用于超弹性的稀疏本构神经网络

Hendrik Geisler[1],Cl´ement Jailin[2], Emmanuel Baranger[2]1：汉诺威莱布尼茨大学，连续介质力学研究所，汉诺威，德国 2：巴黎萨克雷大学、中央理工-高等电力学院、巴黎萨克雷高等师范学院、法国国家科学研究中心，LMPS——巴黎萨克雷力学实验室，伊韦特河畔吉夫，法国
✉ geisler@ikm.uni-hannover.de

arXiv:2611.30378v1 [cs.CE] 23 Nov 2026

摘要

本构模型识别旨在恢复简洁且可解释的模型，以准确描述材料行为。在本研究中，我们采用带有促稀疏约束和正则化的人工神经网络，识别超弹性本构模型。所提出的方法通过将应变能密度表示为不变量的单变量函数乘积之和，将神经网络的表达能力与稀疏本构模型（如通过 EUCLID 识别出的模型）的结构可解释性相结合。由此得到的分解揭示了各个不变量及其相互作用的贡献。我们在监督学习和无监督学习场景下使用合成数据验证了该方法，结果表明，它能够以较少的活跃模态准确识别出可解释的本构模型。

1 引言

数据驱动发现使得人们能够直接从测量数据中学习超弹性本构模型，只需有限的人工干预，且无需事先指定函数形式。尤其当材料响应复杂，或可用数据存在噪声或不完整时，手工构建本构模型可能颇具挑战。在这种情况下，数据驱动方法能够为传统方法提供一种更灵活、更高效的替代方案。

文献中已提出多种数据驱动本构建模方法。 [24]中概述了完全数据驱动的方法。这些方法大致可分为两类：稀疏识别和神经网络。稀疏识别方法旨在通过结合候选函数库与稀疏回归技术来发现控制方程。非线性动力系统稀疏识别（SINDy）框架是一个典型例子，它表明通常可以从数据中恢复控制方程 [7]。在本构建模领域，EUCLID [9] 扩展了 SINDy 方法。符号回归也已用于发现具有可解释性的本构

模型 [15, 1, 5]。

虽然这些方法能够生成简洁且易于解释的方程，但其成功很大程度上取决于函数库的选择以及离散的模型选择过程。如果相关的函数形式不在函数库中，就无法将其恢复出来；此外，含噪数据的微小变化也可能导致所识别模型发生不连续变化，即在不同数学表达式之间跳变。

另一种方法是使用神经网络。物理增强神经网络无需枚举候选函数库即可近似高度非线性的响应，而基于能量的架构能够纳入客观性和热力学一致性等物理约束 [11, 19, 17]。文献 [27, 14, 6]研究了这些网络从实验数据中学习的学习过程。

已有多种架构被提出，用于将这些物理约束直接融入神经网络。输入凸神经网络（ICNNs）通过对网络权重施加架构约束，确保网络对选定输入具有凸性 [4]。在超弹性领域，这一思路已用于构建能量势，使其从设计上满足客观性、材料对称性、多凸性和热力学一致性 [17]。本构人工神经网络（CANNs） [20, 18, 3] 则提供了一种相关的基于能量的框架，其中应变能由依赖不变量的函数以结构化方式组合表示。然而，较高的可解释性是以牺牲表达能力为代价的，因为函数形式受限于依赖不变量的函数的特定组合。已有比较研究考察了这些架构各自的优势与局限 [25]。

这些模型的灵活性有助于在训练数据点之间进行插值；当本构定律在有限元模拟中求值时，这正是一项关键要求。然而，即使是受到物理约束的神经网络，也可能包含许多相互耦合的贡献，其参数无法直接揭示哪些不变量相互作用，或哪些机制主导应变能。因此，我们需要一种兼具神经网络表达能力与显式稀疏分解的表示方法。

人们提出了多种方法来提高神经网络的可解释性。Kolmogorov-Arnold 网络（KANs）能够学习更易于可视化的单变量函数 [26]。然而，多层组合可能会掩盖底层关系。训练过程中可以对网络结构进行稀疏化 [10]。不过，网络参数的稀疏性并不一定会产生应变能的透明分解。可解释机器学习领域已有大量研究，例如参见 [23]。这些技术尚未在本构建模中得到广泛应用。

这些方法凸显了表达能力与可解释性之间的矛盾。可解释性是一个宽泛的概念，存在不同定义。本文采用 Lipton [21] 讨论的透明性概念。这一概念包括可模拟性，即理解整个模型的能力；以及可分解性，即理解模型各个组成部分的能力。因此，每一项都与少量不变量坐标相关联的稀疏分解，相较于误差相近的黑箱预测器，能够提供更有用的科学信息。尽管这类分解通常并非唯一，但它们可以为学习到的响应提供可解释的表征，支持与既有材料模型进行比较，并识别在所选表征中足以描述响应的不变量相互作用。

在本研究中，我们将神经网络的逼近能力与稀疏本构模型的结构可解释性相结合。我们将应变能表示为不变量的单变量函数乘积之和，其形式类似于 POD 和 PGD 中的分解 [8, 16]。这些函数由一维输入凸子网络学习，而非负约束、正则化和模态剪枝则促进稀疏分解。

由此得到的模型具备三项预期属性。首先，它保留了神经网络的表达能力，且不需要完整的候选函数库。其次，其活跃模态和一维分量可以可视化，并与熟悉的本构项联系起来。第三，其基于能量的构造保留了具有物理意义的应变能表示，并支持在整个变形域内进行插值。我们通过以下实验评估这些

属性：在已知合成能量的有监督识别实验中进行评估，并在基于合成全场变形和反作用力数据的无监督设置中进行评估。
本文其余部分安排如下。第 2 节介绍稀疏分解和网络架构，随后说明训练和稀疏性促进程序；第 3 节介绍监督学习和无监督基准问题。最后，第 4 节讨论该方法。

2 方法

基于物理依据和实验观测，人们提出了许多超弹性本构模型，例如 [12]。本文仅研究各向同性超弹性本构定律。典型例子包括莫尼-里夫林模型、多项式模型和 Ciarlet–Geymonat 模型，其应变能函数汇总于表 1。尽管这些模型在函数形式和适用范围上存在显著差异，开发并选择合适的模型传统上仍需要本构专业知识。此外，适用于某种材料或载荷工况的模型，可能不适用于另一种材料或载荷工况。

表 1：文献中的一些超弹性材料模型。

模型	应变能函数
莫尼-里夫林	$\Psi = C_{10}(I_1 J^{-2/3} - 3) + C_{01}(I_2 J^{-4/3} - 3) + D(J-1)^2$
多项式	$\Psi = \sum_{i\ ,j=0}^{n} C_{ij}(I_1 - 3)^i (I_2 - 3)^j$
Ciarlet-Geymonat	$\Psi = a(I_1 - 3) + b(I_2 - 3) + c(I_3^2 - 1) - d\ln(I_3)$

我们提出了一种方法，只需有限的人为干预，即可从数据中学习应变能的稀疏分解。该方法基于作者的观察：许多超弹性本构模型都可以表示为不变量的单变量函数乘积之和：

$$\Psi(\mathcal{I}_{\mathrm{C}}) = \sum_{m=1}^{N} a_m(I_1) b_m(I_2) c_m(J) \tag{1}$$

其中，不变量集合 为右柯西-格林张量 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^T \cdot \boldsymbol{F}$的不变量 $\mathcal{I}_{\mathrm{C}} = (I_1、\ I_2、\ J)$，其定义为

$$I_1 = \operatorname{tr}[\boldsymbol{C}], \quad I_2 = \frac{1}{2}\left(\operatorname{tr}[\boldsymbol{C}]^2 - \operatorname{tr}[\boldsymbol{C}^2]\right), \quad J = \det(\boldsymbol{F}) = \sqrt{I_3}. \tag{2}$$

一般而言，许多函数 a_m、 b_m 和 c_m 恒等于一，因此只有少数项涉及不变量耦合。我们在分解中使用 J ，而不是第三个不变量 I_3 。同样的分解策略也可以使用 I_3 进行表述。

基于方程 (1) 中的分解，我们在第 2.1 节提出一种合适的神经网络架构。本节还将讨论如何确保零能量与无应力参考构形。此外，我们将阐明所提出的架构如何保证学习得到的应变能关于不变量具有凸性。

第 2.2 节将介绍训练过程及合适的损失函数。
只有在识别出的活跃函数（即非恒定函数）数量较少时，方程（1）中的分解才最有用。传统方法可能通过将响应分散到许多相互耦合的子网络中，准确地表示同一能量。这种表示通常并非唯一，也难以揭示哪些不变量依赖关系是

必不可少的。因此，仅凭准确性并不能保证本构模型具有可解释性。我们通过明确促进稀疏性来解决这一问题，即鼓励活跃函数的数量尽可能少。促进稀疏性的技术将在第 2.3 节中讨论。

2.1 神经网络架构

公式 (1) 中应变能的分解是构建神经网络架构的出发点。直接优化函数 a_m、b_m 和 c_m 颇具挑战，因为它们以乘法形式参与能量计算。如果某个因子变得很小，其余因子的梯度可能会消失；如果某个因子变得很大，产生的梯度则可能不稳定。此外，因式分解存在尺度不确定性：将一个因子乘以某个常数，同时将另一个因子除以同一常数，二者的乘积保持不变。这些问题使优化以及对学习所得因子的解释都变得复杂。

因此，我们采用对数域参数化。子网络表示相加的对数因子，并通过指数函数还原相应的乘法贡献。随后，应变能密度表示为

$$\Psi(\mathcal{I}_{\mathrm{C}}) = \sum_{m=1}^{N} \exp\left(\log(a_m(I_1)) + \log(b_m(I_2)) + \log(c_m(J))\right). \tag{3}$$

我们进一步在网络中加入一个全局缩放参数 $S > 1$

$$\Psi(\mathcal{I}_{\mathrm{C}}) = \sum_{m=1}^{N} S \exp\left(\frac{\Phi_m(\mathcal{I}_{\mathrm{C}})}{S}\right) \tag{4}$$

它会同时缩放所有模式的贡献。模态m 的所有子网络之和表示为

$$\Phi_m(\mathcal{I}_{\mathrm{C}}) = f_{m,1}(I_1) + f_{m,2}(I_2) + f_{m,3}(J) \tag{5}$$

其中 $f_{m,\,k}$ 是对应于模态 m 的第 k 个输入坐标的子网络输出。例如，$f_{m,\,2}(I_2)$ 可能会学习 $\log(b_m(I_2))$ 的一个带缩放近似。缩放参数的计算方式为

$$S = \mathrm{softplus}(s) + 1.0, \quad s \in \mathbb{R} \tag{6}$$

其中，s 是在训练过程中学习的无约束参数。Softplus 函数 $\mathrm{softplus}(z) = \ln(1 + \exp(z))$ 与因子 $+1.0$ 共同确保 $S > 1$。缩放参数 S 限制指数项的幅值，从而减小相应梯度的变化范围。若不进行缩放，指数函数导数在网络输入范围内可能相差数个数量级，进而导致训练不稳定。

完整的网络架构如图 1 所示。该网络由前文所述的 m 个独立模式组成。最后一个模式专用于应变能函数的体积部分。我们采用主干架构，在最后一个模式中单独学习体积部分。 [13]中也采用了类似的网络拆分方式。整体网络架构与张量神经网络和神经加性模型[29, 2]有相似之处。

