12] Timothy K Chung 等。《利用人工智能增强现实可视化腹主动脉瘤的生物力学壁应力》。载于：《科学讲坛》13（2025），第 100432 页。[13] Bernard Dacorogna。《变分法中的直接法》。Springer，2008。[14] F. dell’Isola 等。《打字机式超材料：数学驱动设计及其技术挑战的一个实例》。载于：《连续介质力学与热力学》31（2019），第 851–884 页。[15] M. Epstein 和 M. J. Javadi。《梯度弹性梁大变形的运动学精确表述》。载于：《国际工程科学杂志》186（2023），第 103827 页。[16] J. L. Ericksen。《液晶平衡理论》。载于：《液晶研究进展》第 2 卷。Elsevier，1976，第 233–298 页。[17] J. L. Ericksen 和 D. Kinderlehrer。《液晶理论与应用》第 5 卷。Springer Science & Business Media，2012。[18] A. C. Eringen。《液晶的统一连续介质理论》。载于：《ARI：国际物理与工程科学杂志》50.2（1997），第 73–84 页。[19] A. C. Eringen。《对液晶指向矢理论和微极理论的评估》。载于：International Journal of Engineering Science 31.4（1993），第 605–616 页。[20] A. C. Eringen。《液晶微极理论》。载于：《液晶与有序流体》（1978），第 443–474 页。[21] R. Fedele。《三阶梯度连续体：非标准平衡方程与功共轭变量的选取》。载于：Mathematics and Mechanics of Solids 27.10（2022），第 2046–2072 页。[22] R. Fedele、L. Placidi 和 F. Fabbrocino。《广义弹性介质反问题综述：表述、实验与综合》。载于：《连续介质力学与热力学》（2024），第 1–41 页。[23] Somdatta Goswami 等。《神经算子学习：导致主动脉瘤的异质性生物力学损伤》。载于：Journal of the Royal Society Interface 19.193（2022），第 20220410 页。

