arXiv:2603.19241v1 [cs.CE] 12 Feb 2026

面向工程的符号回归：大语言模型作为物理智能体，发现可用于仿真的本构定律

吴越[a,*] [a]上海大学材料基因组研究院，中国上海 200444
r
epeatsongyue@gmail.com

苏天浩[a,*] [a]上海大学材料基因组研究院，中国上海 200444
thsu0407@gmail.com

赵明川[c]科克大学数学科学学院，爱尔兰共和国科克
mzhao@ucc.ie

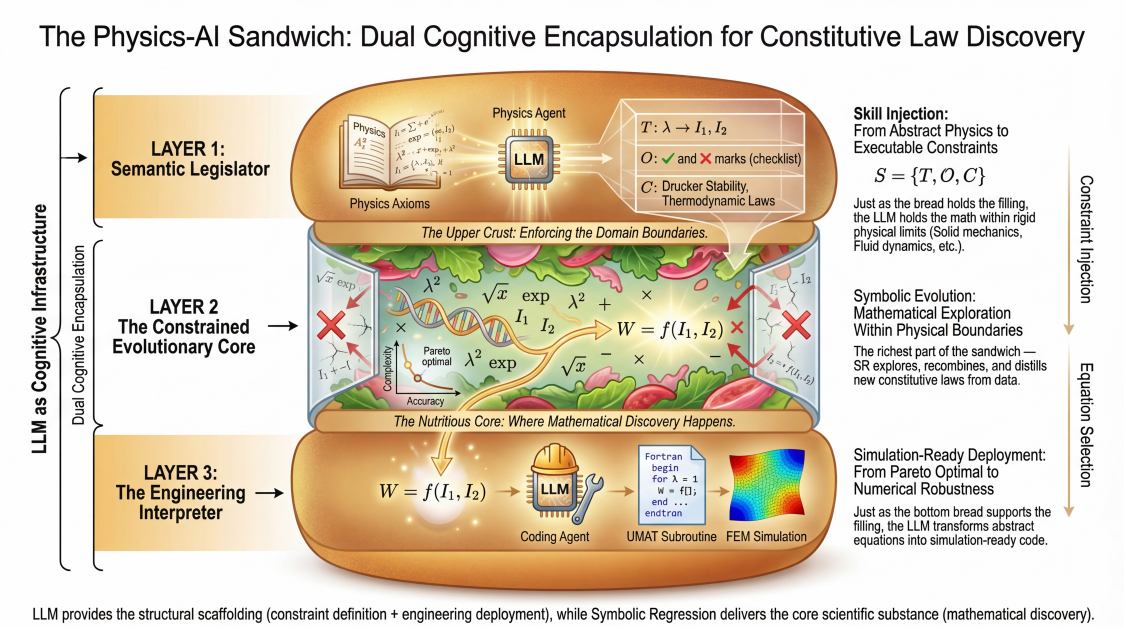
胡顺波[a,b,†] [a]材料基因组研究院[b]文化遗产保护研究所，上海大学文化遗产与信息管理学院，中国上海 200444 shunbohu@shu.edu.cn

潘登[a,†] [a]上海大学材料基因组研究院，中国上海 200444 DPan_
MGI@shu.edu.cn

摘要

复杂材料本构定律的发现历来面临两难：高保真数据驱动方法需要成本高昂的全场实验数据，而传统工程拟合在标定区间之外往往会产生数值不稳定的模型。在这项工作中，我们提出了一个面向工程的符号回归（EO-SR）框架，通过利用大语言模型（LLMs）作为“物理信息智能体”来弥合这一差距。与不受约束的符号回归不同，我们的框架利用大语言模型智能体以零样本方式合成可执行的物理约束——具体而言，即热力学一致性和参考系无关性——将搜索过程从数学曲线拟合转变为由物理定律指导的发现引擎。我们使用标准 Treloar 数据集验证了这一方法在类橡胶材料超弹性建模中的表现。该框架自主识别出一种新型混合本构定律，将 Mooney-Rivlin 线性基式与有理锁定项相结合。所发现的模型不仅在多轴变形模式下实现了高预测精度（包括对纯剪切的零样本预测），还保证了无条件凸性。有限元验证表明，工业标准模型（例如 Ogden N=3）在严重横向压缩下会因数值奇异性而失效，而 EO-SR 发现的模型则保持了稳健收敛。本研究为发现兼顾数据准确度与严格物理定律、可用于仿真的本构闭合关系，确立了一种通用且低门槛的途径。

*这些作者对本研究贡献相同。
†通讯作者。



LLM provides the structural scaffolding (constraint definition + engineering deployment), while Symbolic Regression delivers the core scientific substance (mathematical discovery).

1 引言

复杂物理系统的数学描述依赖于两大基本支柱：普适守恒定律（例如质量、动量和能量守恒）[1, 2] 以及材料特定的本构关系[3]。前者由第一性原理确立，而后者作为定义物质如何与外场相互作用的数学闭合关系，仍是计算物理中认识论不确定性的主要来源[4]。从固体力学中的应力-应变响应，到流体动力学中的湍流闭合模型，再到热力学中的通量-梯度关系，发现准确、可解释且数学上稳健的本构定律，始终是各科学领域面临的重大挑战[5]。

在“科学人工智能”时代，本构建模范式正在经历深刻变革[6, 7]。数据驱动方法，尤其是深度学习[8] 和符号回归[9], , 有望实现从实验观测中自动发现这些定律。然而，这些领域中仍普遍存在一个关键的“有效性鸿沟”。本构模型不仅仅是将拟合误差降至最低的回归曲线；它还必须严格遵守一系列内在的物理约束，例如热力学一致性[10, 11] （如熵产生不等式）、框架无关性（客观性）以及数学稳定性[12] （如椭圆性或凸性）。忽略这些约束，会使纯数据驱动算法生成“违反物理规律”的表达式——这些模型可能对训练数据具有很高的精确度，却违背基本物理定律[13], , 从而导致非物理预测，或在后续数值模拟中出现灾难性的收敛失败。

从历史上看，本构定律的发现分化为两种截然不同的范式，而每种范式都存在限制其工业适用性的固有局限。

第一种范式通常称为“**高保真数据驱动**”方法，旨在从丰富而异质的数据源中提取本构流形。利用数字图像相关（DIC）结合虚拟场法（VFM）[14, 15] 或物理信息神经网络（PINNs）[6, 8]的技术，在无需假设特定解析形式的情况下，成功捕捉复杂材料行为，取得了显著成果。然而，这种方法本质上提高了入门门槛。它需要昂贵的实验装置和专业的数据处理流程，而这些通常难以在标准工程环境中获得。此外，所得模型往往以“黑箱”神经网络[16], 的形式进行参数化，这可能掩盖连续介质力学的现象学本质，以牺牲可解释性为代价换取局部精确度。

第二种范式，即“**传统工程拟合**”方法，依赖于针对标准单轴或双轴拉伸数据，对预先定义的解析模板（例如 Ogden[17], Yeoh[18], Mooney-Rivlin[19, 20]）进行标定。尽管这种方法易于使用，且已广泛集成到商业有限元（FE）软件中，但它存在一个关键盲点：拟合精度与数值稳健性相互脱节。正如本研究所示，仅针对拟合误差（均方误差）进行优化的模型，往往会违反基本的热力学约束，例如在标定范围[10] 之外违反 Drucker稳定性判据。这会导致“拟合-仿真差距”[21], , 即某个模型

虽然能够完美拟合实验曲线，却会因非凸性或伪软化等数学伪影，在复杂边值问题中立即导致收敛失败。

理想情况下，面向工程的解决方案应弥合这一鸿沟：既能处理低成本的标准数据，又能确保严格的物理有效性。符号回归（SR）通过搜索自由形式的解析方程，提供了一条很有前景的路径[9, 22] 。然而，标准符号回归充当的是不受约束的数学搜索引擎，容易生成“物理上无效”的表达式[13],——这些方程虽能拟合数据，却违背了基本的物理定律。

大语言模型（LLMs）的迅速崛起，正是为此带来了变革性的解决方案。[23, 24, 25]除了传统的自然语言处理能力之外，现代基础模型还展现出了科学推理[26, 27] 和自动代码合成[28, 29, 30]方面的新兴能力。如今，它们能够弥合抽象物理原理（例如“应变能必须是凸函数”）与可执行数学逻辑之间的语义鸿沟。在这项工作中，我们提出了一个面向工程的符号回归（EO-SR）框架，它利用大语言模型，并非将其视为生成式黑箱，而是将其作为“物理信息智能体”[31, 32, 33, 34]，明确约束发现过程。
本文的核心贡献如下：

