

华南理工大学硕士学位论文

# LaTeX 模板使用说明

redfu

指导教师：周嘉嘉 教授

华南理工大学

2025 年 4 月 4 日

## 摘要

流变学是研究物质变形和流动的科学，流变学本构方程作为其核心内容之一，是描述材料在外力作用下变形和流动行为的数学模型。传统本构方程的获取和研究方法主要依赖实验测定、理论推导和数值模拟，这些方法存在成本高、耗时长、难以泛化等问题，难以满足现代材料科学对高效、精确建模的需求。

近年来，基于数据驱动的机器学习方法开始应用于流变学本构方程的构建研究中，为解决传统方法的局限性提供了新思路。然而，当前的机器学习本构建模方法仍存在物理约束不足、未充分考虑流变学本构方程的历史依赖性、特征稀疏以及难以反推制备参数等问题。

针对上述问题，本文从时间域流变数据建模和频域数据建模两个方向开展研究。在时间域应力应变数据方面，本文创新性地采用物理信息门控循环单元（PI-GRU）进行时变本构数据的预测建模，利用 GRU 的门控机制有效捕捉流变学中的记忆效应和应变历史依赖性，同时引入物理残差作为损失函数的一部分，引入物理约束。相比传统深度前馈神经网络，PI-GRU 在经典本构方程的数值模拟数据和真实流变学实验数据上均表现出更好的预测效果和泛化能力。

在频域数据方面，本文采用物理信息神经网络（PINN）对材料的制备参数与储存模量、损耗模量、损耗角正切等频域数据关系进行正向建模，通过在损失函数中引入经典本构方程残差，为模型提供物理约束。同时，针对实验中多个制备参数作为特征时出现的稀疏性和分散性问题，本文使用注意力特征融合方法进行特征降维，进一步优化了模型效果。此外，本文使用条件变分自编码器（CVAE）对实验数据进行反向建模，实现了从特定流变学性质数据生成实验制备参数的逆向设计，与 PINN 形成正逆向联合建模框架，为高分子材料的设计提供了有效的辅助支持工具。

**关键词：**流变学；本构方程；门控循环单元；物理信息神经网络；条件变分自编码器

## Abstract

Rheology is the science that studies the deformation and flow of matter, and rheological constitutive equations, as one of its core components, are mathematical models that describe the deformation and flow behaviors of materials under external forces. Traditional methods for obtaining and studying constitutive equations primarily rely on experimental measurements, theoretical derivation, and numerical simulation; however, these methods are often costly, time-consuming, and lack generalizability, which makes it challenging to meet the demands of modern materials science for efficient and accurate modeling.

In recent years, data-driven machine learning approaches have been applied to the construction of rheological constitutive equations, offering new avenues to overcome the limitations of traditional methods. Nonetheless, current machine learning-based constitutive modeling methods still suffer from insufficient physical constraints, inadequate consideration of the historical dependency inherent in rheological constitutive equations, feature sparsity, and challenges in reverse engineering the processing parameters.

To address these issues, this study investigates two modeling directions: time-domain rheological data modeling and frequency-domain data modeling. For time-domain stress – strain data, an innovative approach employing a physics-informed gated recurrent unit (PI-GRU) is proposed for predicting time-varying constitutive data. The gated mechanism of the GRU effectively captures the memory effects and strain-history dependency in rheology, while the inclusion of a physical residual term in the loss function imposes physical constraints. Compared with traditional deep feedforward neural networks, the PI-GRU demonstrates superior predictive performance and generalization ability on both numerical simulation data derived from classical constitutive equations and experimental rheological data.

For frequency-domain data, a physics-informed neural network (PINN) is employed to model the relationship between the material processing parameters and frequency-domain properties, such as storage modulus, loss modulus, and loss tangent. By incorporating the residual of the classical constitutive equation into the loss function, physical constraints are imposed on the model. Furthermore, to address the sparsity and dispersion issues encountered when multiple processing parameters are used as features in experiments, an attention-based feature fusion

method is applied for dimensionality reduction, which further optimizes the model performance. In addition, a conditional variational autoencoder (CVAE) is used for inverse modeling of the experimental data, enabling the reverse design of processing parameters from specific rheological property data. Together with the PINN, this forms a forward–inverse joint modeling framework that serves as an effective tool for the design of polymer materials.

**Keywords:** Rheology; Constitutive Equations; Gated Recurrent Unit; Physics-Informed Neural Networks; Conditional Variational Autoencoder

# 目 录

摘要 .....	I
Abstract .....	II
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
1.1 流变学介绍 .....	1
1.1.1 流变学的核心研究内容 .....	1
1.1.2 流变学研究及应用方向 .....	2
1.2 本构方程 .....	2
1.2.1 线性本构方程 .....	2
1.2.2 非线性本构方程 .....	5
1.2.3 传统的本构方程的构建方法 .....	7
1.3 数据驱动方法流变学本构建模 .....	9
1.3.1 机器学习方法介绍 .....	9
1.3.2 机器学习流变学应用研究现状 .....	10
1.4 引入物理约束的神经网络研究 .....	13
1.4.1 引言 .....	13
1.4.2 物理信息神经网络研究现状 .....	14
1.4.3 其他物理信息深度学习模型 .....	17
1.5 本课题研究介绍 .....	17
1.5.1 研究内容 .....	18
1.5.2 研究创新点 .....	19
1.5.3 研究意义 .....	19
<b>第二章 流变学时间域本构方程的 GRU 建模研究 .....</b>	<b>21</b>
2.1 引言 .....	21
2.2 算法介绍 .....	21
2.2.1 时间序列数据介绍 .....	21
2.2.2 循环神经网络 .....	22
2.3 实验设计 .....	24
2.3.1 数据获取 .....	24