[24] A. E. Green 和 P. M. Naghdi.《定向流体薄片》。载于：伦敦皇家学会学报 A：数学与物理科学 347.1651（1976），第 447–473 页。[25] A. E. Green 和 P. M. Naghdi.《连续介质理论的热力学-力学公式》。载于：《流体与固体中的非线性效应》。Springer，1996，第 161–187 页。[26] Albert Edward Green、N Laws 和 Paul Mansour Naghdi.《杆、板与壳》。载于：《剑桥哲学学会数学学报》。第 64 卷，第 3 期。剑桥大学出版社，1968，第 895–913 页。[27] B. Hendrickson、M. Shirani 和 D. J. Steigmann.《具有贴合细胞骨架膜的脂质双层平衡理论》。载于：Mathematics and Mechanics of Complex Systems 8.1（2020），第 69–99 页。[28] B. Hendrickson、M. Shirani 和 D. J. Steigmann.《非对称倾斜脂质双层的平衡方程》。载于：Mathematics and Mechanics of Complex Systems 9.2（2021），第 153–166 页。[29] Leon Herrmann.《计算力学中的深度学习：入门课程》。Springer Nature，2025。[30] L. A. Hoffmann 等.《向列相细胞单层中的手性应力》。载于：Soft matter 16.3（2020），第 764–774 页。[31] Arif Hussain、Amir Hosein Sakhaei 和 Mahmood Shafiee.《基于机器学习的材料非线性本构建模：综述》。载于：Mechanics of Advanced Materials and Structures（2024 年 12 月），第 1–19 页。ISSN：1537-6494。doi：10.1080/15376494.2024.2439557。[32] Jichul Kim.《脂质膜机械变形的连续介质力学综述》。载于：Membranes 13.5（2023），第 493 页。[33] Dominik K Klein 等.《利用神经网络实现多凸各向异性超弹性》。载于：Journal of the Mechanics and Physics of Solids 159（2022），第 104703 页。[34] Nikolaos Kontopodis 等.《综合临床、生物学、形态学和生物力学变量，利用人工智能预测腹主动脉瘤生长》。载于：Vascular 31.3（2023），第 409–416 页。[35] David S Li 等.《利用神经算子识别胸主动脉瘤决定因素时，局部扩张和可扩张性的重要性》。载于：PLOS Computational Biology 21.10（2025），e1013550。[36] Moritz Lindquist Liljeqvist 等.《机器学习辅助的几何和生物力学建模可改进小型腹主动脉瘤生长与破裂的预测》。载于：Scientific reports 11.1（2021），第 18040 页。[37] Minliang Liu、Liang Liang 和 Wei 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》。载于：Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 372（2020 年 12 月），第 113402 页。ISSN：00457825。doi：10.1016/j.cma.2020.113402。[38] L. Placidi、U. Andreaus 和 I. Giorgio.《利用线性 D4 正交各向异性二阶梯度弹性模型识别二维风琴式结构》。载于：Journal of Engineering Mathematics 103.1（2017），第 1–21 页。[39] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George E Karniadakis.《物理信息神经网络：一种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》。载于：Journal of Computational physics 378（2019），第 686–707 页。[40] P. Rangamani 和 D. J. Steigmann.《脂质膜上的可变倾角》。载于：Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 470.2172（2014），第 20140463 页。[41] P. Rangamani 等.《小尺度膜力学》。载于：Biomechanics and modeling in mechanobiology 13（2014），第 697–711 页。[42] Balaji Rengarajan、Sourav S Patnaik 和 Ender A Finol.《利用神经网络模型预测分析腹主动脉瘤壁应力》。载于：Journal of Biomechanical Engineering 143.12（2021），第 121004 页。[43] Esteban Samaniego 等.《通过机器学习以能量方法求解计算力学中的偏微分方程：概念、实现与应用》。载于：Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 362（2020），第 112790 页。[44] Milad Shirani 和 David J Steigmann.《Cosserat 弹性理论中的拟凸性与秩一凸性》。载于：《多尺度材料的理论分析、计算与实验：致敬 Francesco Dell'Isola》。Springer，2022，第 273–283 页。[45] Milad Shirani、David J Steigmann 和 Patrizio Neff.《Cosserat 弹性理论中的 Legendre–Hadamard 条件》。载于：The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics 73.4（2020），第 293–303 页。