1. **基于技能的发现架构：** 我们提出了一种模块化框架，其中大语言模型智能体充当领域专家，以零样本方式生成可执行的物理约束（例如凸性、框架无关性），以指导符号演化。这使符号回归从数学曲线拟合器转变为受物理规律支配的发现引擎。2. **弥合拟合-仿真差距：** 我们证明，将热力学约束（具体而言，德鲁克稳定性）注入损失函数后，该框架能够从标准 Treloar 数据[35] 中发现可在有限元分析（FEA）中无条件保持稳定的本构定律，从而消除传统拟合所伴随的数值风险。3. **发现最优形式：** 该框架识别出一种新颖的混合本构模型，将 Mooney-Rivlin 的线性特征与有理锁定项[36]相结合。与行业标准模型（Ogden、Yeoh）相比，该模型在泛化至纯剪切和数值稳健性方面表现更优，验证了所提方法的有效性。

2 方法论

2.1 EO-SR 框架架构

所提出的面向工程的符号回归（EO-SR）框架，旨在解决纯数据驱动的机器学习与计算力学严格安全要求之间的根本脱节。传统符号回归往往充当不受约束的数学搜索引擎，容易生成不符合物理规律的表达式；与之不同，EO-SR 被构建为一个模块化、受物理规律支配的发现系统。所提出框架的总体架构如图 1 所示。该框架由三个相互耦合的模块组成：用于标准化的数据解析器、用于整合物理知识的技能注入器，以及用于约束优化的符号演化引擎。

该流程首先由**数据解析器**启动，它将原始实验输入（单位或格式可能各不相同）抽象为标准化的张量表示 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)\}_{i=1}^{N}$。无论底层材料领域如何，该模块都能确保后续发现过程在一致的数值流形上进行。

该架构的核心是**技能** 注入器，这是一个旨在弥合抽象物理定律与数值回归之间差距的接口。我们将领域知识形式化为一个“技能”元组 $\mathcal{S} = (\mathcal{T}, \mathcal{O}, \mathcal{C})$，它充当搜索空间的边界条件。其中，$\mathcal{T}$: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$ 表示一种坐标变换函数，可将原始输入映射到符合物理客观性的特征空间（例如不变量或无量纲数）； $\mathcal{O}$ 表示根据领域数学性质定制的可容许算子集；而 $\mathcal{C}$ 表示一组由守恒定律或热力学原理推导得出的不等式约束。

符号演化引擎 作为求解器，通过执行遗传搜索算法来确定函数形式 f： $\mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ ，将转换后的特征映射到目标变量。重要的是，搜索并非仅由拟合优度决定，而是由动态损失函数 $\mathcal{L}$ 引导，以确保满足注入的技能。全局优化问题可表述为：

$$\min_{f \in \mathcal{F}_{\mathcal{O}}} \left(\mathcal{L}_{fit}(f, \mathcal{D}) + \lambda_{reg} \Omega(f) + \sum_{c \in \mathcal{C}} \lambda_c \mathcal{P}(c, f) \right) \tag{1}$$

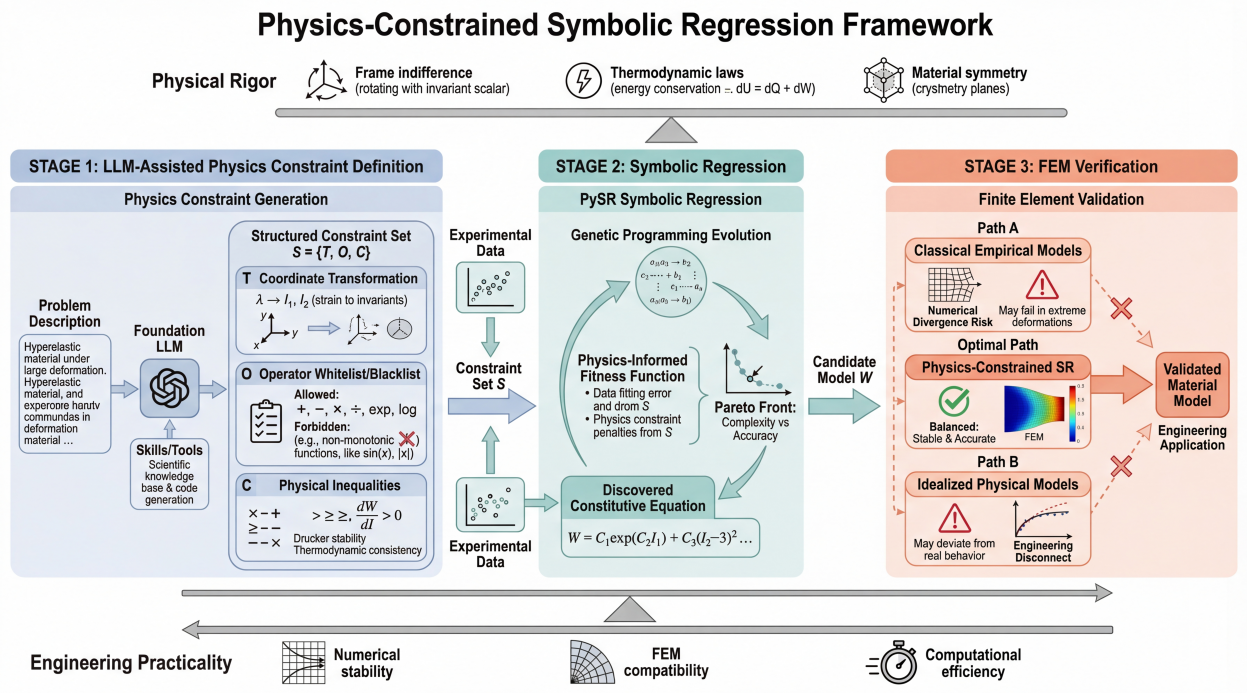


图1：**面向工程的符号回归（EO-SR）框架概览**。该工作流通过三个集成阶段，旨在连接物理严谨性与工程实用性。**阶段1（技能注入）：**基础大语言模型充当领域智能体，将自然语言问题描述转换为结构化约束集 $\mathcal{S} = \{\mathcal{T}, \mathcal{O}, \mathcal{C}\}$，定义坐标变换、算子白名单和物理不等式（例如德鲁克稳定性）。**阶段2（约束发现）：**符号回归引擎在物理信息驱动的适应度函数约束下执行遗传搜索，在数据保真度与由 $\mathcal{S}$ 推导出的惩罚项之间进行平衡。**阶段3（有限元法验证）：**对发现的模型进行严格的有限元验证。不同于存在数值发散风险的经典经验模型（路径A）或缺乏灵活性的理想化模型（路径B），EO-SR方法确保所识别的本构定律既具有经验准确性，又具备数值稳健性（最优路径）。

其中，$\mathcal{F}_{\mathcal{O}}$ 是由算子集 $\mathcal{O}$定义的函数空间，$\Omega(f)$用于量化模型复杂度（例如树深度），而 $\mathcal{P}(c,\ f)$是一个惩罚泛函，用于量化对物理约束 c的违反程度。通过最小化这一复合目标，该框架确保发现的模型位于准确度、简洁性和物理一致性的帕累托前沿上。

2.2 基于技能的约束机制 基于知识的约束机制 智能体

EO-SR框架的一项显著特点是能够自动将高层次物理概念转化为可执行的数学约束。这一过程由一个大语言模型（LLM）——**具体而言，是Gemini3-pro[37]**——充当物理信息智能体来实现。框架并不依赖僵化的硬编码规则，而是利用智能体基于其内部参数化知识，通过直接的思维链推理合成技能元组 $\mathcal{S}$。

收到自然语言领域描述（例如“各向同性超弹性”或“不可压缩流体动力学”）后，智能体会推导出必要的数学属性，并生成相应的 Python 逻辑，用于变换 $\mathcal{T}$、算子 $\mathcal{O}$ 和约束 $\mathcal{C}$。这免去了手动推导或使用外部检索数据库的需要，实现了从抽象概念到计算约束的零样本转换。