2.3.2 模型训练 .....	26
2.3.3 模型测试 .....	27
2.4 结果与讨论 .....	29
2.4.1 Herschel-Bulkley 模型建模 .....	29
2.4.2 Maxwell 模型建模 .....	31
2.4.3 Doi-Edwards 模型建模 .....	38
2.5 本章小结 .....	45
<b>第三章 PI-GRU 建模 .....</b>	<b>47</b>
3.1 PI-GRU 建模原理 .....	47
3.2 PI-GRU 建模方法 .....	47
3.3 PI-GRU 建模结果 .....	48
3.4 PI-GRU 建模分析 .....	48
3.4.1 Giesekus 模型建模 .....	49
3.4.2 真实数据集实验 .....	56
3.5 PI-GRU 建模总结 .....	56
<b>第四章 物理信息-生成式混合流变学本构建模方法研究 .....</b>	<b>60</b>
4.1 引言 .....	60
4.2 实验设计 .....	61
4.2.1 PINN 数据预处理 .....	61
4.2.2 PINN 模型训练 .....	63
4.2.3 PINN 模型测试 .....	65
4.2.4 CVAE 反向建模训练 .....	66
4.2.5 CVAE 反向建模测试 .....	66
4.2.6 正逆向联合建模 .....	66
4.3 结果与讨论 .....	67
4.3.1 低保真数据拟合 .....	67
4.3.2 单 PBA 流体本构建模 .....	69
4.3.3 单组分 PBA 注入的 PFGs 本构建模 .....	72
4.3.4 多组分 PBA 注入的 PFGs 本构建模 .....	74
4.3.5 CVAE 组分预测的多模态解分析 .....	76

4.3.6 正逆向联合建模分析 .....	80
4.4 本章小结 .....	82
总结与展望 .....	84
参考文献 .....	87
攻读博士/硕士学位期间取得的研究成果 .....	97
致 谢 .....	98

# 第一章 绪论

## 1.1 流变学介绍

### 1.1.1 流变学的核心研究内容

流变学是研究物质在外力作用下变形和流动的科学，其研究对象涵盖了流体、软固体以及在特定条件下可以流动的固体<sup>[1]</sup>。流变学的核心在于揭示材料的应力、应变和时间之间的内在关系，并通过本构方程对这些关系进行定量描述。流变学的研究不仅深化了对材料力学行为的理解，还为工程应用和科学研究提供了重要的理论基础。流变学的核心研究内容主要包括以下几个方面<sup>[2-3]</sup>：

- (1) 材料的流动与变形行为：材料的流动与变形行为是流变学研究的核心内容之一。通过实验和理论模型，流变学揭示了材料在外力作用下的复杂力学行为。例如，蠕变现象（即在恒定应力下，材料的变形随时间逐渐增加）和应力松弛现象（即在恒定应变下，材料的应力随时间逐渐减小）是流变学中重要的研究对象<sup>[4-5]</sup>。这些现象不仅反映了材料的时间依赖性行为，还为材料的长期性能评估提供了理论依据。此外，流变学还研究了材料的非线性力学行为，如屈服、塑性变形和断裂等，这些研究对于理解材料的宏观力学性能具有重要意义<sup>[6-7]</sup>。
- (2) 本构方程的构建：本构方程是流变学中用于描述材料力学行为的数学工具，其核心在于建立应力、应变和时间之间的定量关系。对于牛顿流体，其本构方程基于牛顿黏性定律，即应力与应变率成正比<sup>[2]</sup>。然而，对于非牛顿流体和软固体，其本构方程则更为复杂，通常需要考虑材料的非线性、黏弹性以及时间依赖性等特性<sup>[8]</sup>。通过构建合理的本构方程，流变学能够对各种物理现象进行精确的数学描述，从而为工程设计和材料开发提供理论支持。
- (3) 实验与模拟方法：流变学实验是研究材料流变性能的重要手段，常见的实验方法包括蠕变实验、应力松弛实验和动力试验等<sup>[3]</sup>。这些实验能够直接测量材料在不同条件下的力学响应，为理论模型的验证和优化提供实验数据。近年来，随着计算模拟技术的发展，流变学研究逐渐从唯象模型向定量科学转变。微观实验技术（如 X 射线散射、中子散射）与计算模拟的结合，使得研究者能够在微观尺度上揭示材料的流变机制，从而推动流变学向更高精度和更深层次发展<sup>[9-10]</sup>。