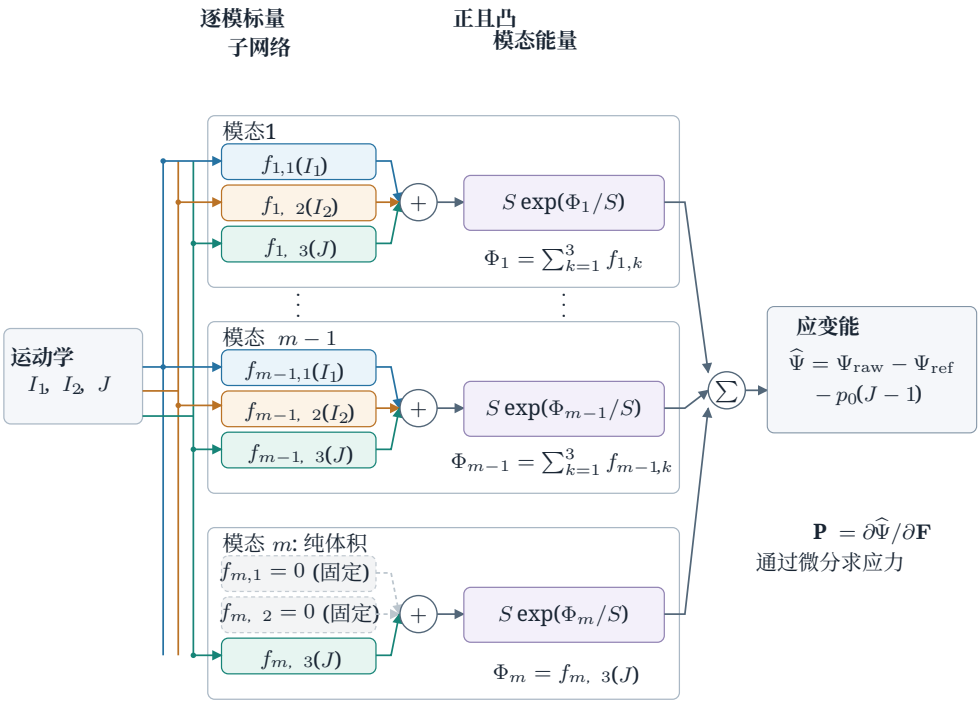

图1：所提出的网络架构。每个子网络 $f_{m,\ k}$ 都是一个一维输入凸神经网络（输入凸神经网络），以单个不变量 I_k 作为输入。将各子网络的输出相加得到 Φ_m，随后对其取指数并乘以 S，从而得到模态 m 对应的应变能贡献。总应变能通过对所有模态求和得到。通过对子网络输出施加 L1 正则化、模态间耦合惩罚以及显式模态剪枝来促进稀疏性。

2.1.1 零能量与无应力参考构形

通过从任意其他构形下的能量中减去参考状态下的能量，确保参考状态 $\mathcal{I}_0 := (I_1 = 3,\ I_2 = 3,\ J = 1)$ 的能量为零。参考状态下的能量为

$$\Psi_{\text{ref}}(\mathcal{I}_0) = \sum_{m=1}^{N} S \exp\left(\frac{\Phi_m(\mathcal{I}_0)}{S}\right). \tag{7}$$

通过从任意其他构形下的应力中减去参考构形下应力的静水部分，确保参考构形为无应力状态。第二类 Piola–Kirchhoff 应力张量可用不变量导数表示为

$$\mathbf{S}_{\text{PK}} = 2\frac{\partial \Psi}{\partial I_1}\mathbf{I} + 2\frac{\partial \Psi}{\partial I_2}(I_1\mathbf{I} - \mathbf{C}) + \frac{\partial \Psi}{\partial J} J\mathbf{C}^{-1}. \tag{8}$$

在参考构形处对方程（8）求值可得

$$\mathbf{S}_{\text{PK,ref}} = \left(2\left.\frac{\partial \Psi}{\partial I_1}\right|_{\mathcal{I}_0} + 4\left.\frac{\partial \Psi}{\partial I_2}\right|_{\mathcal{I}_0} + \left.\frac{\partial \Psi}{\partial J}\right|_{\mathcal{I}_0}\right)\mathbf{I}. \tag{9}$$

该参考应力为纯静水应力。参考构形处的静水压力 p_0 定义为

$$p_0 \equiv 2\left.\frac{\partial \Psi}{\partial I_1}\right|_{\mathcal{I}_0} + 4\left.\frac{\partial \Psi}{\partial I_2}\right|_{\mathcal{I}_0} + \left.\frac{\partial \Psi}{\partial J}\right|_{\mathcal{I}_0}. \tag{10}$$

因此，通过减去静水压力 p_0 与体积变化（$J-1$）的乘积，对应变能函数进行修正，从而确保参考构形处的应力为零。模型预测的修正后的能量为

$$\hat{\Psi}(\mathcal{I}_{\text{C}}) = \Psi_{\text{raw}}(\mathcal{I}_{\text{C}}) - \Psi_{\text{ref}} - p_0(J-1). \tag{11}$$

2.1.2 子网络的架构

方程（5）中的每个一维子网络记为 $f_{m,\,k}(x_k)$，其中 $x_1 = I_1$、$x_2 = I_2$ 和 $x_3 = J$。对于 $k \in \{1,2,3\}$，每个子网络均参数化为一个双层输入凸神经网络，后接一个无偏置的线性缩放神经元。单个子网络的方程如下：

$$f_{m,k}(x_k) = W_{3,k}^{(m)} \cdot \left[\boldsymbol{W}_{2,k}^{(m)} \cdot \text{softplus}\left(\boldsymbol{W}_{1,k}^{(m)} x_k + \boldsymbol{b}_{1,k}^{(m)}\right) + b_{2,k}^{(m)}\right], \tag{12}$$

其中

- $\boldsymbol{W}_{(m)\,1,\,k} \in \mathrm{R}^{n_n \times 1}$, $\boldsymbol{b}_{(m)\,1,\,k} \in \mathrm{R}^{10}$：无约束仿射输入层；
- $\boldsymbol{W}_{(m)\,2,\,k} \in \mathrm{R}_{+}^{1\times n_n}$, $b_{(m)\,2,\,k} \in \mathrm{R}$：非负隐藏层权重（$\boldsymbol{W}_{(m)\,2,\,k} \geq 0$）；
- $W_{(m)\,3,\,k} \in \mathrm{R}_{+}$：非负的模态缩放幅值（$W_{(m)\,3,\,k} \geq 0$）。

其中， n_n 表示隐藏层中的神经元数量。为确保子网络的凸性，使用 softplus 激活函数 $\mathrm{softplus}(z) = \ln(1+e^z)$。训练过程中，每次梯度更新后都会执行投影步骤，以确保权重 $\boldsymbol{W}^{(m)}_{2,k}$ 和 $W^{(m)}_{3,k}$，非负。线性缩放神经元 $W^{(m)}_{3,k}$，和全局缩放参数 S 对神经网络的总响应有着非常相似的影响。然而，全局缩放参数 S 由所有模态共享，而线性缩放神经元 $W^{(m)}_{3,k}$，则专属于各个子网络。尽管如此， S 与所有模态的 $W^{(m)}_{3,k}$，存在无穷多种组合，都能产生相同的总响应。引入缩放因子 $W^{(m)}_{3,k}$，后，便可轻松控制稀疏性。为避免尺度不确定性，我们对行向量 $\boldsymbol{W}^{(m)}_{2,k}$，施加单位欧几里得范数约束，即：

$$\left\|\boldsymbol{W}^{(m)}_{2,k}\right\|_2 = \left(\sum_{j=1}^{n_n}\left(W^{(m)}_{2,k}\right)^2_j\right)^{1/2} = 1. \tag{13}$$

这是通过在每次梯度更新后重新缩放 $\boldsymbol{W}^{(m)}_{2,k}$，来实现的。

2.1.3 凸性

使用输入凸子网络并采用对数域训练，可确保学习到的应变能函数 $\Psi(I_1, I_2, J)$ 在不变量集合 $\mathcal{I}_{\mathrm{C}} \in \mathrm{R}^3_+$ 上为凸函数。
模态 m 的单个子网络 Φ_m 之和，是关于互不相交的坐标 I_1, I_2, J 的凸函数之和，因此在不变量集合 $\mathcal{I}_{\mathrm{C}}$ 上联合凸。每个模态 m, $g(u) = S(\exp(\Phi_m/S) - exp(\Phi_m(\mathcal{I}_0)/S))$ 的总贡献的一阶和二阶导数为：

$$g'(\Phi_m) = \exp(\Phi_m/S) > 0, \quad g''(\Phi_m) = \frac{1}{S}\exp(\Phi_m/S) > 0 \quad (\text{since } S > 1). \tag{14}$$

因此， g 是凸且非递减的。凸非递减函数与凸函数的复合仍为凸函数，因此 $\Psi_m(\mathcal{I}_{\mathrm{C}})$ 是 $\sum_{m=1}^{M}\Psi_m$ $\mathcal{I}_{\mathrm{C}}$ 的 Ψ $\mathcal{I}_{\mathrm{C}}$ 关于 $(\Phi_m(\mathcal{I}_{\mathrm{C}}))$ 是凸的。最后， $\Psi(\mathcal{I}_{\mathrm{C}})$ ( ) 是凸函数之和，确保了 ( ) 的全局凸性。

2.1.4 初始化

该网络使用 Glorot 均匀初始化对权重 $\boldsymbol{W}_{(m)1,k}$、 $\boldsymbol{W}^{(m)}_{2,k}$，以及 $\boldsymbol{W}^{(m)}_{3,k}$，进行初始化，并使用零初始化对偏置 $\boldsymbol{b}^{(m)}_{1,k}$，和 $b^{(m)}_{2,k}$，进行初始化。为确保权重为正，所有权重均取绝对值。为打破对称性，部分权重 $W^{(m)}_{3,k}$，按 0.05 的因子进行缩放。经过缩放的权重经过精心选择：前两个模态中各有两个权重被缩放，而后续模态中仅有一个权重被缩放，从而确保每种缩放参数组合至少出现一次。最后一个模态专门用于应变能函数的体积部分，即 $W_{(\text{最后})3,3} = W^{(\text{last})}_3$，$_2 = 0$。其初始化结果为一个对称 U 形函数。具体而言，权重 $\left(W^{(\text{last})}_{1,3}\right)_j$ 以成对反号斜率进行初始化。偏置取为 $\boldsymbol{b}^{(\text{last})}_{1,3} = \boldsymbol{W}^{(\text{last})}_{1\,3}$，。

2.2 训练

本文研究了监督训练和无监督训练。在监督设置下，网络直接使用由变形不变量及其对应的应变能值组成的带标签数据进行训练。因此，损失衡量的是预测能量与参考能量之间的逐点差异

。在无监督设置下，不提供局部应变能或应力标签。相反，网络通过测得的变形场和全局反作用力进行训练，同时强制满足平衡并与测得的反作用力保持一致。具体细节将在接下来的两个小节中说明。

2.2.1 监督训练

对于对数域中的监督训练，我们使用泊松负对数似然作为损失，其定义为

$$\mathcal{L}_{\text{Poisson}}(\boldsymbol{y}, \hat{\boldsymbol{y}}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[\hat{y}_i - y_i \ln(\hat{y}_i) \right], \tag{15}$$

其中 y_i 为应变能函数的真实值，$\hat{}y_i$ 为应变能函数的预测值，定义为

$$\hat{y}_i = \max(\hat{\Psi}(\mathcal{I}_{\text{C}}),\, \epsilon_{\text{safe}}), \tag{16}$$