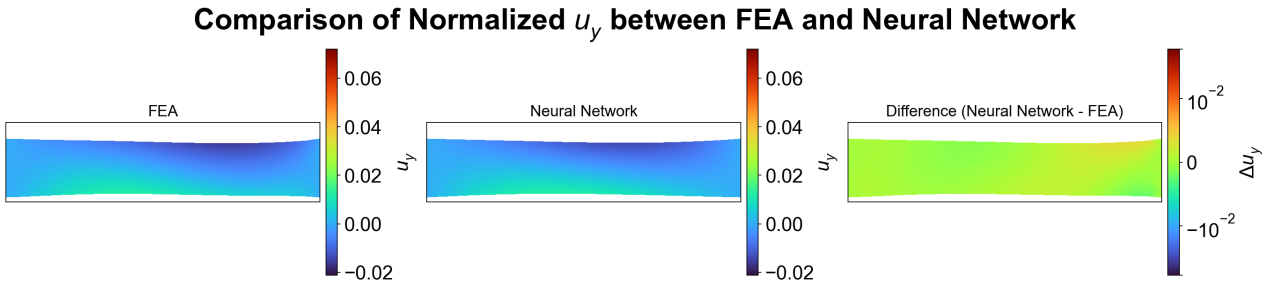
[46] Milad Shirani 等.《纤维组织和生物材料的 Cosserat 与高阶梯度混合公式》。载于：*International Journal of Solids and Structures*（2025），第 113671 页。[47] M. Spagnuolo 等.《高阶梯度模型是否也能预测宽编织式张拉整体结构的力学行为?》载于：*Mathematics and Mechanics of Solids* 26.1（2021），第 18–29 页。[48] D Steigmann、Mircea Bîrsan 和 Milad Shirani.板壳理论讲义。Springer，2023。[49] D. J. Steigmann 和 A. Agrawal.《极化脂质双层的机电力学》。载于：*Mathematics and Mechanics of Complex Systems* 4.1（2016），第 31–54 页。[50] David J Steigmann.《纤维弯曲和扭转阻力对纤维增强弹性体力学的影响》。载于：软纤维材料的非线性力学。Springer，2015，第 269–305 页。[51] David J Steigmann.有限弹性理论。牛津大学出版社，2017。[52] David J Steigmann.力学在脂质双层研究中的作用。第 577 卷。Springer，2017。[53] DJ1706449 Steigmann.《弹性壳体的 Cosserat 理论与 Kirchhoff-Love 理论之间的关系》。载于：*Mathematics and Mechanics of Solids* 4.3（1999），第 275–288 页。[54] M. Stilz 等.《张拉整体正交块的二阶梯度弹性模型与等几何分析》。载于：*International Journal of Solids and Structures* 280（2023），第 112358 页。[55] M. Stilz 等.《张拉整体圆柱结构中的手性效应》。载于：*Mathematics and Mechanics of Solids* 29.4（2024），第 818–830 页。[56] Dongliang Tan 等.《Fhcnnbio：一种融合先验物理信息、用于生物组织的纤维增强超弹性本构神经网络模型》。载于：*Complex & Intelligent Systems* 11（2025 年 10 月 10 日），第 433 页。ISSN：2199-4536。doi：10.1007/s40747-025-02071-9。[57] Epifanio G Virga.液晶变分理论。Chapman and Hall/CRC，2018。[58] Chen Wei 等.《液晶弹性体裂纹尖端处显著的应力-指向矢耦合》。载于：*Journalof the Mechanics and Physics of Solids* 183（2024），第 105522 页。[59] Xiangjun Xing 和 Leo Radzihovsky.《向列相弹性体的非线性弹性、涨落与非均质性》。载于：*Annals of Physics* 323.1（2008），第 105–203 页。doi：10.1016/j.aop.2007.10.009。[60] Xiangjun Xing 等.《涨落的向列相弹性体膜》。载于：*Physical Review E* 68.2（2003），第 021108 页。[61] V. Yashunsky 等.《向列相细胞单层中的手性边缘电流》。载于：*Physical Review X* 12.4（2022），第 041017 页。[62] Minglang Yin 等.《利用 DeepONet 模拟导致主动脉夹层的进行性壁内损伤：一种算子回归神经网络》。载于：*Journal of the Royal Society Interface* 19.187（2022），第 20210670 页。[63] Enrui Zhang 等.《G2Φnet：利用深度学习关联组织的基因型与生物力学表型》。载于：*PLOS Computational Biology* 18.10（2022），e1010660。[64] Yu Zhou、Chen Wei 和 Lihua Jin.《液晶弹性体的改进半软模型：在弹性和黏弹性响应中的应用》。载于：*Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 196（2025），第 106027 页。



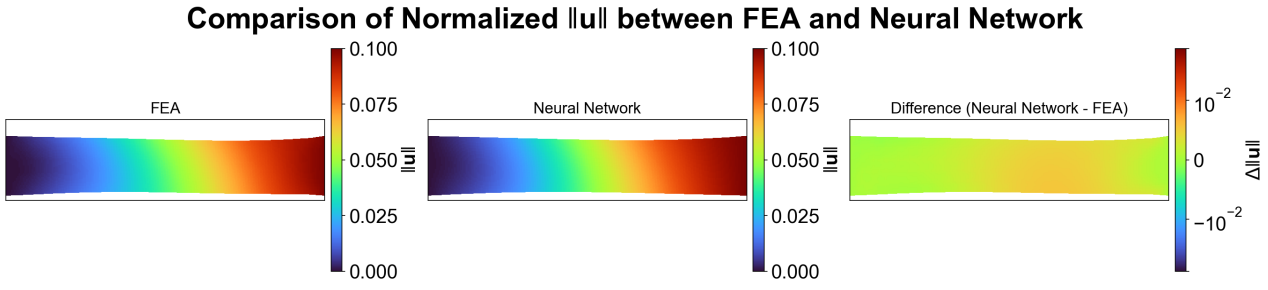
(a)