### 1.1.2 流变学研究及应用方向

流变学的研究方向广泛，涵盖了多个学科和领域，例如高分子流变学研究高分子材料的分子结构与其流变行为的关系，包括聚合物熔体和溶液的拉伸流变行为<sup>[11]</sup>。生物流变学研究生物材料（如血液、肌肉）的流变特性，揭示生理和病理过程中的力学机制<sup>[12-13]</sup>。地质流变学研究岩石、土壤等地质材料的流变行为，应用于地震预测、矿产资源开发等领域<sup>[14]</sup>。在材料加工<sup>[5]</sup>、食品工业<sup>[15]</sup>、化妆品和医药制造等领域<sup>[16-17]</sup>，流变学用于优化工艺和产品性能<sup>[18]</sup>。非牛顿流体力学研究不符合牛顿黏性定律的流体（如油漆、泥浆、血液）的流动特性<sup>[8,19-20]</sup>。

## 1.2 本构方程

### 1.2.1 线性本构方程

凝聚相物质分为固体或液体，固体和液体之间的一个区别特征是它们对施加的力的响应。固体在变形时储存能量，如果变形很小，则在消除力后会恢复到原来的形状。相比之下，液体则会通过耗散能量和调整其形状来抵抗外力<sup>[21-22]</sup>。这种区别可以通过两种经典的力学模型来描述：胡克固体（Hookean Solid）和牛顿流体（Newtonian Fluid）。胡克定律（Hooke's Law）可以来描述小变形下的弹性固体行为。胡克定律表明，固体的应力  $\sigma$  与应变  $\gamma$  成正比，如公式(1-1)所示。其中， $G$  为弹性模量，用于描述材料在弹性变形范围内抵抗外力的能力。它反映了材料的刚度，即材料在受力时发生变形的难易程度。弹性模量越大，材料越难变形；弹性模量越小，材料越容易变形。胡克固体是理想化的弹性固体模型，适用于描述金属、陶瓷等材料在小变形条件下的力学行为<sup>[8]</sup>。

$$\sigma = G\gamma \quad (1-1)$$

而对于液体，其对外力的响应则完全不同。液体无法储存能量以恢复形状，而是通过内部的粘性阻力来耗散能量，并持续流动以适应外力。这种行为可以用牛顿流体的本构方程来描述，即剪切应力与剪切速率成正比，如公式(1-2)所示。其中， $\eta$  为粘性系数，用于描述液体在运动过程中耗散能量的能力。粘性系数越大，液体越容易耗散能量，反之亦然。牛顿流体是理想化的粘性流体模型，适用于描述水、空气等液体在运动过程中耗散能量的行为<sup>[21]</sup>。

$$\sigma = \eta \dot{\gamma} \quad (1-2)$$

然而，这些特征都是理想化的，代表了特定条件的行为。许多凝聚相材料不容易归入这些经典类别，因为它们的机械性能取决于变形的大小、速率、变形历史，加载过程等等。例如，考虑牙膏，它像液体一样流动，可以将其从管中挤出，但一旦放在牙刷上，它就会像固体一样保持其形状。这类物质同时具有黏性和弹性，被认为是黏弹性材料，被称为软物质或者复杂流体<sup>[23]</sup>。

线性黏弹性理论认为在小变形范围（线性范围内）应力-应变关系是线性的，即应力与应变成正比。同时线性黏弹性区间内材料具有时间依赖性，材料的力学响应不仅取决于当前的应力或应变，还依赖于时间或加载历史。图1-1概述了两种不同类型的粘弹

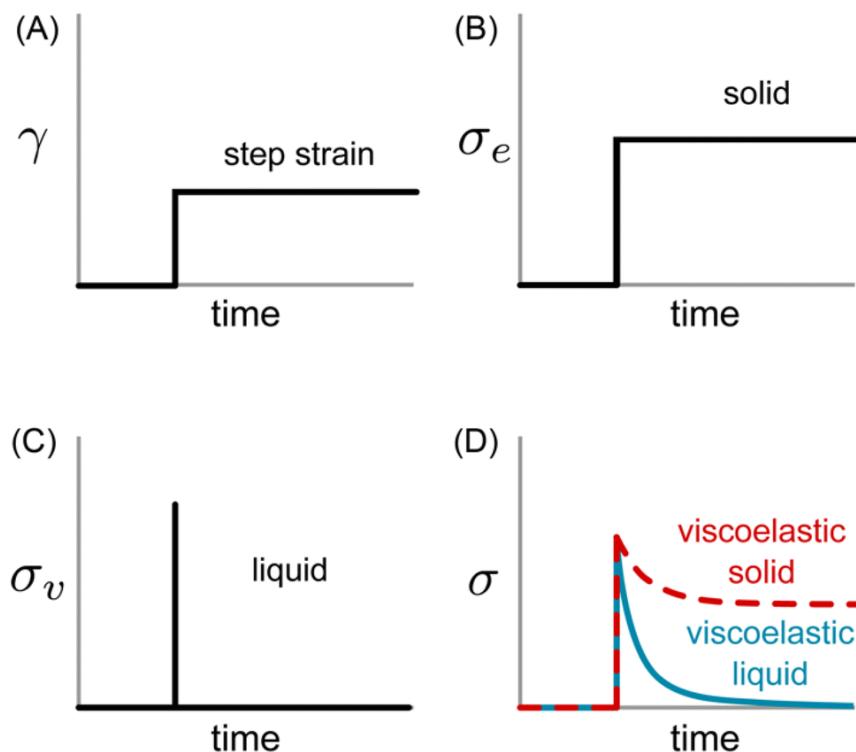


图 1-1 (A) 施加的应变曲线以及对应的剪切应力 (B) 理想弹性固体 (C) 理想粘性液体 (D) 粘弹性样品<sup>[21]</sup>

Figure 1-1 (A) Applied strain profile and resulting shear stress (B) Ideal elastic solid (C) Ideal viscous liquid (D) Viscoelastic samples<sup>[21]</sup>