对于约束集 $\mathcal{C}$，智能体通常会生成形式为 $g(\mathbf{z}) \geq 0$ 的不等式条件，其中 $\mathbf{z}$ 表示状态变量或其导数。为将这些不等式纳入符号回归引擎的基于梯度的优化中，我们采用修正线性单元（ReLU）方法构造惩罚泛函 $\mathcal{P}$。对于要求物理量 $Q(f)$ 为正的一般约束，惩罚定义如下：

$$\mathcal{P}(Q, f) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} \mathrm{ReLU}\left(-Q(f(\mathbf{z}_j))\right)^2 \tag{2}$$

其中， M 表示状态空间中的采样点数量。这种表述确保物理有效区域产生的惩罚为零，而违反约束则会产生二次代价，从而引导进化搜索回到物理可行流形。该机制使框架无需对底层搜索算法进行特定修改，即可施加复杂的、依赖导数的先验，例如热力学稳定性或能量守恒。

2.3 实例化：超弹性技能

为了验证所提出框架的有效性，我们让物理信息智能体为类橡胶材料构建本构建模工作流。收到领域描述符“各向同性超弹性”后，智能体通过检索并综合连续介质力学的基本原理，实例化了一个特定的技能元组，记作 $\mathcal{S}_{hyper} = (\mathcal{T}_{iso},\ \mathcal{O}_{mono},\ \mathcal{C}_{stab})$。

第一个组成部分——变换逻辑 $\mathcal{T}_{iso}$——是根据材料不可压缩性条件（$\det\mathbf{F} = 1$）和框架无关性要求推导得出的。智能体认识到，各向同性超弹性固体的应变能密度 W 必须仅取决于右Cauchy-Green变形张量的主不变量。为了满足归一化条件，即应变能在未变形状态下为零（$W(\mathbf{I}) = 0$），智能体~~构建了变换逻辑 $\mathcal{T}_{iso}$，将实验拉伸比 λ 映射到平移后的不变量空间 I_1，I_2~~（其中 $I_k = I_k - 3$），并严格遵守不可压缩约束（$J = 1$）。单轴拉伸（UT）、等双轴拉伸（ET）和纯剪切（PS）的具体映射推导如下：

$$\mathcal{T}_{iso} : \lambda \mapsto \begin{cases} \text{UT:} & \tilde{I}_1 = \lambda^2 + 2\lambda^{-1} - 3, \quad \tilde{I}_2 = 2\lambda + \lambda^{-2} - 3 \\ \text{ET:} & \tilde{I}_1 = 2\lambda^2 + \lambda^{-4} - 3, \quad \tilde{I}_2 = \lambda^4 + 2\lambda^{-2} - 3 \\ \text{PS:} & \tilde{I}_1 = \tilde{I}_2 = \lambda^2 + \lambda^{-2} - 2 \end{cases} \tag{3}$$

这一变换确保当伸长比为 $\lambda = 1$时，输入符号回归引擎的值为零，从而隐式满足零能量约束，无需在损失函数中添加额外的惩罚项。

对于算子集 $\mathcal{O}_{mono}$，智能体对标准数学库进行了上下文感知剪枝。鉴于超弹性材料通常表现出单调应变硬化行为，智能体严格将周期函数（如 sin、cos）排除在搜索空间之外，因为它们的振荡特性与非负能量耗散的热力学要求相矛盾，并可能导致非物理软化状态。相反，允许使用的算子集经过优化，包含指数函数（exp）和幂函数（pow），它们对于捕捉大变形下聚合物链锁定所导致的剧烈刚化至关重要。

最后，为确保热力学一致性，智能体基于Drucker稳定性判据制定了约束集 $\mathcal{C}_{stab}$。该判据要求，外部牵引力对任意位移增量所做的功必须为非负。在应变能势的背景下，这意味着应变能势关于变形不变量具有全局凸性。智能体通过自动微分计算所发现函数~~ ~~$W(I_1, I_2)$的Hessian矩阵，将其作为硬约束加以实现：

$$\mathbf{H}_W = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial \tilde{I}_1^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial \tilde{I}_1 \partial \tilde{I}_2} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial \tilde{I}_2 \partial \tilde{I}_1} & \frac{\partial^2 W}{\partial \tilde{I}_2^2} \end{bmatrix} \succeq 0 \tag{4}$$

在进化搜索过程中，任何在关注域内违反$\mathbf{H}_W$ 正半定性的候选表达式（即 $\det(\mathbf{H}_W) < 0$或 $\mathrm{Tr}(\mathbf{H}_W) < 0$）都会受到重罚。这一机制充当“物理过滤器”，确保 EO-SR框架生成的本构定律不仅能够准确拟合实验曲线，而且在数学上也足够稳健，可用于后续有限元分析。

2.4 优化与发现过程

超弹性技能（$\mathcal{S}_{hyper}$）完全实例化后，便部署符号演化引擎来探索搜索空间。优化过程配置为高吞吐量进化策略，并利用分布式岛模型防止过早收敛。针对类橡胶材料这一具体示例，计算预算设为 30 个并行种群、每个种群迭代 100 次，由 4 个并发进程驱动。为保持数学表达简洁，并防止生成计算代价高昂的“臃肿”表达式，将表达式复杂度（maxsize）的硬性上限设为 18 个节点。此配置兼顾了探索广度与所得表达式的可解释性。

进化搜索完成后，引擎会输出帕累托前沿——一组非支配解，代表拟合精度（均方误差）与模型复杂度之间的最优权衡。传统方法往往依赖纯几何启发式方法（例如“肘部法”）来选出单一的“最佳”模型，但这类指标无法捕捉对模拟就绪至关重要的微妙数学属性。

符号回归中的一个根本挑战在于，基于惩罚的约束（例如 $\det \mathbf{H}_W \geq 0$）仅在离散采样点上得到强制执行。这使发现的模型容易受到间隙不稳定性的影响——采样数据点之间可能仍存在小范围的负曲率（非凸性）。在有限元分析中，即使只是局部违反德鲁克稳定性判据，也可能导致椭圆性丧失，并使求解器立即发散。

为弥合这一差距，我们引入了智能体辅助选择阶段。排名前k的候选模型会被反馈给配备专门本构建模技能的物理信息智能体。与将公式视为计算图的符号回归引擎不同，该智能体利用技能中编码的领域知识，对表达式的解析形式进行审查。具体而言，它优先选择由固有凸的构建模块组成的候选模型，而不是可能发生振荡的高阶多项式。例如，在技能指引下，该智能体会识别出，形式为 $\frac{A}{B-I_1}$ 的有理项（其中 $A,\ B > 0$）可在物理域（$\overline{I_1} < B$）内保证严格凸性，与仅满足网格数值检验的模型相比，能提供更可靠的稳定性保证。

此外，智能体倾向于选择具有明确物理解释的表达式——例如有限可伸长极限（奇异性）或新胡克线性——而非数学上晦涩的构造（如嵌套根式）；后者虽可能得到相近的均方误差值，却缺乏理论依据。通过整合这一语义审查，框架确保所选模型不只是拟合精度高的回归曲线，还是一种结构稳健、适用于复杂边值问题的本构闭合关系。

3 结果

为展示所提出的面向工程的符号回归（EO-SR）框架的有效性与稳健性，我们选取类橡胶材料的超弹性建模作为代表性示例。之所以选择这一问题作为基准，是因为它具有固有挑战：高度非线性、不可压缩约束，以及难以兼顾拟合精度与数值稳定性（德鲁克稳定性）。

不同于近期依赖大量全场测量数据（如基于DIC的VFM）的数据驱动方法，我们旨在验证所提出的框架能否仅凭标准工业测试数据（单轴和双轴拉伸）提取高性能本构定律。广受该领域认可的“黄金标准”Treloar数据集，将作为此次验证的真实值。

本节遵循我们方法论的工作流程，从四个视角系统评估所发现的模型：

- **模型发现：** 通过帕累托前沿分析复杂度与准确度之间的权衡。
- **拟合与泛化：** 验证模型在未见变形模式（如纯剪切）上的预测能力。
- **物理一致性：** 严格检验热力学稳定性和物理极限。
- **工程实现：** 评估复杂边界条件下有限元模拟（有限元法）的数值稳健性。