数值参数 $\epsilon_{\text{safe}} = 10^{-4}$ 可确保预测值严格为正。需要指出的是，即使预测完全准确，泊松负对数似然也不为零；但当预测值与真实值一致时，该值达到最小。泊松负对数似然有若干优点。 $\mathcal{L}_{\text{Poisson}}$ 关于预测值的梯度为

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{Poisson}}}{\partial \hat{y}_i} = 1 - \frac{y_i}{\hat{y}_i} = \frac{\hat{y}_i - y_i}{\hat{y}_i}. \tag{17}$$

因此，该梯度随相对误差缩放。因此，大能量区域和小能量区域中的误差受到同等对待，这对于超弹性材料模型的训练非常重要，因为应变能的变化范围可能跨越多个数量级。

对于单个激活模态，关于内部权重的梯度为

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_m} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial \Phi_m} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \cdot \exp\left(\frac{\Phi_m}{S} \right). \tag{18}$$

在此表达式中，为了更简洁地呈现梯度的一般行为，我们忽略了参考状态能量和应力修正的贡献，但在实际应用中会将其考虑在内。网络以修正后的能量 Ψ 进行训练，其中包含这些修正。使用泊松损失时，关于内部权重的梯度为

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{Poisson}}}{\partial \Phi_m} = \left(\frac{\hat{y} - y}{\hat{y}} \right) \cdot \exp\left(\frac{\Phi_m}{S} \right) \approx \left(\frac{\hat{y} - y}{\hat{y}} \right) \cdot \frac{\hat{y}}{S} = \frac{1}{S} (\hat{y} - y) \tag{19}$$

对于单个激活模态，关于模态输出的梯度与预测误差呈线性关系。

相比之下，使用标准均方误差（MSE）损失时，得到

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{MSE}}}{\partial \Phi_m} = 2(\hat{y} - y) \cdot \exp\left(\frac{\Phi_m}{S} \right) \propto 2(\hat{y} - y) \cdot \hat{y} \sim \mathcal{O}(\hat{y}^2), \tag{20}$$

该项随预测值 $\hat{}y$ 呈二次增长。这可能导致反向传播期间梯度灾难性爆炸和数值溢出。

训练期间，所有模态均使用 Adam 优化器同时训练。通过在每次梯度更新后执行投影步骤，强制权重 $\boldsymbol{W}_{(m)\,2,k}$ 和 $W_{3\,k}^{(m)}$,保持为正，具体如下：

$$\boldsymbol{W}_{2,k}^{(m)} \leftarrow \max\left(0,\, \boldsymbol{W}_{2,k}^{(m)}\right), \tag{21}$$

$$W_{3,k}^{(m)} \leftarrow \max\left(0,\, W_{3,k}^{(m)}\right). \tag{22}$$

在最后一个训练阶段，我们改用 L-BFGS-B 优化器对网络参数进行微调。L-BFGS-B 优化器可以将权重 $\boldsymbol{W}_{(m)\,2,\ k}$和 $W_{3\,k}^{(m)}$, 的非负约束直接纳入优化问题。L-BFGS-B 优化器是一种拟牛顿法，使用有限的内存来近似逆海森矩阵。

2.2.2 无监督训练

对于无监督训练，我们假设变形场和全局反作用力是通过实验测得的。网络经过训练，可在未受约束的自由度上满足平衡，同时最小化预测反作用力与测量反作用力之间的差异。辨识遵循 EUCLID 框架 [27]。

训练目标由平衡残差和反力残差构成。令 $\mathbf{r}_{\text{free}}$表示限制在未受约束自由度上的内力向量，F_{pred} 和F_{meas} 分别表示预测反作用力和测量反作用力。对于每个选定的加载步，损失项定义为

$$\mathcal{L}_{\text{EUCLID}} = \frac{\|\mathbf{r}_{\text{free}}\|_2^2}{F_{\text{meas}}^2} + \lambda_R \left(\frac{F_{\text{pred}} - F_{\text{meas}}}{F_{\text{meas}}}\right)^2, \tag{23}$$

其中，$\lambda_R = 50$ 对全局反作用力约束赋予权重。第一项在测得的变形状态下施加弱平衡约束，第二项则确保与实验测得的合力一致。目标函数在所选加载步上取平均，并加入第 2.3 节所述的 L_1 正则化和模态内耦合惩罚项。

相同的优化　器设置也用于训练，采用 Adam 和 L-BFGS-B　　.

2.3 稀疏性

我们通过三种机制促进稀疏性：L1 正则化、模态内耦合惩罚和显式模态剪枝。

小幅值的伪模态会妨碍可解释性。因此，我们对幅值 $W_{3\,k}^{(m)}$，引入 L_1 惩罚，以鼓励其精确为零。 L_1 正则化项定义为

$$\mathcal{R}_{\text{L1}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{3} \left|W_{3,k}^{(m)}\right|. \tag{24}$$

该项乘以 λ_{L1} 后加到损失中。 L_1 惩罚还会将振幅推向零，从而抑制对应变能贡献较小的子网络。为确保足够小的振幅被精确设为零，我们在每次梯度步之后采用如下形式的近端更新

$$W_{3,k}^{(m)} \leftarrow \max\left(0, W_{3,k}^{(m)} - \lambda_{\text{L1}}\eta\right), \tag{25}$$

其中， η 是优化器的步长。如果 $W_{3}^{(m)}{}_{,\,k} = 0$，那么 $f_{m,\,k}(I_k) = 0$ ，指数函数表示中的对应因子为 1。每个非活跃子网络都不贡献依赖变形的能量，也无法生成伪模态。

此外，我们会惩罚同时依赖全部三个不变量的模态。这类三元耦合通常难以解释，而单变量模态和双变量贡献则可以更直接地与已有的本构项建立联系。因此，我们引入模态内耦合正则项

$$\mathcal{R}_{3\ \mathrm{cross}} = \sum_{m=1}^{M} W_{3,1}^{(m)} W_{3,2}^{(m)} W_{3,3}^{(m)}. \tag{26}$$

由于 $W_{3}^{(m)}{}_{,\,k} \geq 0$，当且仅当某个模态的三个子网络中至少有一个处于非激活状态时，该模态对这一惩罚项的贡献才会消失。因此，该正则项允许任意单变量模态，例如仅依赖于 I_1、I_2 或 J 的模态，以及双变量耦合，同时抑制 I_1、I_2 和 J 的三元耦合。对于具有两个不变量的模型，即不可压缩材料，两个振幅的相应乘积定义为 $\mathcal{R}_{2\ \mathrm{cross}}$。相应项分别以 $\lambda_{2\ \mathrm{cross}}$ 和 $\lambda_{3\ \text{交叉}}$ 为因子计入目标函数。
最后，在训练过程中移除冗余模态。如果两个模态依赖于相同的不变量集合，且二者都产生非常数贡献，则认为它们是冗余的。在这种情况下，我们会移除对总应变能的贡献较小的模态，该贡献在训练域上进行测量。尽管剪枝会暂时增加损失，但剩余模态随后可以进行调整，以补偿被移除的贡献。如果这些模态依赖于两个不变量，剪枝其中一个会将模型限制为相应二维贡献的单个秩一近似，因此可能丢弃相关信息。尽管如此，我们仍允许进行这种剪枝，因为此类秩一表示在人工设计的本构模型中得到了广泛应用。

作为另一种方案，我们还研究了一种正则化方法，该方法通过余弦相似度直接惩罚不同模态所学习到的一维函数之间的相似性。该方法并不奏效：各模态会相互竞争以降低相似度惩罚，这可能导致贡献的分配不稳定以及伪项的出现。

在监督训练和无监督训练中，训练损失均加入了以下促进稀疏性的项：

$$\mathcal{L}_{\mathrm{Sparsity}} = \lambda_{\mathrm{L1}}\mathcal{R}_{\mathrm{L1}} + \lambda_{2\ \mathrm{cross}}\mathcal{R}_{2\ \mathrm{cross}} + \lambda_{3\ \mathrm{cross}}\mathcal{R}_{3\ \mathrm{cross}} \tag{27}$$

3 基准测试

我们在两个有监督基准测试和一个无监督基准测试中评估该方法。在第 3.1 节和第 3.2 节的监督学习任务中，我们根据已知材料模型生成给定变形所对应的应变能数据集，并训练网络学习其潜在的应变能函数。在第 3.3 节的无监督学习任务中，我们使用合成实验数据训练网络，而不提供任何关于潜在材料模型的先验知识。在每个基准测试中，我们分别使用不同的材料定律进行识别，以展示该方法对各种本构定律的适用性。

3.1 多项式材料模型

我们考虑一种具有如下应变能函数的各向同性不可压缩材料

$$\Psi = C_{20}(I_1 - 3)^2 + C_{01}(I_2 - 3) \tag{28}$$

材料参数为 $C_{20} = 0.5$ 兆帕和 $C_{01} = 0.2$兆帕。该模型是表 1 所示一般多项式材料模型的一个特例。我们沿三种标准加载路径生成数据：单轴拉伸、等双轴拉伸和纯剪切。对于不可压缩各向同性材料，单轴拉伸和等双轴拉伸路径分别构成 $(I_1,\ I_2)$ 平面中可容许区域的下边界和上边界，而纯剪切则提供了一条穿过其内部的额外路径。

伸长比 $\lambda = L/L_0$ 表示当前长度 L 相对于参考长度 L_0 的比值。因此，$\lambda = 1$ 表示未变形构型，$\lambda > 1$ 表示拉伸伸长。每条加载路径使用 50 个数据点，共计 150 个训练点。相应的伸长比范围和不变量范围列于表 2。

表2：用于多项式材料模型辨识的基准加载。

加载模式	伸长范围	I_1 范围	I_2 范围
单轴	$[0.6,\ 3.0]$	$[3.0,\ 9.7]$	$[3.0,\ 6.1]$
纯剪切	$[0.6,\ 2.5]$	$[3.0,\ 7.4]$	$[3.0,\ 7.4]$
等双轴	$[0.6,\ 2.0]$	$[3.0,\ 8.1]$	$[3.0,\ 16.5]$

训练详情总结于表3中。该网络初始化为5个模式，每个模式由针对不变量 I_1 和 I_2的2个子网络组成。由于材料不可压缩，因此不使用针对不变量 J 的子网络。每个子网络由20个隐藏神经元组成，共计640个可训练参数。

表3：多项式材料模型的辨识训练详情。

学习率	1×10^{-3}
优化器	Adam，训练25000轮次 L-BFGS，用于最后5000个训练轮次
训练轮次总数	30000
正则化	$\lambda_{\text{L1}} = \lambda_{2\ \text{交叉}} = 1 \times 10^{-3}$
模态剪枝	训练至 5000 轮次前线性递增 10000 轮次后

训练后的最终网络如图 2 所示。列表示模态，行表示 I_1 和 I_2的子网络。图中省略了参考状态能量和应力修正。对于每个模态，均标示了其对总应变能的相对贡献。该网络包含两个活跃模态：一个仅取决于 I_1，另一个仅取决于 I_2。相应的解析函数以红色虚线表示。学习得到的模型恢复了多项式模型的稀疏结构，并准确近似了其应变能。在标准台式计算机上，训练只需几分钟。

尽管稀疏本构识别具有病态性质，该网络仍在此基准测试中恢复了活跃模态的数量以及参考能量的函数形式。
网络的泛化能力如图 3 所示，其中在不变量平面上展示了学习得到的应变能函数。学习得到的模型准确捕捉了