性材料的简单剪切行为。对于粘弹性固体和液体，阶跃应变会引起瞬时弹性响应，从而产生  $\sigma$  峰值。然而，应力不是保持不变或立即降至零，而是逐渐降低。它在很长一段时

间内接近粘弹性固体的有限平台值，而粘弹性液体则完全衰减到零<sup>[21]</sup>。

线性本构理论中最经典的是 Maxwell 模型<sup>[24]</sup>，如图1-2所示，Maxwell 模型将材料的弹性行为和粘性行为结合起来，它用一个弹簧（弹性元件）和一个粘壶（粘性元件）串联表示黏弹性关系。Maxwell 模型的微分形式如公式(1-3)所示，其中  $\tau$  表示松弛时间，等于  $\eta/G$ 。将两边积分得到 Maxwell 模型的积分形式如公式(1-4)所示。

$$\frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\tau} = G \frac{d\gamma}{dt} \quad (1-3)$$

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t G e^{-\frac{t-t'}{\tau}} \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt' \quad (1-4)$$

积分形式的方程显示了任何时刻的应力是松弛模量乘以应变速率的积分。由于被积函数中的衰减指数，模型具有衰落的记忆，因此最近的应变历史比过去的应变历史更重要。如果将多个 Maxwell 模型并联，便可以得到广义 Maxwell 模型方程，如公式(1-5)所示。



图 1-2 Maxwell 模型示意图

Figure 1-2 Schematic illustration of Maxwell model

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t G(t-t') \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt' \quad (1-5)$$

其中松弛模量  $G(t)$  定义为公式(1-6)。

$$G(t) = \sum_{i=1}^n G_i e^{-\frac{t}{\tau_i}} \quad (1-6)$$

Maxwell 模型通过将黏弹性抽象为黏性元件和弹性元件串联来得到本构方程。如果将弹簧和粘壶进行并联，则得到 Kelvin-Voigt 模型的本构方程，即公式(1-7)<sup>[25]</sup>。

$$\sigma(t) = G\gamma(t) + \eta \frac{d\gamma(t)}{dt} \quad (1-7)$$

将多个 Kelvin-Voigt 模型的元件进行串联，便可以得到广义 Kelvin-Voigt 模型，如公式(1-8)。

$$\sigma(t) = \sum_{i=1}^n \left( G_i \gamma_i(t) + \eta_i \frac{d\gamma_i(t)}{dt} \right) \quad (1-8)$$

原则上，任何广义 Voigt 模型都可以在数值上映射到等效的广义 Maxwell 模型，这是线性本构方程构建的基本研究方法的不同角度<sup>[21]</sup>。

如果将传统的整数阶导数模型改为分数阶导数，能够更加准确描述材料的记忆效应。例如 Bagley 和 Torvik 等在 20 世纪 80 年代提出的分数阶 Maxwell 模型，是对传统 Maxwell 模型的推广<sup>[26]</sup>。无论是什么形式的线性本构方程，均满足一个基本假设：材料的响应是线性的，即多个应变历史的叠加效应等于各自效应的线性相加，当公式(1-5)中的松弛模量 G 表示为公式(1-6)时是 Maxwell 模型的形式，事实上当 G 为一个抽象的松弛函数时，公式(1-5)抽象为更一般的线性本构方程，被称为玻尔兹曼叠加原理（BSP），玻尔兹曼叠加原理广泛应用于描述线性黏弹性材料的行为，例如应力松弛、蠕变、动态力学响应等<sup>[27]</sup>。

## 1.2.2 非线性本构方程

线性本构方程只能用于描述只能描述简单的材料行为，例如弹性变形、小应变下的黏弹性行为<sup>[11,21,28]</sup>。适用于材料在小变形范围内的线性响应，而非线性本构方程可以用来描述更为复杂的行为例如塑性变形、硬化或软化、各向异性、大变形、剪切稀化、剪切增稠等行为。绝大部分高分子材料具有较复杂的非线性关系。Binham 认为当剪应力低于屈服应力时，屈服性流体表现为刚性固体；当剪应力超过屈服应力时，流体开始流动，且流动行为类似于牛顿流体<sup>[29]</sup>。Herschel-Bulkley 模型在此基础之上引入了剪切稀化和剪切增稠的表示，如公式(1-9)，Herschel-Bulkley 模型是描述非线性本构方程的一套公式<sup>[30]</sup>。

$$\sigma = \sigma_0 + K\dot{\gamma}^n \quad (1-9)$$

改进的 Herschel-Bulkley 类模型在 Herschel-Bulkley 模型的基础上，通过引入额外的参数或修正项，显著提升了对流体行为的描述精度。例如，在 Herschel-Bulkley 模型中引入高阶项（如剪切速率的二阶项），可以更准确地刻画非线性流变行为<sup>[31]</sup>。此外，通过引入 Papanastasiou 正则化方法，可以解决原始模型在低剪切速率下的数值不稳定性问题，这一改进模型被称为 Herschel-Bulkley-Papanastasiou (HBP) 模型。HBP 模型在磁流变液等复杂流体的流变特性描述中得到了广泛应用<sup>[32]</sup>。