3.1 帕累托前沿与模型发现

模型复杂度与预测精度之间的权衡通过帕累托前沿（图2）直观呈现。由凸性引导损失函数驱动的符号回归（SR）算法探索了数千个候选表达式，以识别最优本构模型。

模型选择策略 帕累托前沿呈现出明显的“肘部”形态。

- **低复杂度区域（复杂度 < 10）：** 经典唯象模型，例如新胡克模型（复杂度=3）和 Mooney-Rivlin 模型（复杂度=5），位于最左侧。尽管数学形式简洁，但它们的拟合误差很高（均方误差 > 0.3），表明它们无法充分拟合高度非线性的 Treloar 数据集。
- **高复杂度区域（复杂度 > 17）：** 随着复杂度增加，拟合误差显著下降。然而，不受约束的搜索往往会产生“臃肿”的数学结构。例如，在复杂度 17 时找到的非凸解（Sqrt-Eq）取得了非常低的均方误差（0.006），但使用了嵌套的、非物理的

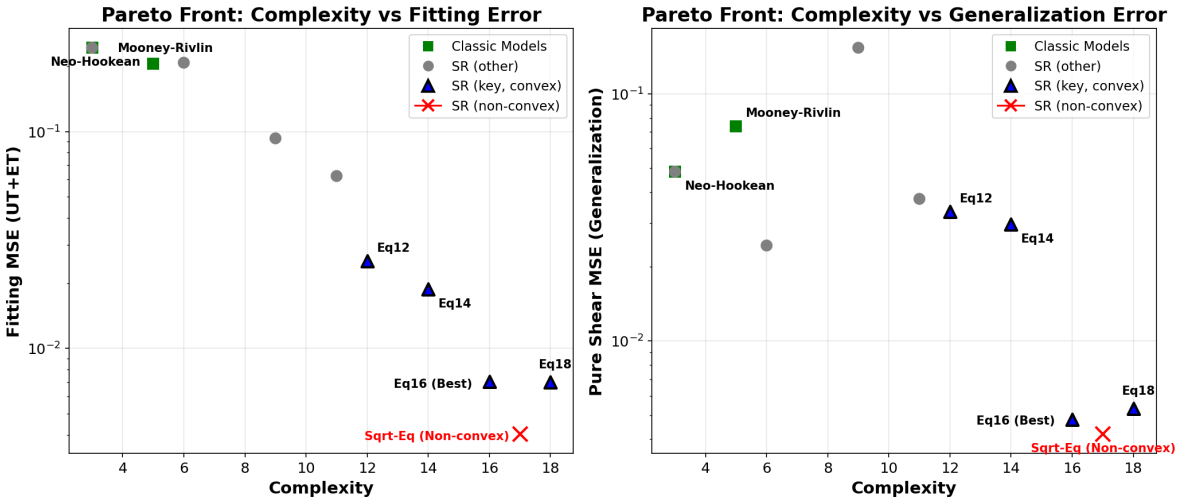


图2：**已发现本构模型的帕累托前沿分析**。这些图展示了数学复杂度（节点数量）与准确度之间的权衡。**（左）**训练数据（单轴 + 等双轴）上的拟合均方误差。**（右）**未见过的纯剪切数据上的泛化均方误差。所提出的模型（**Eq16**，蓝色三角形）确定了一个最优的“肘点”，在稀疏性和精确度之间实现了平衡。请注意，不受约束的搜索找到了误差更低的解（**Sqrt-Eq**，红色叉号），但由于违反了凸性（德鲁克稳定性）约束，该解被舍弃。

结构：

$$W_{non-convex} = \sqrt{1.43\left[\exp\left(\sqrt{\sqrt{\exp(0.067I_1)}+2.22}\right)+\frac{I_1+I_2-1.01}{1.87}\right]} \tag{5}$$

尽管该方程准确度较高，却违反了德鲁克稳定性判据（将在后续章节讨论），并且是过拟合噪声的典型案例。

- **最优权衡（所提出的模型）：**在复杂度为16（Eq16）时找到了最为均衡的解。该模型的训练均方误差为0.008，与高阶级数展开相当，但结构明显更稀疏。它处于帕累托曲线的“最佳平衡点”，在避免不必要的数学复杂度膨胀的同时，将误差降至最低。

所发现模型的结构 我们的框架所发现的性能最佳模型（Eq16）如下：

$$W(\tilde{I}_1,\tilde{I}_2) = 0.031(3.75\tilde{I}_1+\tilde{I}_2)+\frac{\tilde{I}_1}{77.9-1.05\tilde{I}_1} \tag{6}$$

其中 $\tilde{I}_1 = I_1 - 3$ 且 $\tilde{I}_2 = I_2 - 3$。

该公式并非 单纯的统计拟合，而是由算法自动合成的混合物理模型 ：

- 线性项（$0.116\tilde{I}_1 + 0.031\tilde{I}_2$）：第一部分与经典 Mooney-Rivlin 模型完全对应，能够捕捉小到中等变形范围内的线弹性。所发现的参数比值 C_{10}/C_{01} ≈3.75 与典型类橡胶材料的特性十分吻合。
- 有理项（$\frac{\tilde{I}_1}{77.9-1.05\tilde{I}_1}$）：第二部分引入了一个带有奇点的有理函数。当 $\tilde{I}_1$ 趋近于≈ 74.2时（对应的伸长率为 $\lambda \approx 8.8$），应变能趋于无穷大。该项起到类 Gent 锁定函数的作用，在物理上表示聚合物链的有限伸展性。

表1总结了帕累托前沿上的顶级候选公式。值得注意的是，尽管 Sqrt-Eq 的误差略低，但它引入了额外项，却没有明确的物理依据。因此，选择 Eq16 作为最优本构定律进行进一步验证

3.2 拟合精度与泛化能力

为评估发现的本构定律（Eq16）的预测保真度，我们将其性能与实验数据以及两个行业标准基准进行了比较：Yeoh 模型（N=3）（代表多项式展开）

表1：帕累托前沿上筛选出的顶尖候选本构模型汇总。所提出的模型（Eq16）在复杂度与物理特性捕捉能力之间实现了最佳权衡。

模型 ID	复杂度	均方误差（拟合）	数学结构	物理评述
Mooney-Rivlin	5	~ 0.35	$C_{10}\tilde{I}_1 + C_{01}\tilde{I}_2$	无法充分拟合大变形
Eq12	12	~ 0.015	$\frac{\tilde{I}_1}{c_1\tilde{I}_1+c_2}$	遗漏剪切分量
Eq16（最佳）	**16**	~ 0.008	$W_{MR} + \frac{\tilde{I}_1}{\tilde{I}_{lim}-\tilde{I}_1}$	**捕捉锁定与剪切效应**
Sqrt-Eq	17	~ 0.006	$\sqrt{\exp(\ldots)}$ + 多项式	**非凸**（不稳定）

注： *Comp.* 表示复杂度分数（表达式树中的节点数）。 W_{MR} 表示线性 Mooney-Rivlin 项。 $\tilde{I}_1 = I_1 - 3$ 和 $\tilde{I}_2 = I_2 - 3$ 是平移不变量。

和 Ogden 模型（N=3）（代表高阶级数展开）。图 3 展示了三种变形模式下的应力-伸长响应：单轴拉伸（UT）、等双轴拉伸（ET）和纯剪切（PS）。

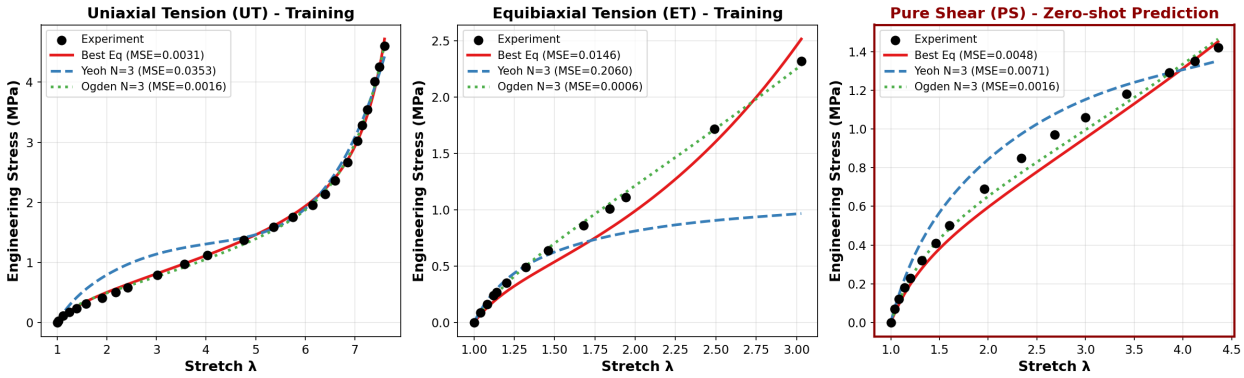


图 3：**发现模型与行业基准的性能比较**。在以下条件下评估应力-伸长响应：**（左）**单轴拉伸（训练）、**（中）**等双轴拉伸（训练）以及**（右）**纯剪切（零样本预测）。与 Yeoh 模型（N=3，蓝色虚线）相比，所提出的符号回归模型（**Eq16**，红色实线）展现出更强的多轴能力；Yeoh 模型无法捕捉等双轴响应。尤为重要的是，在纯剪切状态下（未用于校准），符号回归模型能够准确预测实验数据（$MSE \approx 0.0048$），验证了其物理泛化能力优于多项式过拟合。