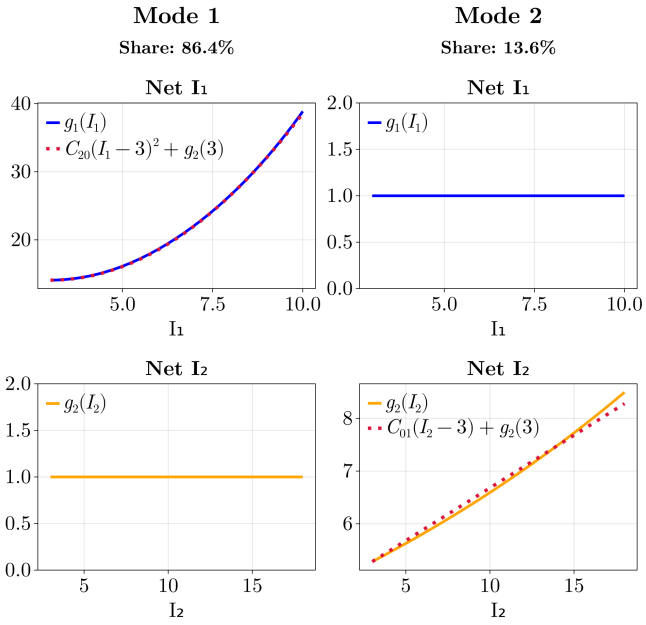

图 2：多项式材料模型的辨识出的材料模型。

多项式模型的能量景观，即使是在训练数据未涵盖的不变量空间区域也是如此。最大误差出现在图的右侧，此处 I_1 的值较高，超过了所有训练数据点。这凸显了网络在训练数据之间进行插值并泛化到未见过的变形状态的能力。

在图 4 中，我们评估了学习得到的模型在训练中使用的三种加载模式下的表现。将预测的应力-应变曲线与真实数据进行比较后发现，对于单轴和纯剪切加载条件，学习得到的模型与真实材料响应高度吻合。对于等双轴加载，学习得到的模型在高拉伸比下高估了应力，这与能量景观中观察到的误差一致。该区域对应于 I_1 和 I_2 的高值。

最后，图 5 展示了训练过程的收敛历史。残差定义为网络预测值与真实参考应变能之间的相对 L_2 误差范数。在训练初期，残差迅速下降；随后，随着网络逐渐接近最优解，收敛速度减慢。在约 10000 个训练轮次时，模态剪枝被激活，导致训练损失出现峰值。尽管如此，网络很快便恢复，并进一步降低了训练损失。最终损失值为 0.4%，这表明学习得到的模型能够以很高的准确性近似底层应变能函数。

稀疏正则化对于辨识底层材料模型至关重要。没有正则化时，网络可能会学习到一个包含更多活跃模态的不同材料模型，该模型的可解释性较差，也更难分析。第3.1.1节讨论了正则化的影响。我们还研究了网络规模和数据集规模的影响。对于每个子网络包含超过 10 个隐藏神经元的足够大网络，即使采用不同的随机初始化，网络也能够鲁棒地辨识底层材料模型。数据集规模也呈现出类似的影响。对于足够大的数据集，即每条加载路径约有 30 个以上训练点时，即使采用不同的随机初始化，网络也能够鲁棒地辨识底层材料模型。然而，当训练点数量较少时，网络可能会学习到一个不同的材料模型。第3.1.2节讨论了这种鲁棒性以及另一种学得的材料模型。

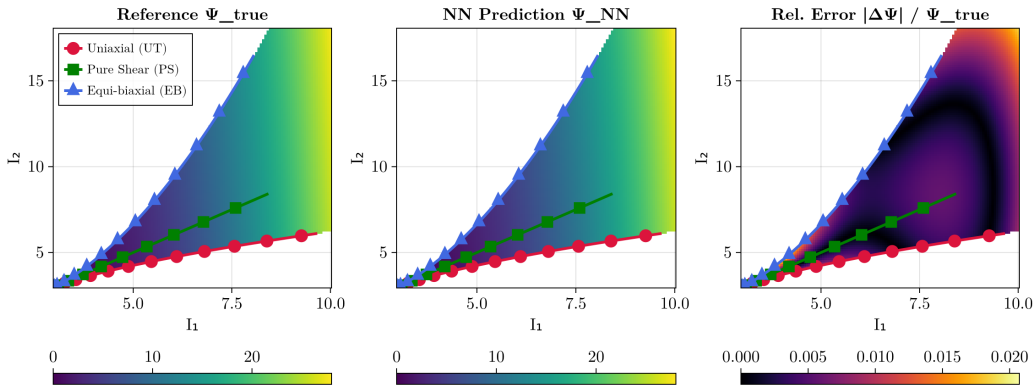

图 3：多项式材料模型中学习得到的应变能函数与真实应变能函数的比较。训练数据的加载模式以彩色线条表示。

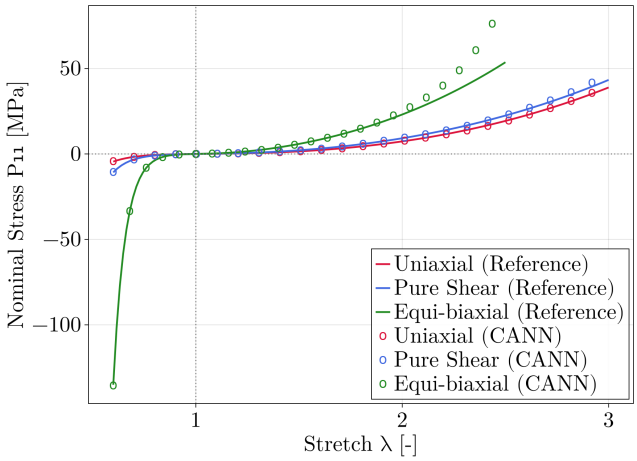

图 4：多项式材料模型的加载模式。

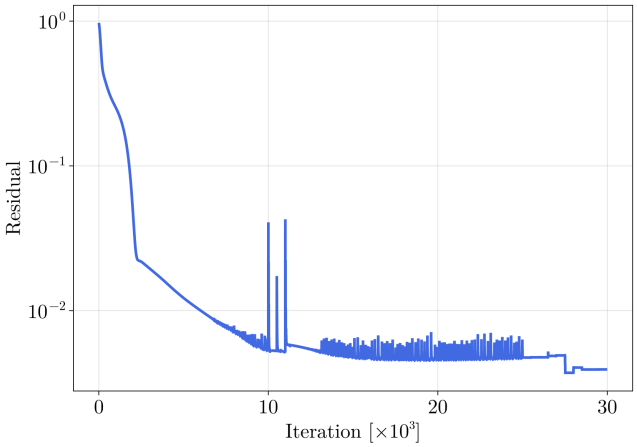

图 5：神经网络在多项式材料模型上的训练收敛历史。

3.1.1 稀疏正则化的影响

我们研究稀疏正则化对底层材料模型辨识的影响。采用与第3.1节相同的训练过程和超参数，但改变稀疏正则化。我们展示了采用三种不同正则化权重 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\,\text{交叉}} \in \{0, 1\times10^{-3}, 1\times10^{-1}\}$ 时辨识出的材料模型，并给出训练数据集及额外测试数据集上的平均误差，该误差是三次不同运行的平均值。此处，误差指均方根误差。测试数据集包含不变量平面可行区域内的1000个点，其中 $I_1 \in [3.0, 10.0]$ 和 $I_2 \in [3.0, 16.0]$。在本研究中，我们同时改变正则化权重 λ_{L1} 和 $\lambda_{2\,\mathrm{cross}}$，即 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\,\text{交叉}}$。本研究中禁用了模态剪枝。只展示至少包含一个非恒定函数的活跃模态。首先，我们考察不进行正则化的训练，即研究 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\,\mathrm{cross}} = 0$。辨识出的材料模型如图6所示。网络辨识出了一个包含5个耦合活跃模态的材料模型。各模态按其对总应变能的贡献排序。训练和测试数据上的学习网络误差都很低，分别为0.13%和0.26%。然而，由于所有单个模态在 I_1 和 I_2中均相互耦合，因此学习得到的材料模型难以解释。对于多个网络，其贡献几乎保持恒定，在输入变化时仅有微小改变。

其次，使用较高的正则化权重 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\,\text{交叉}} = 1\times10^{-1}$。辨识出的材料模型如图 7 所示。网络辨识出一个含有 1 个活跃模态的材料模型。强正则化会使材料模型更加稀疏，活跃模态更少，因此更具可解释性，也更易于分析。然而，训练误差和测试误差分别增至 0.54% 和 1.4%。

最后，采用原研究中的正则化权重 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\,\mathrm{cross}} = 1\times10^{-3}$。不进行模态剪枝时，网络保留三个活跃模态：一个仅依赖于 I_1，另外两个仅依赖于 I_2。辨识出的材料模型如图 8 所示。训练数据和测试数据上的误差分别为 0.44% 和 0.63%，在准确性与可解释性之间取得了折中。

结果表明，稀疏正则化会显著影响对底层材料模型的辨识。较大的正则化权重会使材料模型更加稀疏、活跃模态更少，因此更易于分析。然而，过大的正则化权重可能导致材料模型过度简化，无法准确捕捉底层材料行为。因此，谨慎选择正则化权重对于辨识出有意义且具有可解释性的材料模型至关重要。可以采用经典模型选择技术来选取最优正则化权重，例如 [28] 中的做法。然而，在本文中，通常只需使用量级为 $\mathcal{O}(1\times10^{-3})$ 的较小正则化权重，就能在准确性与可解释性之间取得良好平衡。

3.1.2 噪声

接下来，我们研究训练数据中的噪声对识别程序的影响。我们添加高斯噪声，其标准差设为应变能函数最大值的一定百分比。数据被截断为正值。我们采用与第3.1节相同的训练过程和超参数。对于每个噪声水平，我们使用相同的架构和不同的随机初始化训练五个网络，以评估识别程序的鲁棒性。为了进行评估，我们在不变量平面的可行区域内生成包含1000个点的测试集，其中 $I_1 \in [3.0, 10.0]$ 和 $I_2 \in [3.0, 16.0]$。该测试集用于评估学习得到的模型在未见数据上的表现，并评估网络的泛化能力。