Herschel-Bulkley 类模型不涉及弹性流体，主要用于解决屈服应力流体的本构问题。在非线性本构方程中，松弛模量函数不仅是时间的函数，也是应变的函数，能够表征大变形下的非线性响应。对于黏弹性流体的非线性本构方程而言，可以写出一般的通式，

如公式(1-10), 非线性黏弹性流体的本构方程主要通过积分和微分形式分别进行描述<sup>[3]</sup>。

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t G(t-t', \gamma) \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt' \quad (1-10)$$

微分形式的 Oldroyd-B 模型, 如公式(1-11)所示是在 Maxwell 模型的基础上作了修正, 增加了延迟时间项  $\lambda_2$ , 从而能够描述更复杂的流变行为, 同时这个模型引入了上随体导数来代替普通导数, 在物理上更加符合真实世界的材料行为<sup>[33]</sup>。Oldroyd-B 模型可以在 Weissenberg 数 ( $W_i = \lambda_1 \dot{\gamma}_i$ ) 较小的情况下描述线性黏弹性, 其中的上随体导数在一定程度上包含了部分非线性效应, 因此该模型也可以一定程度上描述非线性关系。Oldroyd-B 模型是非线性本构方程的经典基础模型, 研究者在此基础上为了更准确地描述非线性黏弹性行为, 提出来多种基于此模型的本构模型。

$$\boldsymbol{\sigma} + \lambda_1 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} = \eta \left( \dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{D\dot{\gamma}}{Dt} \right) \quad (1-11)$$

Giesekus 模型 (公式(1-12)) 在 Oldroyd-B 模型基础上, 增加了一个非线性项, 通过非线性系数  $\alpha$  来表示非线性行为<sup>[34]</sup>。Giesekus 模型常用于描述高聚物溶液、熔体以及其他粘弹性流体的流变行为。这些流体通常表现出剪切稀化和弹性效应。尤其是在中等至高剪切速率范围内。其模型参数 (如迁移因子  $\alpha$ ) 可以调节剪切稀化的强度和拐点形状, 具有较高的灵活性<sup>[35-36]</sup>。Giesekus 模型在高 Weissenberg 数 (Wi) 条件下仍能保持数值稳定性, 适用于强弹性效应的流动场景。通过引入对数构象重构等方法, 可以进一步提高其在高 Wi 条件下的计算稳定性<sup>[37]</sup>。

$$\boldsymbol{\sigma} + \lambda_1 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} + \alpha \frac{\lambda_1}{\eta} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \eta \left( \dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{D\dot{\gamma}}{Dt} \right) \quad (1-12)$$

PTT 模型 (公式(1-13)) 通过引入一个非线性应力函数  $f$  扩展了 Oldroyd-B 模型, 该函数通常取指数形式<sup>[38]</sup>。

$$f(\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})) \boldsymbol{\sigma} + \lambda_1 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} = \eta \left( \dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{D\dot{\gamma}}{Dt} \right) \quad (1-13)$$

FENE-P 模型 (公式(1-14)) 在 Oldroyd-B 模型的基础上引入了有限拉伸效应, 通过项  $\frac{\lambda_1}{\eta} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{1 - \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})/b}$  描述聚合物链的有限拉伸行为<sup>[39]</sup>。参数  $b$  表示聚合物链的最大拉伸比。该模型适用于描述聚合物溶液在强流动条件下的非线性行为。

$$\boldsymbol{\sigma} + \lambda_1 \frac{D\boldsymbol{\sigma}}{Dt} = \eta \left( \dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{D\dot{\gamma}}{Dt} \right) - \frac{\lambda_1}{\eta} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{1 - \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})/b} \quad (1-14)$$

通过将 Oldroyd-B 模型与分数阶导数结合, 可以得到分数阶 Oldroyd-B 模型, 如公

式(1-15)。分数阶 Oldroyd-B 模型通过引入分数阶导数描述非局部记忆效应<sup>[40]</sup>。参数  $\alpha$  和  $\beta$  是分数阶导数的阶数，该模型能够捕捉更复杂的流变行为，适用于具有非局部记忆效应的复杂流体。

$$\boldsymbol{\sigma} + \lambda_1^\alpha \frac{D^\alpha \boldsymbol{\sigma}}{Dt^\alpha} = \eta \left( \dot{\gamma} + \lambda_2^\beta \frac{D^\beta \dot{\gamma}}{Dt^\beta} \right) \quad (1-15)$$