校准性能（单轴拉伸和等双轴拉伸）模型仅使用单轴拉伸和等双轴拉伸数据集进行校准。如图3左侧和中间面板所示，所提出的SR模型（红色实线）与实验数据高度吻合。

- **单轴拉伸：** 模型捕捉到了完整的“S形”曲线，包括初始软化以及大应变下的刚化（$\lambda > 6$），均方误差为0.0031。
- **等双轴拉伸：** 此处展现了所发现模型的一项关键优势。Yeoh 模型（蓝色虚线）仅依赖第一不变量 I_1，因此会显著低估较大应变（$MSE \approx 0.2060$）下的应力；而SR模型能够准确追踪双轴硬化行为~（$MSE \approx 0.0146$）。这一改进归功于Eq16中纳入了线性 I_2 项，该项有效捕捉了基于 I_1的模型固有地无法反映的变形模式依赖性。
- **基准比较：** 值得注意的是，Ogden 模型（绿色虚线）的训练误差最低。这是预期之中的，因为 Ogden 模型采用了 6 个独立参数（而 Eq16 中为 4 个），并且在数学上属于级数展开，能够紧密贴合数据点。然而，SR 模型以明显更稀疏且更具可解释性的结构，实现了相当的准确度。

零样本泛化（纯剪切）检验本构模型稳健性的最佳方式，是考察其在校准时未使用的变形模式下的表现。图 3 右侧面板展示了纯剪切（PS）条件下的“零样本”预测。
所发现的本构定律的稳健性，在纯剪切状态下得到了最严格的检验；这种变形模式在符号搜索过程中完全没有出现。尽管处于这种“零样本”条件下，SR模型仍给出了

极为准确的预测（$MSE \approx 0.0048$），生成的曲线几乎直接穿过实验数据点。这一表现凸显了不同建模方法之间的关键差异：Yeoh 模型呈现出人为的刚化响应，导致应力被高估，这是多项式过拟合的典型表现；而SR模型则能正确插值得到单轴与双轴极限之间的材料响应。这一能力完全归功于其混合结构：该结构将 Mooney-Rivlin 线性项与有理锁定项相结合。这证实，该框架所识别的是具有真实物理效度的本构定律，而非仅仅过拟合特定加载路径。

3.3 热力学一致性与稳定性分析

拟合精度描述模型对过去观测的复现程度，而热力学一致性则决定模型在物理上是否可接受，以及用于未来预测时在数值上是否安全。因此，我们严格依据 Drucker稳定性判据评估所发现的本构定律（Eq16），确保其满足有限元实现的严格要求。

全局凸性与能量景观 超弹性稳定性的首要条件是应变能˜ ˜密度函数 $W(I_1,\ I_2)$必须严格凸。图 4 展示了不变量相空间中能量曲面的曲率，以评估这一性质。所提出的模型（Eq16）呈现出平滑的“凸碗”形状，整个定义域内曲率均为正，从几何上保证 Hessian矩阵保持半正定。这一性质确保对于任意变形路径，材料响应都是唯一且稳定的（$\det(\mathbf{H}) \geq 0$）。相比之下，无约束解（Sqrt-Eq）尽管拟合误差较低，却显现出明显的负曲率区域（鞍点）。这种非凸性在计算力学中构成严重风险，因为这意味着在特定的复杂加载条件下，全局刚度矩阵可能变得奇异，导致求解器立即不收敛。这一对比验证了在我们的框架中嵌入“基于凸性的”损失函数、以滤除数学伪影的必要性。

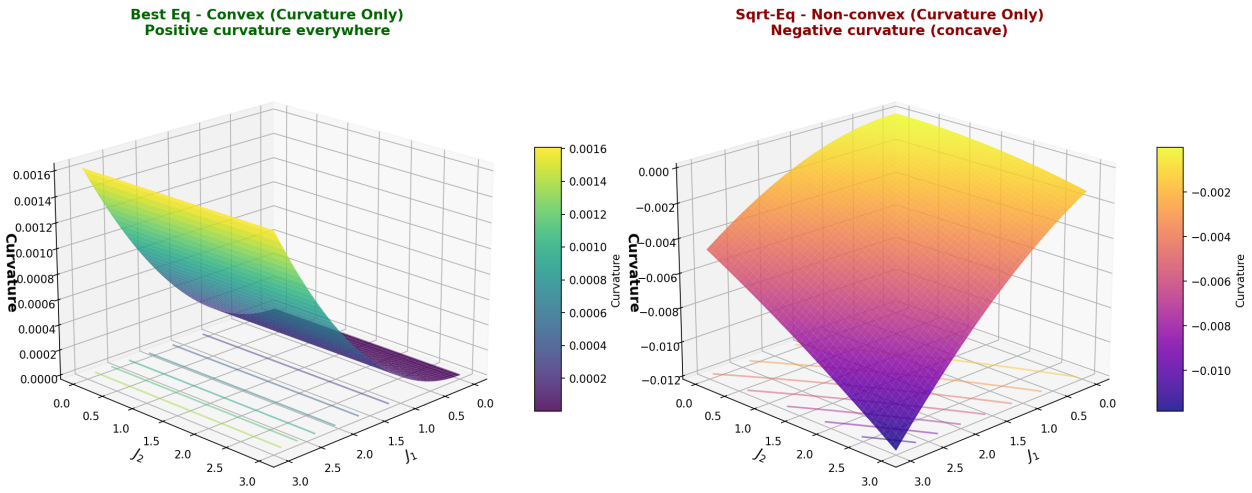


图 4：**通过能量景观曲率可视化热力学一致性。（左）**所提出的凸模型（**Eq16**）在整个不变量空间内呈现正定 Hessian 矩阵（平滑的碗状曲面），从而保证无条件稳定性。**（右）**无约束符号回归解（**Sqrt-Eq**）显示出负曲率区域（凹面），这表明即使拟合精度很高，模型仍存在物理不稳定性。这一对比凸显了物理信息约束在过滤数学伪影方面的关键作用。

切线刚度与有限伸展性 为进一步评估极端变形下的物理有效性，我们分析了单轴切线刚度模量（$d^2W/d\lambda^2$），它可作为德鲁克稳定性的一维指标。如图 5 所示，所提出模型的刚度在整个变形范围内始终严格为正（最小值 ≈ 0.30 MPa），有效避免了非物理软化或数值振荡。更重要的是，在大变形区间（$\lambda > 7$）观察到了物理保真度的显著差异。Ogden 模型呈现多项式增长模式（$\sim \lambda^{\alpha}$），这表明材料可以无限制地无限伸展。相比之下，SR模型正确预测了位于 $\lambda \approx 8.77$ 的垂直渐近线。这种行为源于发现的有理项（$\frac{I_1}{77.9-1.05\tilde{I}_1}$），在现象学层面再现了有限可伸长极限（分子链断裂）。这一特征起到