随着噪声水平增加，测试集均方根误差如图9所示。均值和

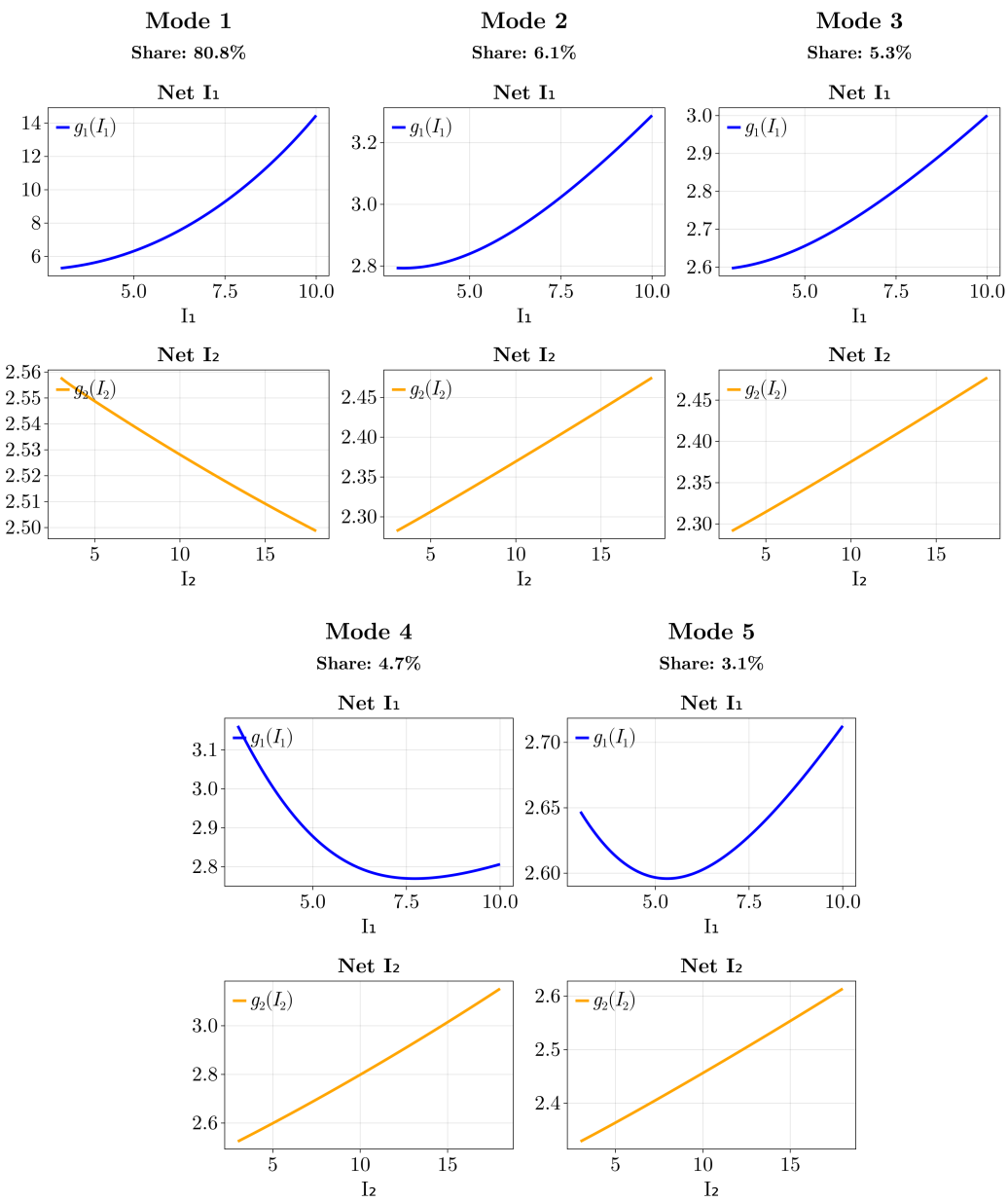

图6：无正则化辨识：针对含有 $\lambda_{\mathrm{L1}} = \lambda_{2\ \mathrm{cross}} = 0$ 的多项式材料模型所辨识出的材料模型。

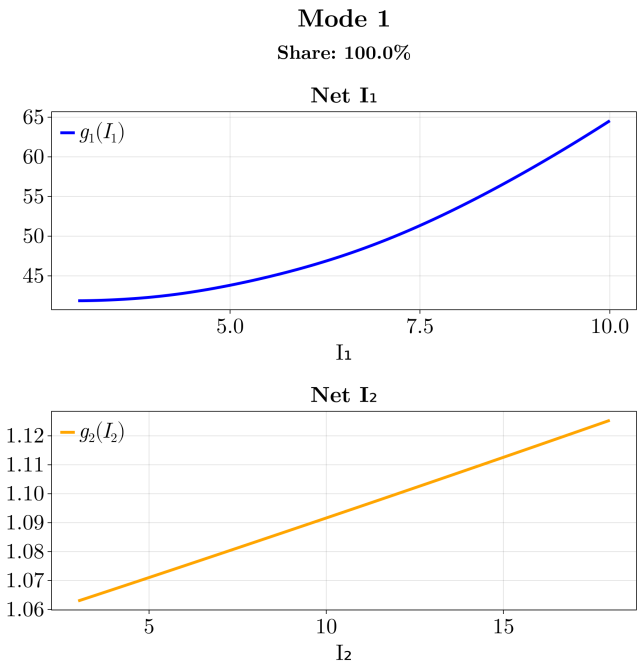

图 7：强正则化：带有 $\lambda_{\text{L1}} = \lambda_{2\,\text{交叉}} = 1 \times 10^{-1}$的多项式材料模型的辨识出的材料模型。

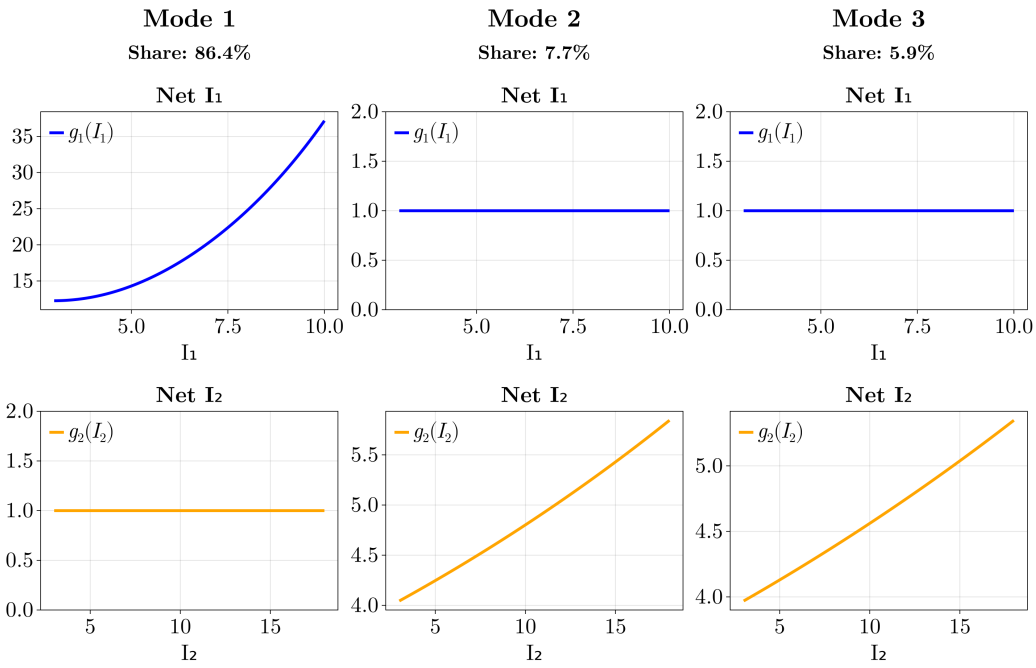

图 8：中等正则化：未进行模态剪枝、带有 $\lambda_{\text{L1}} = \lambda_{2\,\text{交叉}} = 1 \times 10^{-3}$ 的多项式材料模型的辨识出的材料模型。

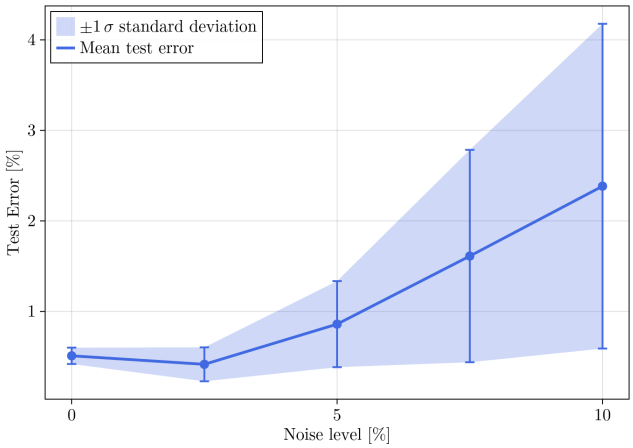

图9: 随着噪声水平增加，所学习神经网络的均方根误差 l.

图中还展示了五次运行中误差的标准差。误差按预测应变能值与真实应变能值之间的均方误差计算。低于 5% 的噪声水平对参考材料模型的辨识影响很小。这种鲁棒性可能反映了网络在噪声干扰下恢复应变能内在结构的能力。然而，当噪声水平达到或超过 5% 时，网络有时会辨识出不同的材料模型，该模型仅包含一个模态。图10展示了噪声水平为 10% 时辨识出的材料模型。该模型仅包含一个同时耦合两个不变量的模态。图11沿各加载条件比较了所学习的应变能函数与真实应变能函数。该模型能够较好地表示训练数据，但未能捕捉应变能函数的内在结构。因此，报告的测试误差较高，为 1.4%。检查所学习的组成部分可以揭示意外行为，例如 I_2 依赖关系在约 $I_2 = 6.0$ 处出现的折点。这些观察结果有助于指导后续实验，从而提高模型的准确性和泛化能力。在黑箱本构神经网络中，这类诊断信息不易直接获取。

3.2 莫尼-里夫林材料模型

作为第二个监督学习基准，我们考虑一种可压缩Mooney-Rivlin材料，其应变能函数为

$$\Psi = C_{10}(I_1 J^{-2/3} - 3) + C_{01}(I_2 J^{-4/3} - 3) + D(J-1)^2 \tag{29}$$

其中 $C_{10} = 0.5$兆帕、 $C_{01} = 0.2$ 兆帕和 $D = 5.0$ 兆帕。前两项描述等容响应，最后一项描述体积响应。
等容分解从前两个不变量中消除了体积变化。对于三维变形梯度，因子 $J^{-2/3}$和 $J^{-4/3}$分别补偿 I_1 和 I_2的体积缩放。因此， $I_1 J^{-2/3}$ 和 $I_2 J^{-4/3}$ 描述的形状变化不受体积变化影响，而 J 控制响应的体积部分。这种分解为所提出的架构提供了一个有用的测试：网络必须学习 J 的非整数幂（这些幂将等容不变量与原始坐标耦合），以及独立的体积贡献。

该材料模型在 I_1、 I_2 和 J 上并非凸函数。因此，这项基准测试还考验网络逼近非凸参考能量的能力。

对于训练数据，我们使用 $I_1 \in [3.0, 20.0]$、 $I_2 \in [3.0, 20.0]$ 和 $J \in [0.25, 4.0]$ 对可容许变形域进行采样。其中一半样本具有 $J \in [0.25, 1.0]$，另一半具有 $J \in [1.0, 4.0]$,