另一类本构模型如 K-BKZ 模型源于积分型 Maxwell 模型（公式(1-4)<sup>[41-42]</sup>）。K-BKZ 模型的基本形式如公式(1-16)所示。在 K-BKZ 模型中， $h$  称为阻尼函数，它是形变张量的第一不变量  $I_1$  和第二不变量  $I_2$  的函数。 $\mathbf{C}^{-1}(t, t')$  是 Finger 形变张量的逆，用于描述从时间  $t'$  到  $t$  的形变历史。 $m(t - t')$  是瞬态函数或记忆函数，用于表征材料对历史形变的记忆效应。K-BKZ 模型广泛应用于聚合物加工（如挤出、注塑、热成型等）、生物流体力学（如血液、蛋白质悬浮液等复杂流体的流变行为研究）以及涂料和润滑剂的流动行为和流变特性分析<sup>[43]</sup>。

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t m(t - t') h(I_1, I_2) \mathbf{C}^{-1}(t, t') dt' \quad (1-16)$$

Doi 和 Edwards 尝试从分子角度构建本构方程，在管子模型的基础上提出了 Doi-Edwards 模型（公式(1-17)）。Doi-Edwards 模型的核心思想是将高分子链的缠结效应简化为一条光滑管道对链的限制作用，链在管道中的运动通过松弛和扩散来描述<sup>[44-47]</sup>。其中  $G_0$  表示松弛时间，而  $Q$  表示为公式(1-18)，反映了高分子链在形变历史下的方向分布变化，即链的取向如何随形变而变化。

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = G_0 \int_{-\infty}^t \frac{\partial Q(\mathbf{F}(t, t'))}{\partial t'} dt' \quad (1-17)$$

$$Q(\mathbf{F}(t, t')) = \frac{5}{2} \left\langle \frac{\mathbf{F}(t, t') \cdot \mathbf{u} \mathbf{u}}{|\mathbf{F}(t, t') \cdot \mathbf{u}|^2} \right\rangle_{\mathbf{u}} \quad (1-18)$$

传统的 Doi-Edwards 模型基于单链平均场近似，将缠结效应简化为一条光滑的“管子”对高分子链的限制作用。然而，这种简化忽略了链-链间的直接相互作用，难以解释快速大形变条件下的非线性流变现象（如应力过冲、缠结点破损和重组等）。近年来，研究者通过引入多链相互作用，提出了修正的管子模型，在此基础之上能够更好地描述缠结高分子流体的非线性行为<sup>[48-50]</sup>。

### 1.2.3 传统的本构方程的构建方法

传统本构方程尤其是 Oldroyd-B、Doi-Edwards 等复杂的非线性模型具有较多的待定参数，通过方程来描述材料的应力-应变关系及其对时间、温度和形变历史的依赖性。

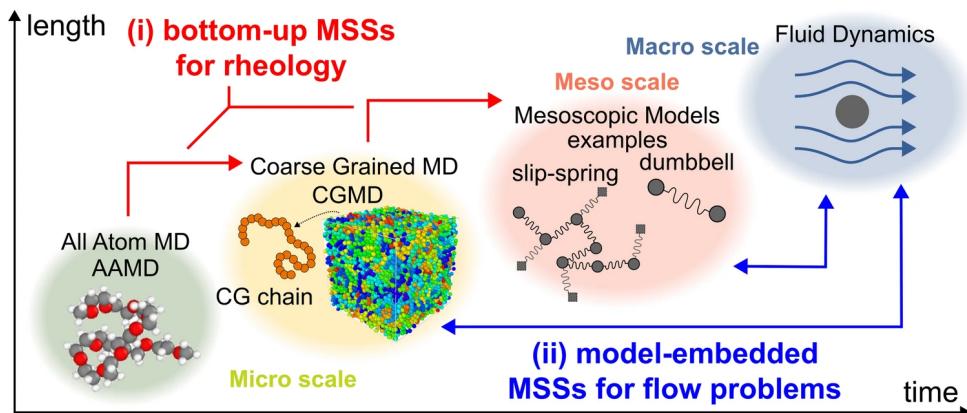
其构建方法是实验观测、理论推导和数值模拟的结合，具体可以分为以下几个步骤。

首先，实验观测是构建本构方程的基础。通过流变学实验（如剪切流变、拉伸流变等），研究者可以获取材料在不同形变条件下的应力响应数据。这些实验数据为理论模型的构建提供了关键依据。例如，通过动态力学分析（DMA）测量材料的储存模量和损耗模量，可以确定其粘弹性特性；通过应力松弛和蠕变实验，可以推断材料的记忆效应和时间依赖性。实验数据的精确性和全面性直接决定了本构方程的适用性和预测能力<sup>[51-52]</sup>。

其次，对于非线性材料，则需要引入更复杂的本构关系，这里主要还是基于线性黏弹性方程，通过各类引入非线性关系的方法来进行非线性关系推导，理论推导的关键在于如何将微观结构信息（如高分子链的缠结、颗粒的相互作用等）与宏观力学行为联系起来。而对于理论推导的结果，每一个非线性项或参数应当从数学角度进行证明<sup>[53]</sup>。近年来，数学研究者对 Doi-Edwards 模型的适定性进行了深入研究。Chupin 等人通过 Schauder 不动点定理和 Galerkin 近似方法，证明 Doi-Edwards 模型在二维情况下的全局解存在性和唯一性<sup>[49]</sup>。这一结果为模型的数学基础提供了严格的理论支持。