作为一种物理“安全屏障”，在多项式模型无法提供足够抗力的极端载荷下，防止单元发生反转。

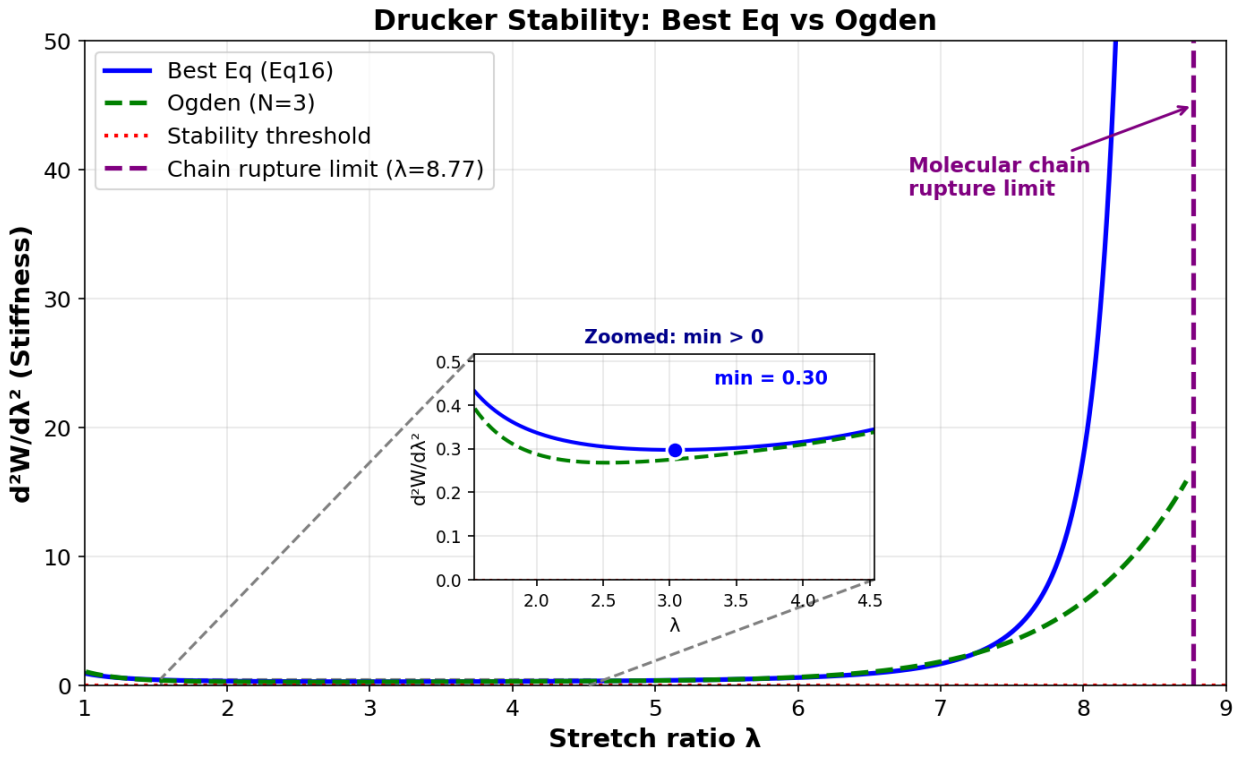


图 5：**德鲁克稳定性和有限可伸长极限分析**。该图展示了单轴拉伸下切线刚度（$d^2W/d\lambda^2$）的演变。**插图：**所提出的模型始终保持严格正值（最小刚度为 ≈ 0.30MPa），满足稳定性前提。**主图：**在大变形下，Ogden 模型（绿色虚线）预测刚度将呈无界多项式增长。相比之下，所提出的符号回归模型（蓝色实线）成功识别出分子链断裂极限，并在 $\lambda \approx 8.77$ 处呈现渐近刚度激增。这种物理上的“锁定”行为可避免模拟中出现非物理的无限拉伸。

总之，通过符号回归发现的模型在本构建模中实现了难得的平衡：它具备数值收敛所需的无条件数学稳定性——与Neo-Hookean模型类似——同时还能捕捉真实聚合物复杂的刚化物理特性，而这一能力往往是标准多项式展开所欠缺的。

3.4 有限元实现与工程稳健性

本构模型的最终验证，在于其在复杂、非均匀边界条件下的数值稳健性。我们将发现的本构定律（Eq16）作为 UMAT 在 Abaqus/Standard 中实现，并将其用于双边缺口拉伸试样的大变形模拟。这一设置构成了严苛的测试环境，其中拉伸、剪切和横向压缩并存。

所提模型的模拟成功 图 6(a) 展示了符号回归模型在最大位移下的变形状态。该模型成功处理了缺口尖端处的大应力集中，且未出现收敛困难。等效应变场平滑，网格即使在严重畸变下仍保持良好质量。这一成功归功于 Eq16 中合理的锁定项，它提供了符合物理规律的“硬化壁”，确保在所有变形状态下刚度矩阵均为正定。

对……的法证分析　Ogden 失效 相比之下，使用 Ogden 模型（N=3）进行的模拟未能收敛 .
我们没有简单地将其视为 “数值误差”，而是在图 6(b) 中分析了其数学根源。

- **隐藏的陷阱：** 当试样受到拉伸（X方向）时，不可压缩约束（$\det\mathbf{F} = 1$）迫使材料在厚度方向（Z方向）显著收缩。在夹持边界处，主伸长降至 $\lambda_3 \approx 0.157$ （高度压缩）。

• **数学奇点：** 仅针对拉伸数据（$\lambda > 1$）进行拟合而优化得到的 Ogden 参数中包含一个较大的负指数（$\alpha_3 \approx -3.18$）。如图 6（下）的热力图所示，该项会导致与 $\lambda_3^{\alpha_3 - 2}$ 成正比的刚度分量呈指数级爆增（达到 > 350），当 $\lambda_3 \to 0$时尤为如此。

• **后果：** 这种局部刚度突增会导致雅可比矩阵病态，使牛顿-拉夫森求解器无法求解。这一发现凸显了一个关键见解：通过无约束拟合发现的模型容易包含“盲点”（例如压缩失稳），而这些问题只有在多轴边值问题中才会触发。

4 讨论

4.1 超越各向同性：推广逻辑约束

为了强调智能体-技能框架的方法具有普适性，不局限于最初针对各向同性超弹性的演示，我们以纤维增强软组织（例如动脉壁）为例，进行概念性案例研究。这个场景尤其具有说明性，因为它揭示了传统符号回归的一个根本局限：若无明确的人工干预，便无法自主发现逻辑分支约束。

挑战：逻辑不连续性 传统符号回归引擎纯粹由均方误差驱动，会将本构定律视为平滑、连续的函数。然而，纤维增强组织表现出一种被称为拉伸-压缩不对称性的“开关式”行为：纤维在拉伸时会变硬，但在压缩时会屈曲（不贡献任何刚度）。标准的符号回归搜索通常会收敛到形如 $k(I_4 - 1)^2$, 的平滑多项式，这虽然能有效降低拉伸状态下的误差，却在物理上意味着纤维能够抵抗压缩——这严重违背了材料物理学。

智能体-技能解决方案 方案 为解决这一问题，我们的框架利用约束集 $\mathcal{S} = \{\mathcal{T}, \mathcal{O}, \mathcal{C}\}$ 来引导发现过程。

• $\mathcal{T}$**：加性分解** $\mathcal{T}$定义了强制性的函数架构。智能体采用加性拆分，将各向同性基体与各向异性纤维分开：

$$W(I_1, I_4) = W_{iso}(I_1) + W_f(I_4) \tag{7}$$

此处， $W_{iso}(I_1)$保留了第 3 节中验证过的各向同性公式（例如新胡克、Yeoh），而 $W_f(I_4)$则引入方向依赖型增强，其中 $I_4 = \lambda^2_{fiber}$ 表示纤维伸长平方。

• $\mathcal{O}$**：语义筛选** 算子库经过精心筛选，以满足 $\mathcal{C}$。由于组织刚化具有单调性，周期函数（例如 sin，cos）不予采用。尤为重要的是，算子库还加入了条件算子（例如 Macaulay括号 $\langle x \rangle = \max(0,\ x)$），以在结构上实现屈曲约束所要求的“切换”行为。

• $\mathcal{C}$**：非对称性与凸性** $\mathcal{C}$ 施加严格不等式，以确保热力学一致性。纤维项必须仅在拉伸时激活（$I_4 > 1$），并表现出严格凸性，以确保稳定性：

$$W_f = 0 \quad \forall I_4 \leq 1; \qquad \frac{\partial^2 W_f}{\partial I_4^2} > 0 \quad \forall I_4 > 1 \tag{8}$$

在该协议的指导下，智能体将符号搜索空间引导至结构上有效的候选方案。理想情况下，这一过程能够筛选出类似 Holzapfel-Gasser-Ogden（HGO）原型的模型：

$$W = C_{10}(I_1 - 3) + \frac{k_1}{2k_2}\left(\exp\left[k_2\langle I_4 - 1\rangle^2\right] - 1\right) \tag{9}$$