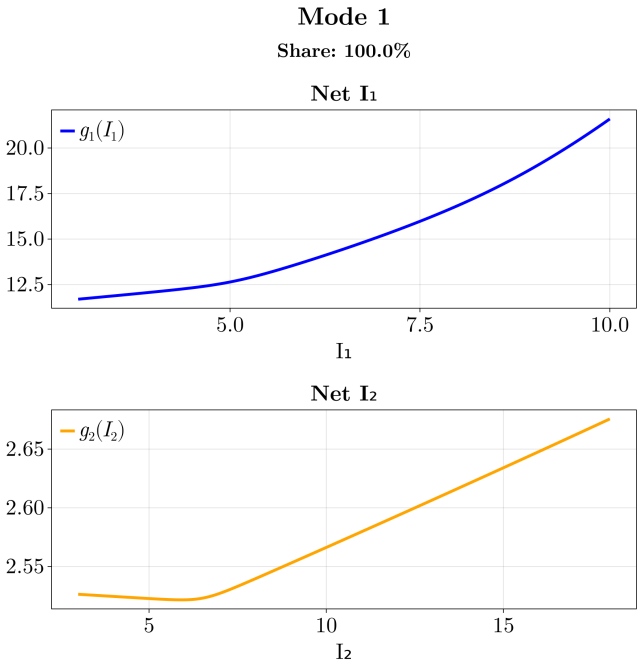

图10：多项式材料模型的另一种神经网络结构。

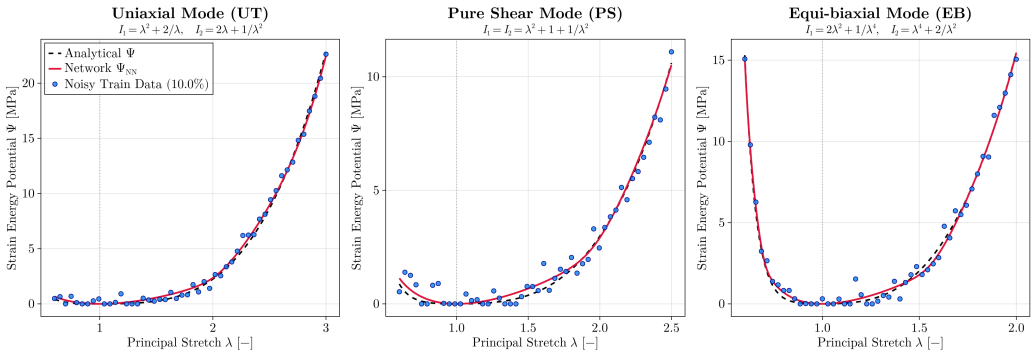

图11：C　　将带噪声的训练数据与神经网络预测进行比较。

从而同时表示压缩和伸长。数据集共包含 500 个训练点。

训练详情总结于表4。我们选择较大的 $\lambda_{3\,\mathrm{cross}}$ 值，以抑制参考模型中不存在的三向不变量耦合。网络初始化为 5 个模态，每个模态包含 3 个用于不变量 I_1、I_2 和 J 的子网络。最后一个模态是纯体积模态，其包含 $f_{m,\,1} = f_{m,\,2} = 0$ 和 $f_{m,\,3} \neq 0$。不过，如果不需要，网络可以剪除该模态。每个子网络包含 20 个隐藏神经元，因此总共有 806 个可训练参数。

表4：Mooney-Rivlin材料模型辨识的训练详情。

学习率	5×10^{-2}
优化器	Adam，直至 37500 个训练轮次 最后 2500 个训练轮次使用 L-BFGS
训练轮次总数	40000
正则化	$\lambda_{\mathrm{L1}} = 1 \times 10^{-3}$ $\lambda_{3\,\text{次交叉}} = 10.0$ 线性递增，直至 10 000 个训练轮次
模态剪枝	经过 10 000 个训练轮次

识别出的网络如图12所示。该网络由 3 个具有相同结构的模式组成。对于表示雅可比矩阵的网络，图中以红色点划线表示解析表达式。不变量的幂 $J^{-2/3}$和 $J^{-4/3}$均以合理的准确性得以学习，展示了该网络学习不变量非整数幂的能力。训练数据上的误差为 2.6%，高于前一个示例。较高的误差可能反映了凸架构与参考能量之间的不匹配，因为参考能量在 I_1、I_2 和 J 中并非凸函数。

在 EUCLID 等基于库的方法中，必须在训练前将不变量的幂纳入候选库。因此，要恢复这些项，就需要一个信息足够丰富的库。二次体积项（$J-1$）^{2} 在各个模式之间共享。 $J < 1$ 的左分支包含在前两个模式中。这是合理的，因为我们没有强制网络学习压缩和伸长的对称响应。该压缩分支的引入也可能解释了 J所对应学习函数形状上的细微差异。从数学上讲，能量的分离并不唯一。

在图12中，将不变量的取值范围扩展到训练域之外，以展示网络合理的外推表现。训练域的边界用黑色虚线标出。

在图13中，学习得到的应变能函数以不变量平面的形式呈现。在训练域内，学习得到的能量与参考能量吻合较好。在该域之外，误差会增大，尤其是在 I_1 和 I_2较大时。

3.3 无监督识别

在无监督基准测试中，我们根据全场变形数据和全局反作用力来辨识本构模型，这些量可通过实验获取。训练时使用平衡残差和反力残差，不需要局部应力或应变能标签。

我们采用 Neo-Hookean 参考材料，其应变能为

$$\Psi = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3 - 2\ln(J)) + \frac{\lambda}{2}(J-1)^2 \tag{30}$$

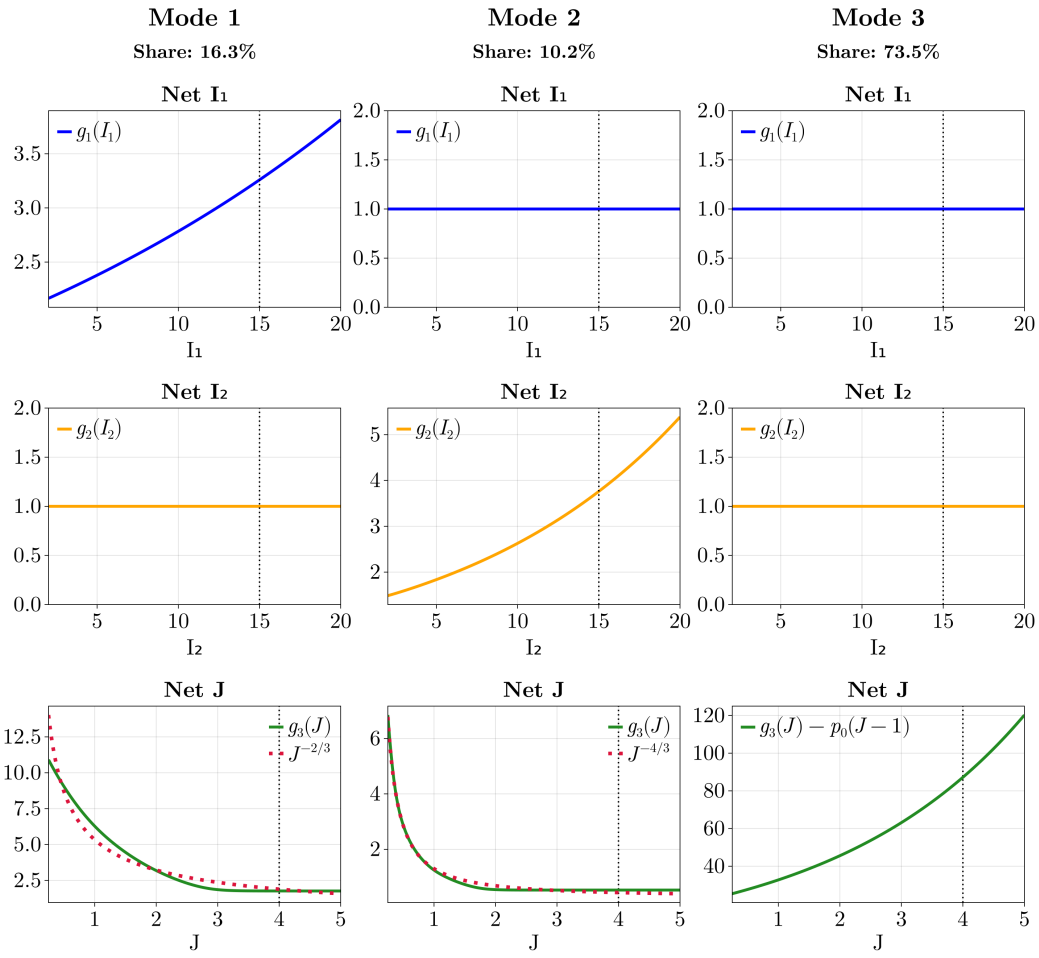

图12：采用等容分解的 Mooney-Rivlin材料模型所辨识出的材料模型。

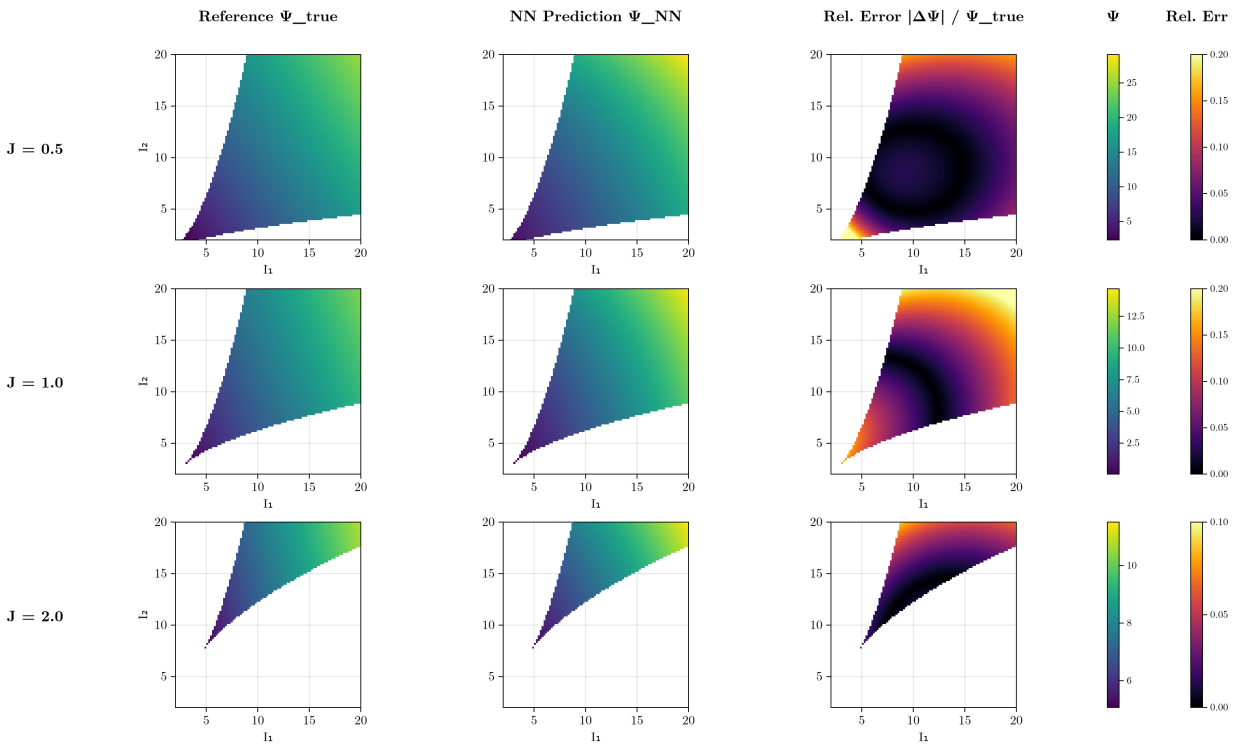

图13：对于不同的 J值，所学习的应变能函数与Mooney-Rivlin材料模型真实应变能函数的比较。

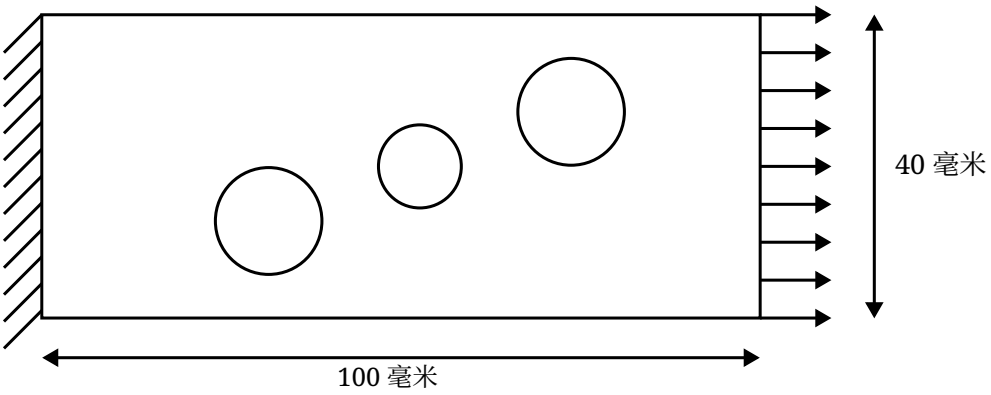

图14：无监督识别基准的板几何形状。

材料参数为 $\mu = 4$兆帕和 $\lambda = 6$ 兆帕。
为评估对不完美测量的鲁棒性，在不变量场相对于参考状态的距离中加入水平为 2% 的加性噪声，即加入到 $(I_1 - 3,\ I_2 - 3,\ J - 1)$ 中。由此得到的含噪运动学场被用作识别程序唯一的局部输入；反作用力仍作为约束学习得到的模型的全局测量。训练从 Adam 开始，在此过程中逐步增大正则化权重并剪除冗余模态。随后使用 L-BFGS 对得到的稀疏模型进行微调。