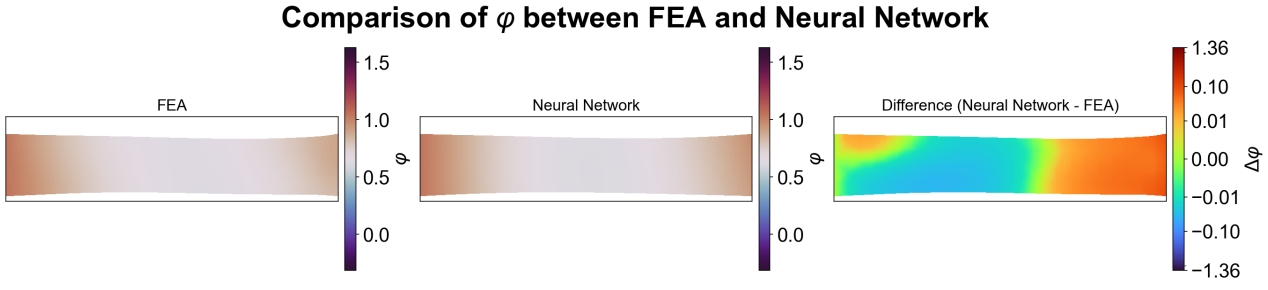
(b)



(c)

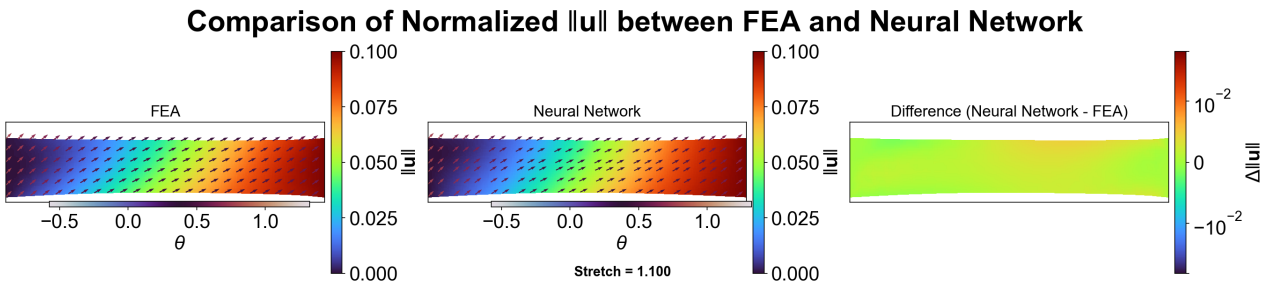


(d)

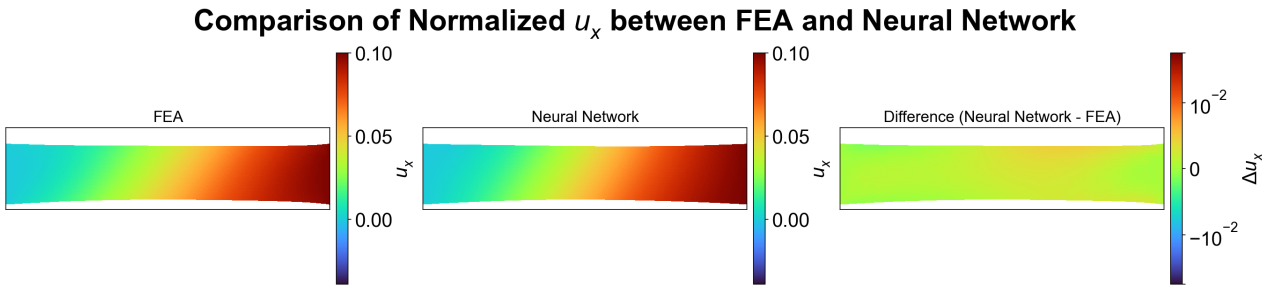


(e)