在此，框架使智能体能够识别出指数项满足$\mathcal{C}$所要求的严格凸性，而 Macaulay括号 $\langle \cdot \rangle$ 则实现了 $\mathcal{O}$所要求的逻辑切换。这一机制不仅能够复现标准形式，还能发现新颖且具有物理可解释性的扩展项，并严格遵循热力学约束。

实验范围值得注意的是，要验证此类各向异性模型，需要进行平面双轴测试，以区分基体与纤维特性；这类实验复杂度超出了本研究的范围。不过，这一概念性演示突显了该框架作为语义编译器的独特作用：它能够将高层次的物理逻辑转化为结构约束，而纯数值方法无法理解这些约束。

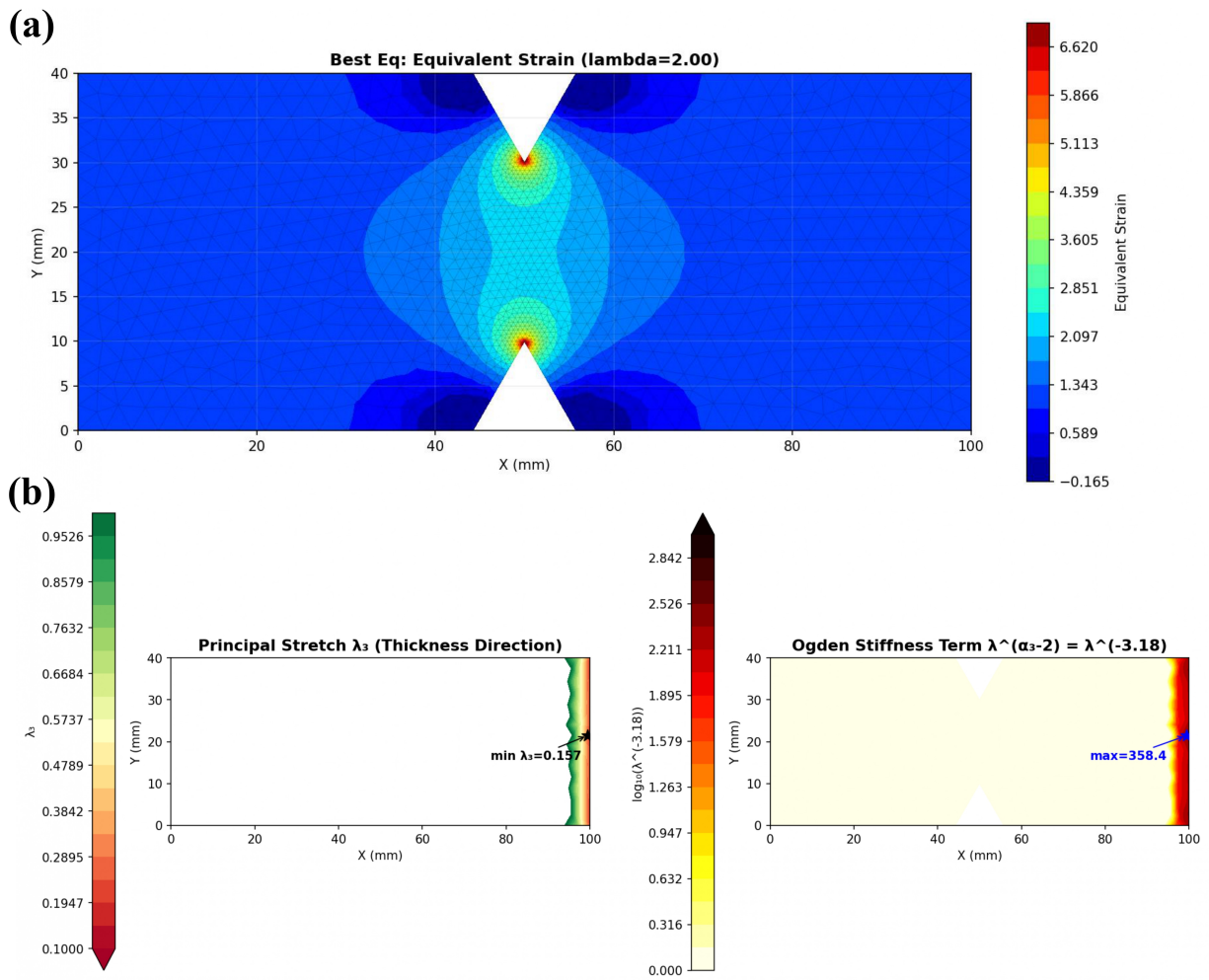


图 6：**双边缺口试样的有限元验证与失效机理分析。（上）所提出的 SR 模型的鲁棒性：**模拟成功达到目标大变形（λ_{global} =3.0）。等效应变云图保持平滑连续，表明凸性信息引导的有理形式可提供数值稳定性，并从根本上避免刚度奇异性。**（下）Ogden 模型发散机理：**对基准模拟（Ogden N=3）失败处的边界单元进行取证分析。由于材料不可压缩性，固支边界会导致严重的横向压缩（$\lambda_3 \approx 0.157$）。Ogden 模型为尽量减小拉伸误差而采用负指数（$\alpha_3 \approx -3.18$），在这一压缩状态下出现数值奇异性。刚度项 λ^{α_3-2} 急剧增大至 ≈ 358，导致切线刚度矩阵变得病态。这证实，缺乏全局凸性约束的数据驱动模型在多轴变形模式下容易失效。

4.2 局限性与未来方向

尽管 EO-SR 框架在自动发现本构定律方面实现了显著突破，但未来迭代仍需应对若干挑战。

实验范围与数据异质性关于第 4.1 节讨论的向各向异性组织泛化问题，实际挑战在于数据丰富度，而非传感器分辨率。与需要全场测量（例如数字图像相关）的高门槛方法不同，我们的框架旨在利用标准且易于获取的测试数据。不过，对于纤维增强材料，标准单轴试验不足以区分基体（W_{iso}）和纤维（W_f）的贡献。未来工作无需升级到昂贵的光学设备，而是可以利用平面双轴测试仪（常用于表征软组织），生成具有多种比例的应力-伸长曲线（例如，1 : 1，1 : 0。5，0。5 : 1 加载方案）。这样既能确保智能体获得足够的现象学数据以区分方向相关不变量，又无需背离 EO-SR 框架的“低门槛”理念。

计算开销与智能体延迟 尽管符号回归引擎效率很高，但“技能注入”和“智能体辅助选择”阶段涉及大语言模型推理，因此会产生延迟。虽然我们的架构经过策略性设计，将智能体置于进化循环之外（作为约束的预处理器和选择的后处理器），以尽量降低成本，但处理复杂约束逻辑所消耗的令牌可能相当可观。随着基础模型逐步发展为经过领域蒸馏的检查点，我们预计将部署本地化的“力学智能体”，从而显著降低延迟，并解决专有材料数据带来的隐私问题。

5 结论

本研究提出了面向工程的符号回归（EO-SR），这是一种通用框架，旨在通过自动发现物理有效的闭合关系，消除计算物理中的认知不确定性。通过将大语言模型（LLMs）集成为“物理信息智能体”，我们证明了支配材料行为的抽象原理可以转化为可执行约束，从而有效地将符号回归从数学曲线拟合工具转变为受物理规律支配的发现引擎。

通过对超弹性本构建模进行严格的“极限测试”，验证了该框架的有效性，并为该领域带来了三项更广泛的启示：

1. **与物理定律自动对齐：** 成功以零样本方式生成德鲁克稳定性约束，证实大语言模型能够弥合高层次物理理论与底层优化逻辑之间的语义鸿沟。这一能力不受领域限制，为自动注入约束铺平了道路，应用领域涵盖流体力学（例如，确保能量级联）和热力学（例如，熵产生）。 2. **发现“可用于仿真的”数学：** 我们的研究结果表明，数值稳健性并非仅仅是实现细节，而是发现过程的一项基本准则。该框架舍弃“准确度高但非凸”的模型（如 Sqrt-Eq），转而采用无条件稳定的有理方程（Eq16），这凸显了将与求解器相关的约束直接嵌入发现过程的必要性。 3. **“技能”架构的通用性：** 虽然本研究聚焦于超弹性，但“技能注入器”的模块化设计使其能够无缝扩展到其他复杂系统。未来工作将探索实例化“塑性技能”（屈服面）和“各向异性技能”（纤维增强），以进一步验证 EO-SR 作为本构发现通用工具的价值。