数值模拟在本构方程的构建和验证中发挥着关键作用。有限元分析（FEA）、有限差分法（FDM）和有限体积法（FVM）等数值方法能够将本构方程应用于复杂几何和边界条件下的力学问题，从而模拟材料的应力分布、形变行为和流动特性<sup>[51]</sup>。分子动力学模拟（MD）是另一种重要的数值工具，能够从分子尺度模拟材料的力学行为，为宏观本构方程的构建提供微观依据。例如，通过粗粒度分子动力学模拟（CGMD），研究者可以研究高分子链的缠结力学，验证管子模型的假设<sup>[54-55]</sup>。由于聚合物液体具有单体、中观和宏观流尺度的多尺度特征，因此关联不同层次的多尺度模拟（MSS）能够更准确地再现其流动特性<sup>[56]</sup>。近年来，基于分子动力学的多尺度模拟方法显著推进了复杂流体本构关系的构建。Webb 等人提出基于图论的系统粗粒化方法，通过拓扑约简实现分子结构特征的有效保留，为建立跨尺度本构方程提供了数学基础<sup>[57]</sup>。在此框架下，Behbahani 开发了原子模拟-粗粒化-滑移弹簧的分层耦合算法，成功预测了聚乙烯熔体的非线性粘弹性响应<sup>[58]</sup>。Morii 提出的拉格朗日多尺度框架实现了从分子涨落到连续介质流动的全域耦合，在高弹性数工况下展现出优于传统欧拉方法的数值稳定性<sup>[59]</sup>。

传统本构方程的研究方法主要依赖于物理实验和理论推导，通过建立数学方程来描述材料的力学行为。这种方法虽然具有明确的物理意义，但在处理复杂材料或非线性行为时，往往面临模型精度不足、参数识别困难等问题<sup>[60]</sup>。随着数据驱动技术的快速发展

图 1-3 多尺度模拟示意图<sup>[56]</sup>Figure 1-3 Schematic illustration of Multiscale Simulation<sup>[56]</sup>

展，机器学习为材料本构关系的研究提供了新的思路。通过利用大量实验或仿真数据，机器学习能够自动挖掘材料行为中的潜在规律，构建高精度的预测模型，从而弥补传统方法的不足，并为材料科学的研究开辟了更加智能化的路径。

## 1.3 数据驱动方法流变学本构建模

### 1.3.1 机器学习方法介绍

机器学习是人工智能的一个重要分支，其核心是通过算法从数据中自动学习规律，并利用这些规律进行预测或决策。与传统编程不同，机器学习不依赖于明确的规则，而是通过训练数据优化模型参数，从而实现对复杂问题的建模和解决。它在图像识别、自然语言处理、推荐系统等领域取得了显著成果<sup>[61]</sup>。

监督学习是最常见的机器学习类型，适用于有标签的数据集。常见的算法包括线性回归和逻辑回归，分别用于连续值的预测和二分类问题<sup>[62-63]</sup>。决策树（DT）通过树状结构进行决策，适用于分类和回归任务<sup>[64]</sup>。随机森林（RF）是多个决策树的集成，通过投票或平均提高预测准确性<sup>[65]</sup>。支持向量机（SVM）通过寻找最优超平面进行分类，适用于高维数据<sup>[66]</sup>。K 近邻算法（KNN）基于距离度量进行分类或回归，简单但计算量大<sup>[67]</sup>。

随着数据规模和计算能力的提升，深度学习作为机器学习的一个子领域迅速崛起。深度学习通过构建多层的神经网络结构，能够自动提取数据中的多层次特征，从而在处理高维、非线性问题（如图像、语音和文本）时表现出更强的能力，成为推动人工智能发展的核心技术之一<sup>[61]</sup>。

近年来，深度学习领域在理论创新与应用拓展方面取得了显著进展，极大地推动了机器学习技术的前沿发展。在生成模型领域，扩散模型通过模拟数据从噪声分布到目标分布的逆扩散过程，逐步生成高保真度的图像样本，在图像生成、风格迁移和图像修复等任务中展现出卓越的性能<sup>[68]</sup>。在多模态学习方面，研究者通过联合建模文本、图像、音频和视频等多种模态数据，实现了更全面的语义理解与跨模态生成。以模型为代表的多模态预训练框架，通过对比学习策略学习图像-文本对的联合表示空间，在零样本分类和跨模态检索任务中取得了突破性进展<sup>[69]</sup>。在自监督学习领域，研究者通过设计预训练任务从数据本身生成监督信号，显著降低了对人工标注数据的依赖<sup>[70]</sup>。对比学习作为自监督学习的核心范式之一，通过最大化正样本对的表示一致性并最小化负样本对的相似性，有效提升了模型的特征提取能力<sup>[71]</sup>。这些前沿进展不仅深化了深度学习理论体系，也为解决实际问题提供了新的方法论支持。未来，随着计算能力的提升和数据规模的扩大，深度学习技术有望在医疗影像分析、自动驾驶、智能内容创作等领域展现出更广泛的应用潜力。同时，模型的可解释性、鲁棒性和能效优化等方向仍面临重要挑战，需要跨学科合作以推动该领域的持续发展<sup>[61]</sup>。