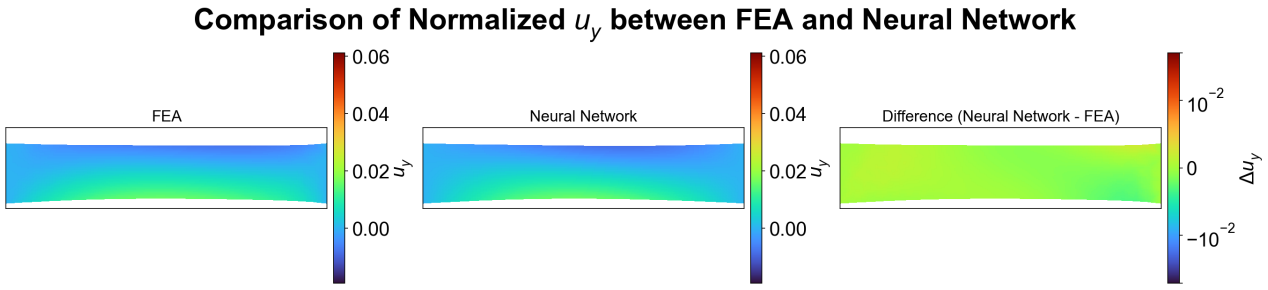
图3：针对 $\varphi_0 = \pi/3$情形，比较由有限元分析与神经网络得到的解。从右到左依次为有限元分析结果、神经网络结果以及两种解之间的差异。(a) 带有指向矢场的变形幅值，(b) 变形幅值，(c) $x-$方向的变形幅值，(d) $y-$方向的变形幅值，以及(e) 指向矢场的取向。



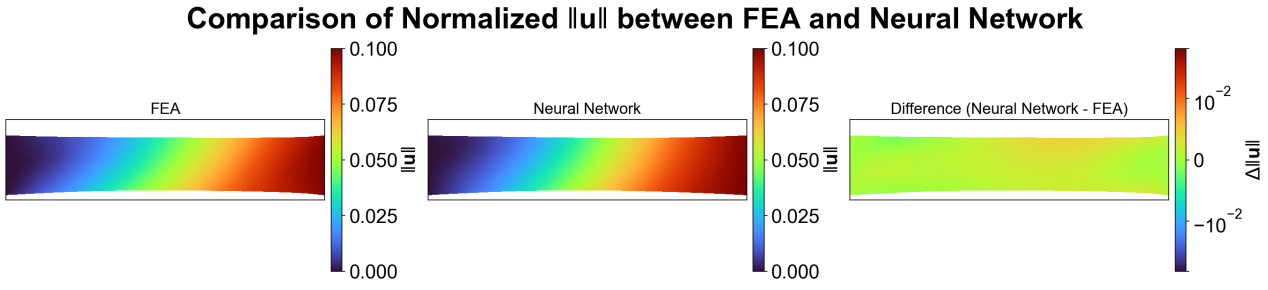
(a)