表5：新胡克材料模型辨识的训练详情。

学习率	5×10^{-2}
优化器	Adam，直至训练 1000 轮 L-BFGS，直至训练 3000 轮
训练总轮数	3000
正则化	$\lambda_{\mathrm{L1}} = 1 \times 10^{-1}$ $\lambda_{3\text{次交叉}} = 1.0$ 线性递增，直至 500 个训练轮次
模态剪枝	500 个训练轮次后

训练数据采用薄板在单轴拉伸下进行有限元模拟所得的运动学变形场和全局反作用力。薄板的几何形状如图14所示。孔的位置和尺寸见表6。薄板高度为 2 mm。左侧施加零狄利克雷边界条件，右侧则施加非零狄利克雷边界条件。在薄板右侧测量反作用力。采用包含 1357 个四面体单元的有限元网格。薄板沿水平方向拉伸。训练数据由薄板伸长量分别为 25%、50%、75% 和 100% 时的快照组成。

表6：板中三个圆孔的几何形状。

Hole	中点 x [毫米]	中点 y [毫米]	半径 r [毫米]
1	30.0	12.8	7.2
2	70.0	27.2	7.2
3	50.0	20.0	5.6

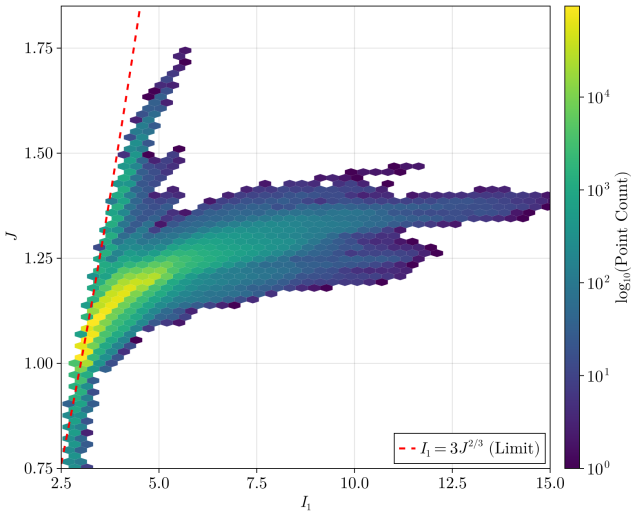

图15：训练数据中的变形状态。

图15展示了训练数据中的变形状态。颜色表示训练数据集中不变量 I_1 和 J的给定组合对应的数据点数量。白色区域内没有数据点。训练数据集中在由不变量 $I_1 \in [3, 5]$ 和 $J \in [1.0, 1.25]$ 确定的区域内。

训练详情汇总于表5。网络以5个模态初始化，每个模态由3个子网络组成，分别对应不变量 I_1、I_2 和 J。神经网络训练后识别出的本构模型如图16所示。该模型利用两个活跃模态即可较好地逼近数据。图中以红色虚线显示活跃项的解析函数。网络恢复了参考材料模型的结构，正确识别出 I_2 没有任何贡献，也不存在不变量之间的耦合。

收敛历史如图17所示。残差由公式（23）给出。Adam 首先识别模型的整体结构，包括活跃的不变量依赖关系；随后，L-BFGS 阶段从 1000 个训练轮次后开始，大幅降低了剩余的力残差和平衡残差。

图18比较了50%伸长率时预测的应力分布与参考应力分布。该模型很好地再现了整体应力响应，其中包含 $R^2 = 0.977$。模型会高估应力，尤其是在应力值较高时。

图19比较了伸长率为25%和75%时预测的应力场与参考应力场。两个载荷水平下的空间应力模式均吻合良好，包括孔洞周围的局部化区域。最大偏差出现在高应力区域。这些偏差与训练状态数量有限，以及测得的变形数据集中在相对狭窄的不变量空间区域内相符。根据数据密度对训练数据重新加权，或许能进一步减小这些偏差。

4 讨论

本研究提出了一种本构神经网络架构，将神经网络的逼近能力与稀疏本构模型（例如通过 EUCLID 识别出的模型）的结构可解释性相结合。应变能表示为多个模式之和，每个模式均由针对单个不变量的一维输入凸子网络构成。通过正则化和模态剪枝促进稀疏性。这种组合能够实现可解释的分解，而无需预先指定相关函数形式