归根结底，这项工作为“科学人工智能”提出了一种新范式：基础模型不再仅仅充当编程助手，更是理论一致性的守护者。通过强制遵循框架无关性和热力学稳定性等基本公理，这一框架将 AI 发现的模型从单纯的经验回归提升为数学上严谨的本构闭合关系，弥合了数据驱动描述与预测性物理真实性之间的鸿沟。

参考文献

[1] C Truesdell。《力学非线性场论》。物理学百科全书，3:5–8，1965。[2] Morton E Gurtin。《连续介质力学导论》，第158卷。Academic Press，1982。[3] Gerhard A Holzapfel。《非线性固体力学：工程科学的连续体方法》，2002。

[4] Dipjyoti Nath、Debanga Raj Neog、Sachin Singh Gautam 等。《机器学习和深度学习在有限元分析中的应用：全面综述》。《工程计算方法档案》，31(5)，2024。[5] Hanchen Wang、Tianfan Fu、Yuanqi Du、Wenhao Gao、Kexin Huang、Ziming Liu、Payal Chandak、Shengchao Liu、Peter Van Katwyk、Andreea Deac 等。《人工智能时代的科学发现》。《自然》，620(7972):47–60，2023。[6] George Em Karniadakis、Ioannis G Kevrekidis、Lu Lu、Paris Perdikaris、Sifan Wang 和 Liu Yang。《物理信息机器学习》。《自然评论：物理》，3(6):422–440，2021。[7] Kevin Linka 和 Ellen Kuhl。《面向自动化模型发现的新型本构人工神经网络》。《计算机方法与应用力学及工程》，403:115731，2023。[8] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George E Karniadakis。《物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架》。《计算物理学杂志》，378:686–707，2019。[9] Michael Schmidt 和 Hod Lipson。《从实验数据中提炼自由形式的自然规律》。《科学》，324(5923):81–85，2009。[10] D. C. Drucker。《稳定非弹性材料的定义》。《应用力学杂志》，第101–106页，1959。[11] Nikolaos N Vlassis 和 WaiChing Sun。《采用Sobolev训练的热力学信息神经网络：用于具有水平集硬化的可解释弹塑性模型》。《计算机方法与应用力学及工程》，377:113695，2021。[12] Jerrold E Marsden 和 Thomas JR Hughes。《弹性力学的数学基础》。Courier Corporation，1994。[13] Moritz Flaschel、Siddhant Kumar 和 Laura De Lorenzis。《无监督发现可解释的超弹性本构定律》。《计算机方法与应用力学及工程》，381:113852，2021。[14] Fabrice Pierron 和 Michel Grédiac。《虚拟场法：从全场变形测量中提取本构力学参数》。Springer Science & Business Media，2012。[15] Stéphane Avril、Marc Bonnet、Anne-Sophie Bretelle、Michel Grédiac、François Hild、Patrick Ienny、Félix Latourte、Didier Lemosse、Stéphane Pagano、Emmanuel Pagnacco 等。《基于全场测量的力学参数辨识方法综述》。《实验力学》，48(4):381–402，2008。[16] Trenton Kirchdoerfer 和 Michael Ortiz。《数据驱动计算力学》。《计算机方法与应用力学及工程》，304:81–101，2016。[17] Raymond William 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):565–584，1972。[18] Oon H Yeoh。《橡胶应变能函数的若干形式》。《橡胶化学与技术》，66(5):754–771，1993。[19] Melvin Mooney。《大弹性变形理论》。《应用物理学杂志》，11(9):582–592，1940。[20] Ronald S Rivlin。《各向同性材料的大弹性变形 IV：一般理论的进一步发展》。《伦敦皇家学会哲学汇刊 A辑：数学与物理科学》，241(835):379–397，1948。[21] GA0980 Holzapfel 和《非线性固体力学：工程领域的连续体方法》，2000。[22] Miles Cranmer、Alvaro Sanchez Gonzalez、Peter Battaglia、Rui Xu、Kyle Cranmer、David Spergel 和 Shirley Ho。《利用归纳偏置从深度学习中发现符号模型》。《神经信息处理系统进展》，33:17429–17442，2020。[23] Josh Achiam、Steven Adler、Sandhini Agarwal、Lama Ahmad、Ilge Akkaya、Florencia Leoni Aleman、Diogo Almeida、Janko Altenschmidt、Sam Altman、Shyamal Anadkat 等。《GPT-4技术报告》。《arXiv》预印本，arXiv:2303.08774，2023。[24] Sébastien Bubeck、Varun Chandrasekaran、Ronen Eldan、Johannes Gehrke、Eric Horvitz、Ece Kamar、Peter Lee、Yin Tat Lee、Yuanzhi Li、Scott Lundberg 等。《通用人工智能的曙光：GPT-4的早期实验》。《arXiv》预印本，arXiv:2303.12712，2023。[25] Thomas Wolf、Lysandre Debut、Victor Sanh、Julien Chaumond、Clement Delangue、Anthony Moi、Pierric Cistac、Tim Rault、Remi Louf、Morgan Funtowicz 等。《Transformer模型：自然语言处理的最新进展》。载于《2020年自然语言处理实证方法会议论文集：系统演示》，第38–45页，2020。

[26] Jason Wei、Xuezhi Wang、Dale Schuurmans、Maarten Bosma、Fei Xia、Ed Chi、Quoc V Le、Denny Zhou 等。思维链提示能够诱发大语言模型的推理能力。神经信息处理系统进展，35:24824–24837，2022年。[27] Daniil A Boiko、Robert MacKnight、Ben Kline 和 Gabe Gomes。利用大语言模型开展自主化学研究。《自然》，624(7992):570–578，2023年。[28] Mark Chen。评估基于代码训练的大语言模型。*arXiv*预印本 *arXiv:2107.03374*，2021年。[29] Bernardino Romera-Paredes、Mohammadamin Barekatain、Alexander Novikov、Matej Balog、M Pawan Kumar、Emilien Dupont、Francisco JR Ruiz、Jordan S Ellenberg、Pengming Wang、Omar Fawzi 等。通过程序搜索和大语言模型取得数学发现。《自然》，625(7995):468–475，2024年。[30] Nigar M Shafiq Surameery 和 Mohammed Y Shakor。使用 ChatGPT 修复编程错误。《国际信息技术与计算机工程杂志》*(IJITC) ISSN*，24555290(3.01):17–22，2023年。[31] Zhiheng Xi、Wenxiang Chen、Xin Guo、Wei He、Yiwen Ding、Boyang Hong、Ming Zhang、Junzhe Wang、Senjie Jin、Enyu Zhou 等。基于大语言模型的智能体的兴起与潜力：一项综述。《中国科学：信息科学》，68(2):121101，2025年。[32] Andres M. Bran、Sam Cox、Oliver Schilter、Carlo Baldassari、Andrew D White 和 Philippe Schwaller。利用化学工具增强大语言模型。《自然·机器智能》，6(5):525–535，2024年。[33] Guanzhi Wang、Yuqi Xie、Yunfan Jiang、Ajay Mandlekar、Chaowei Xiao、Yuke Zhu、Linxi Fan 和 Anima Anand-kumar。Voyager：一种由大语言模型驱动的开放式具身智能体。*arXiv*预印本 *arXiv:2305.16291*，2023年。[34] Joon Sung Park、Joseph O'Brien、Carrie Jun Cai、Meredith Ringel Morris、Percy Liang 和 Michael S. Bernstein。生成式智能体：人类行为的交互式模拟体。载于第*36*届*ACM*用户界面软件与技术年度研讨会论文集，UIST '23，美国纽约州纽约市，2023年。美国计算机协会。[35] Leslie RG Treloar。不同类型变形下硫化橡胶的应力-应变数据。《橡胶化学与技术》，17(4):813–825，1944年。[36] Alan N Gent。一种新的橡胶本构关系。《橡胶化学与技术》，69(1):59–61，1996年。[37] Gheorghe Comanici、Eric Bieber、Mike Schaekermann、Ice Pasupat、Noveen Sachdeva、Inderjit Dhillon、Marcel Blistein、Ori Ram、Dan Zhang、Evan Rosen 等。Gemini 2.5：以高级推理、多模态、长上下文和新一代智能体能力拓展前沿。*arXiv*预印本 *arXiv:2507.06261*，2025年。