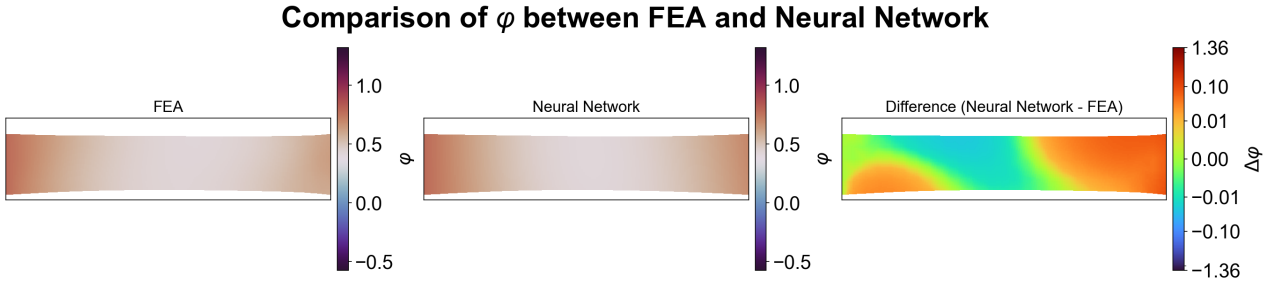
(b)



(c)

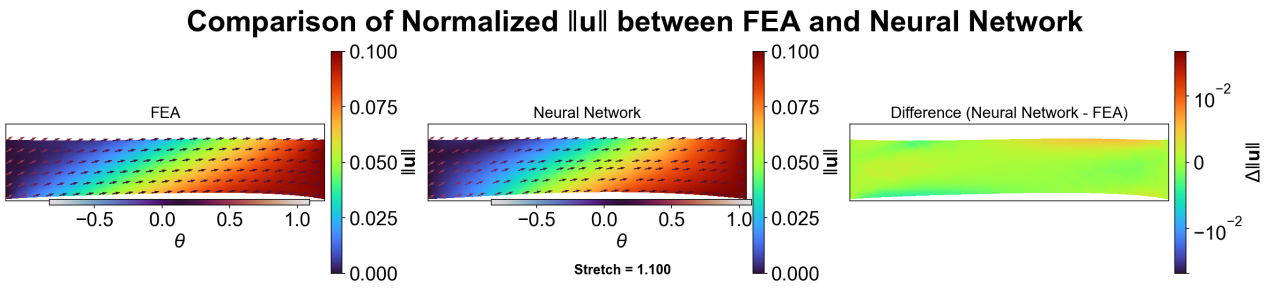


(d)

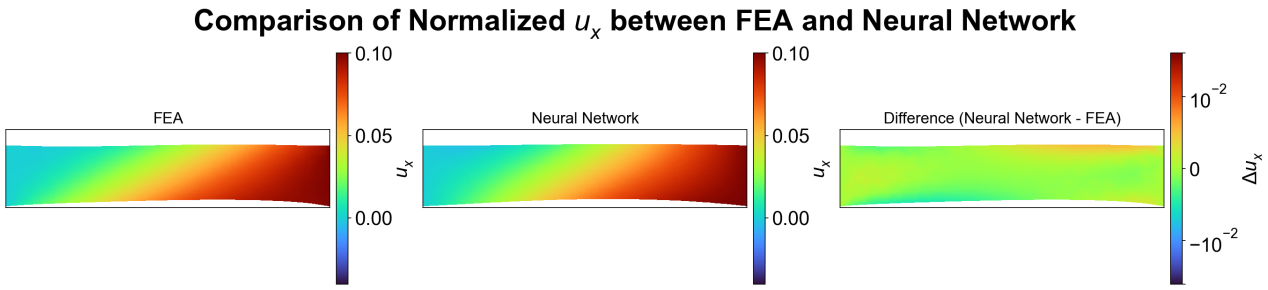


(e)