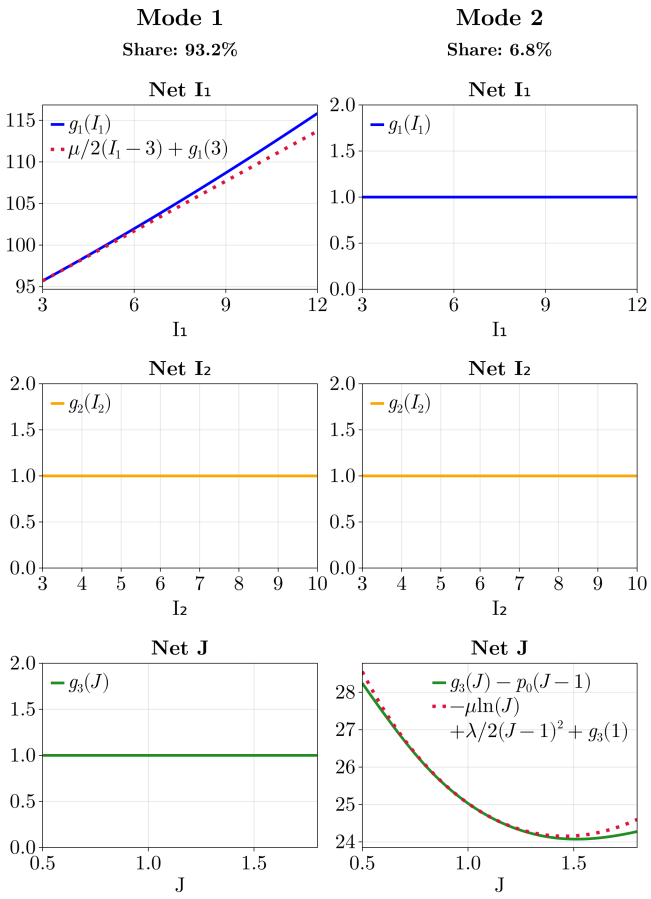

图16：无监督基准测试的识别本构模型。

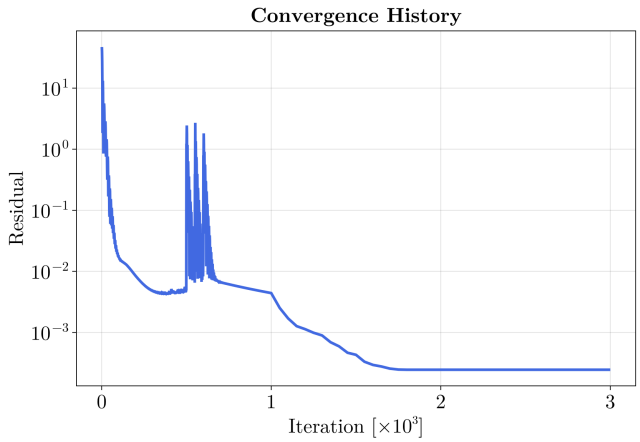

图17：无监督学习过程的收敛历史。

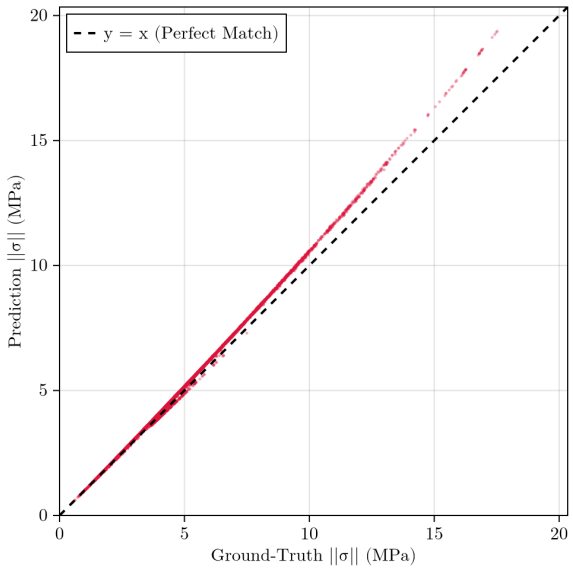

图18：50%伸长率下预测应力分布与参考应力分布的比较。

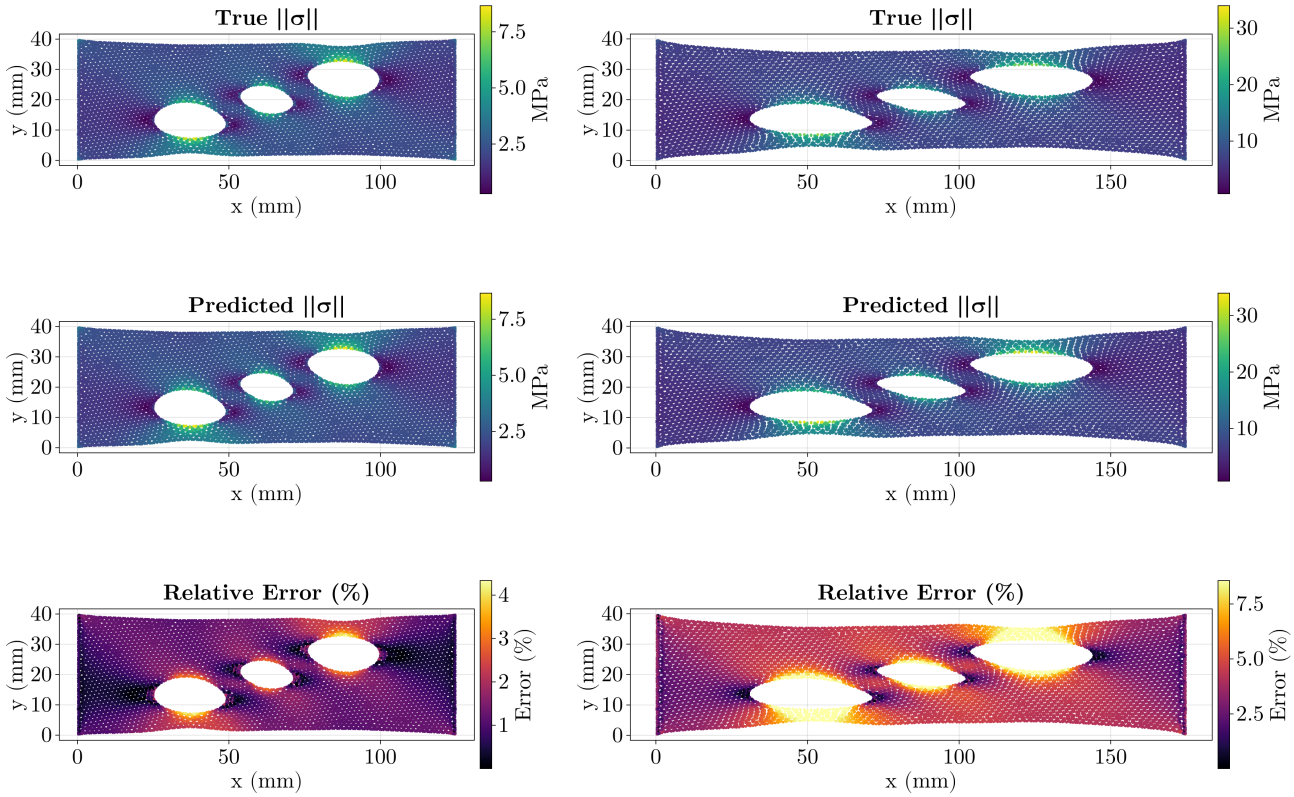

图19：25%和75%伸长率下的应力场图。

一个固定的库。
所提出的架构可视为物理增强神经网络（PANNs）、本构神经网络（CANNs）和 Kolmogorov-Arnold 网络（KANs）的一种互补方法。PANNs 和 CANNs 在约束选定物理性质的同时，可以提供高度富有表现力的近似，但其内部参数不一定能揭示从数据中学习到的不变量依赖关系。KANs 同样使一维函数可以直观地进行可视化，尽管其多层组合可能使这些函数与应变能之间的关系难以解释。相比之下，本文方法在不预先规定函数形状的情况下学习一维函数，同时，稀疏的乘积和结构使保留的不变量耦合关系变得明确。因此，该方法旨在保留神经网络的大部分表达能力，同时提供一种可检查并可与既有本构模型建立联系的分解形式。这种可解释性不应被理解为唯一性：不同的分解可能表示相同的本构响应，因此，所选项应被理解为由数据支持的紧凑表示，而不是对物理机制的唯一辨识。

有监督基准测试表明，所提出的方法能够恢复代表性超弹性能量的结构和函数行为。该架构还能够近似莫尼-里夫林模型的等容分解，包括基于函数库的方法必须预先指定的不变量幂次。这些结果体现了该方法相较于预设函数库的主要优势：网络能够学习一维函数的形状，而正则化则决定保留哪些不变量耦合。与此同时，在训练域之外观察到的外推误差表明，该架构的物理约束和凸性并不能消除对充分且信息丰富的训练数据的需求。

无监督实验进一步表明，无需局部应力标签，仅凭全场运动学和全局反作用力即可识别出相同的表示。学习得到的模型能够再现测得的力-响应关系，并捕捉主要的应力场分布模式，尽管在应力较大且变形数据稀疏的区域仍存在偏差。

若干局限性为未来研究提供了方向。本研究仅考虑由三个不变量描述的各向同性材料。原则上，该框架可以扩展至更多不变量，包括各向异性不变量或广义不变量，但这会增加可能的耦合数量，也会提高可靠进行模型选择所需的变形数据量。因此，需要开发合适的稀疏化策略。
一个重要的后续步骤是将其应用于实验数据，因为实验数据会带来噪声、校准误差、不完整的场，以及施加边界条件时的不确定性；因此，稳健训练、不确定性量化以及在独立加载路径上的验证，对于评估稀疏分解的泛化能力和可辨识性至关重要。还可以通过引入材料嵌入，将该架构扩展到材料族，从多组实验中学习低维表示 [22]。这种扩展有望促进材料状态之间的信息共享与插值，并将稀疏本构发现与用于材料设计和多材料有限元模拟的代理建模联系起来。

致谢

由欧盟资助（欧洲研究委员会，Gen-TSM，101124463）。文中表达的观点和意见仅代表作者本人，不一定反映欧盟或欧洲研究委员会执行机构的立场。欧盟和资助机构均不对此承担责任。

数据可用性

共同　de 可在 https://github.com/ikm-luh/Sparse_PGD_NN_SourceCode 获取　.

生成式 AI 和人工智能辅助技术声明

在准备本文期间，作者使用了 Gemini3.8 Flash 和 OpenAI GPT 6.1 Sol，以提高稿件的可读性和语言质量，并协助实现和调试所提出的算法。使用这些工具/服务后，作者根据需要对内容和代码进行了审查、测试和编辑，并对已发表文章的内容承担全部责任。

参考文献

[1] R. Abdusalamov、M. Hillg¨artner 和 M. Itskov。“通过符号回归自动生成可解释的超弹性材料模型”。英文。载于：《国际工程数值方法杂志》124.9（2023年5月），第2093–2104页。 ISSN：0029-5981，1097-0207。 DOI： 10.1002/nme.7203。[2] R. Agarwal 等。《神经加性模型：利用神经网络实现可解释机器学习》。英文。arXiv:2004.13912 [cs.LG]。2021年10月。 DOI： 10.48550/arXiv.2004.13912。[3] B. Alheit、S. Kumar 和 M. Peirlinck。CANN-EUCLID：基于全场数据的无监督本构人工神经网络模型发现。英文。版本号：2。2026年7月。 DOI：10.48550/ARXIV.2606.14565。[4] B. Amos、L. Xu 和 J. Z. Kolter。“输入凸神经网络”。载于：第34届国际机器学习会议论文集。第70卷。机器学习研究论文集。2017年，第146–155页。[5] B. Bahmani 和 W. Sun。“面向多凸不可压缩超弹性材料的物理约束符号模型发现”。英文。载于：《国际工程数值方法杂志》125.15（2024年8月），e7473。 ISSN：0029-5981，1097-0207。 DOI： 10.1002/nme.7473。[6] A. Benady、E. Baranger 和 L. Chamoin。“NN-mCRE：一种改进的本构关系误差框架，用于利用物理增强神经网络无监督学习非线性状态定律”。英文。载于：《国际工程数值方法杂志》125.8（2024年4月），e7439。 ISSN：0029-5981，1097-0207。 DOI： 10.1002/nme.7439。[7] S. L. Brunton、J. L. Proctor 和 J. N. Kutz。“通过非线性动力系统稀疏识别从数据中发现控制方程”。载于：美国国家科学院院刊113.15（2016年），第3932–3937页。 DOI： 10.1073/pnas.1517384113。[8] A. Chatterjee。“本征正交分解简介”。英文。载于：《当代科学》78.7（2000年），第808–817页。[9] M. Flaschel、S. Kumar 和 L. De Lorenzis。“无监督发现可解释的超弹性本构定律”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》381（2021年8月），第113852页。 ISSN：00457825。 DOI： 10.1016/j.cma.2021.113852。[10] J. N. Fuhg、R. E. Jones 和 N. Bouklas。“对物理增强神经网络进行极端稀疏化，以实现力学领域的可解释模型发现”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》426（2024年6月），第116973页。 ISSN：00457825。 DOI：10.1016/j.cma.2024.116973。

[11] J. Ghaboussi、J. H. Garrett 和 X. Wu。“利用神经网络进行基于知识的材料行为建模”。载于：《工程力学杂志》117.1（1991年），第132–153页。DOI：10.1061/(ASCE)0733-9399(1991)117:1(132)。[12] H. He 等。“针对未填充橡胶和高填充橡胶纳米复合材料的85种超弹性本构模型的比较研究”。英文。载于：《纳米材料科学》4.2（2022年6月），第64–82页。ISSN：25899651。DOI：10.1016/j.nanoms.2021.07.003。[13] H. Holthusen 等。“非弹性本构人工神经网络的理论与实现”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》428（2024年8月），第117063页。ISSN：00457825。DOI：10.1016/j.cma.2024.117063。[14] C. Jailin 等。“利用物理增强神经网络实验学习超弹性行为”。英文。载于：《实验力学》64.9（2024年11月），第1465–1481页。ISSN：0014-4851，1741-2765。DOI：10.1007/s11340-024-01106-5。[15] G. Kissas 等。“超弹性材料的语言”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》428（2024年8月），第117053页。ISSN：00457825。DOI：10.1016/j.cma.2024.117053。[16] P. Ladev`eze、J.-C. Passieux 和 D. N´eron。“LATIN多尺度计算方法与适当广义分解”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》199.21-22（2010年4月），第1287–1296页。ISSN：00457825。DOI：10.1016/j.cma.2009.06.023。[17] L. Linden 等。“神经网络与超弹性：物理约束指南”。英文。载于：《固体力学与物理学杂志》179（2023年10月），第105363页。ISSN：00225096。DOI：10.1016/j.jmps.2023.105363。[18] K. Linka 和 E. Kuhl。“迈向自动化模型发现的新型本构人工神经网络”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》403（2023年1月），第115731页。ISSN：00457825。DOI：10.1016/j.cma.2022.115731。[19] K. Linka、M. Rauter 和 E. Kuhl。“基于热力学的人工神经网络：模拟非线性材料行为”。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》375（2021年），第113611页。DOI：10.1016/j.cma.2020.113611。[20] K. Linka 等。“本构人工神经网络：通过深度学习实现预测性数据驱动本构建模的快速通用方法”。英文。载于：《计算物理学杂志》429（2021年3月），第110010页。ISSN：00219991。DOI：10.1016/j.jcp.2020.110010。[21] Z. C. Lipton。“模型可解释性的神话”。载于：《大数据》6.3（2018年），第229–268页。DOI：10.1089/big.2016.0116。[22] L. Mabileau 等。“从多种材料的异质全场实验中学习共享超弹性本构表示”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》464（2027年2月），第119498页。ISSN：00457825。DOI：10.1016/j.cma.2026.119498。[23] C. Rudin 等。《可解释机器学习：基本原则与十大重大挑战》。英文。arXiv:2103.11251 [cs.LG]。2021年7月。DOI：10.48550/arXiv.2103.11251。[24] U. R¨omer 等。“计算固体力学中模型校准与发现的约化方法和整体同时求解方法”。英文。载于：《应用力学评论》77.4（2025年7月），第040801页。ISSN：0003-6900，2379-0407。DOI：10.1115/1.4066118。

[25] V. Taۛc 等。“数据驱动超弹性的物理信息框架基准测试”。英文。载于：计算力学 73.1（2024年1月），第49–65页。 ISSN：0178-7675，1432-0924。DOI：10.1007/s00466-023-02355-2。[26] P. Thakolkaran 等。“CanKAN CANs？作为超弹性本构人工神经网络（CANs）的输入凸Kolmogorov-Arnold网络（KANs）”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》443（2025年8月），第118089页。 ISSN：00457825。 DOI：10.1016/j.cma.2025.118089。[27] P. Thakolkaran 等。“NN-EUCLID：无需应力数据的深度学习超弹性”。英文。载于：《固体力学与物理学杂志》169（2022年12月），第105076页。 ISSN：00225096。 DOI： 10.1016/j.jmps.2022.105076。[28] J. Urrea–Quintero 等。“通过将稀疏回归算法与模型选择准则配对，实现自动化本构模型发现”。英文。载于：《计算机在应用力学与工程中的方法》449（2026年2月），第118551页。 ISSN：00457825。 DOI：10.1016/j.cma.2025.118551。[29] Y. Wang、H. Xie 和 P. Jin。“张量神经网络及其数值积分”。英文。载于：《计算数学杂志》42.6（2024年11月），第1714–1742页。 ISSN：0254-9409，1991-7139。 DOI： 10.4208/jcm.2307-m2022-0233。