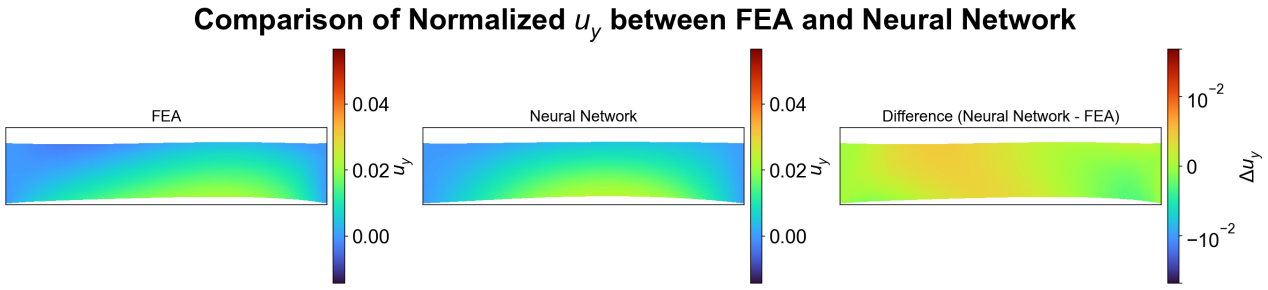
图4：对于 $\varphi_0 = \pi/4$ 情况，比较有限元分析与神经网络得到的解。从右到左依次为有限元分析的结果、神经网络的结果以及两者之差。(a) 含指向矢场的变形幅值，(b) 变形幅值，(c) $x-$方向的变形幅值，(d) $y-$方向的变形幅值，以及 (e) 指向矢场的取向。



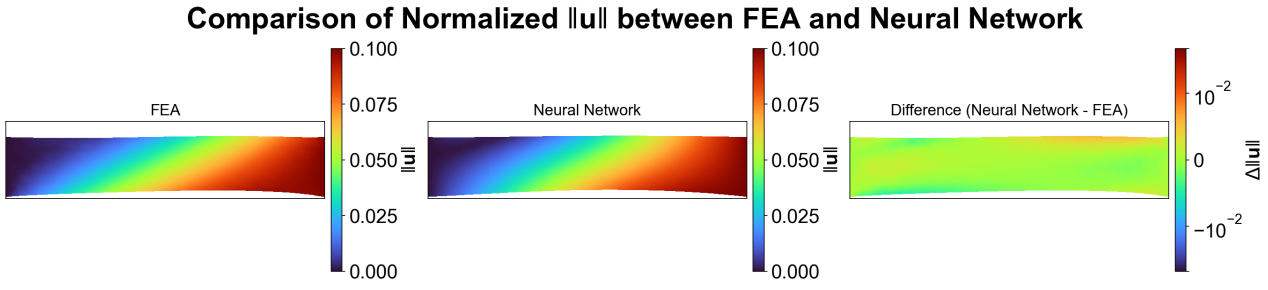
(a)



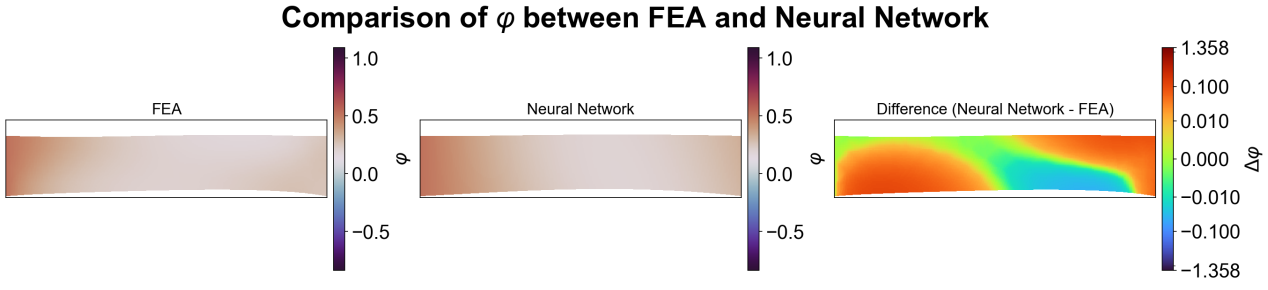
(b)



(c)



(d)



(e)

图5：对于 $\varphi_0 = \pi/6$ 的情况，有限元分析与神经网络所得解的比较。从右至左依次为有限元分析结果、神经网络结果以及两者解的差异。(a) 带有指向矢场的变形幅值，(b) 变形幅值，(c) $x-$方向的变形幅值，(d) $y-$方向的变形幅值，以及 (e) 指向矢场的取向。