### 1.3.2 机器学习流变学应用研究现状

#### 1.3.2.1 引言

传统机器学习或者是目前最前沿的深度学习研究，最初都集中于计算机科学、人工智能领域，但是近年来在物理学领域，机器学习与物理学问题的研究结合也日益密切<sup>[72]</sup>。在量子物理中，机器学习被用于量子态重构、量子电路优化和量子相变识别，显著提高了量子系统的分析和计算效率<sup>[73]</sup>。在凝聚态物理领域，机器学习通过预测材料性质和分类相图，加速了新材料的发现和设计<sup>[72]</sup>。在天体物理中，机器学习被用于引力波探测和宇宙微波背景辐射分析，揭示了宇宙的起源和结构<sup>[74]</sup>。在流体力学中，机器学习通过数据驱动的方法直接从流体数据中学习湍流动力学，显著提高了湍流模型的精度和计算效率<sup>[75]</sup>。此外，机器学习中的符号回归技术能够从实验数据中自动发现物理定律，为探索未知物理规律提供了新工具<sup>[76]</sup>，在多尺度物理系统中，机器学习被用于气候模拟和生物信息学建模，预测复杂动态和处理多重空间和时间尺度的混沌系统。

在流变学领域，机器学习也被广泛应用。传统的流变学研究方法如上一章所述，首先通过实验获取数据，再通过数学物理方程解释数据。流变学家总是期待于对每个流变学体系建立一个可表示的数学方程，尽管这个方程可能完全无法求出解析解也极难获取

稳定精确的数值解。这本质上是一个由因推果的过程，而数据驱动的机器学习方法则从真实的结果出发，构建一个完全匹配的数学方程，这个方程的形式与参数都不确定，但是可以泛化本构现象，即通过含有大量参数的非方程化的计算机模型代替具体形式的本构方程来解决流变学本构问题<sup>[77-79]</sup>。

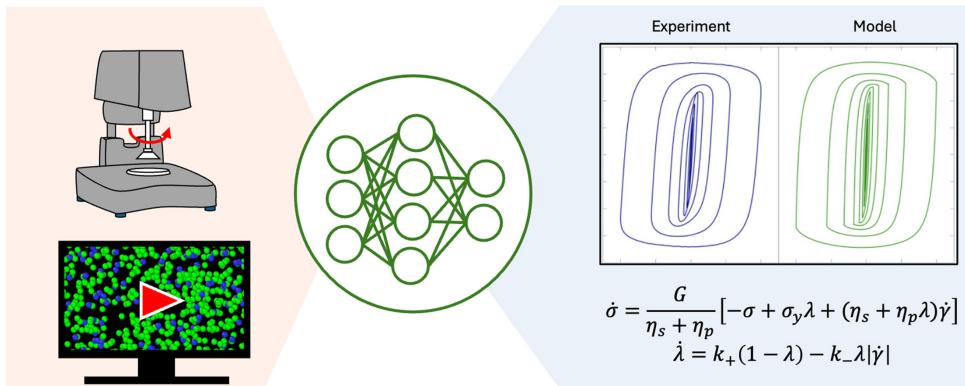


图 1-4 数据驱动方法应用于流变学研究示意图<sup>[79]</sup>

Figure 1-4 Schematic illustration of data-driven methods applied to rheology research<sup>[79]</sup>

### 1.3.2.2 流变特性预测

机器学习应用于流变学本构关系研究的其中一个应用是流变特性的预测。人工神经网络（ANN）已被用于自动监测合成油基泥浆的各种流变特性，使用泥浆密度和沼泽漏斗作为输入，预测值与实际测量值非常接近，平均绝对误差小于 9.66%<sup>[80]</sup>。混合机器学习模型结合了 ANN 和 SVM 准确预测了纳米基水基钻井液的流变性和过滤特性。四种不同的模型——多元线性回归（MLR）、SVM、回归决策树（CART）和 ANN 被一起使用，以根据溶液特性预测聚合物溶液的粘度，有助于提高石油采收率<sup>[81]</sup>。此外，机器学习模型可以与微流体或其他设备集成，用于复杂流体的原位粘度测量。例如，Mustafa 等设计了一种微流体传感设备，利用流固耦合和 ML 算法来测量复杂流体的粘度<sup>[82]</sup>。他们采用 SVM 和 KNN 算法，分别实现了 89.7% 和 98.9% 的平均准确率。Ponick 等利用卷积神经网络（CNN）通过立体相机图像预测 Bingham 流体的流变特性<sup>[83]</sup>。Chen 等人通过将群贡献（GC）方法与人工神经网络（ANN）相结合，以预测离子液体（IL）-水混合物的粘度<sup>[84]</sup>，取得比单一 ANN 结构更好的预测效果。Zhang 等人开发了一种深度半监督的基于即时学习的高斯过程回归（DSSJITGPR）用于门尼粘度估计<sup>[85]</sup>。它将即时学习、半监督学习和深度学习集成到一个统一的建模框架中。DSSJITGPR 的有效性和优越性已通过工业橡胶混炼过程的 Mooney 粘度预测结果得到验证。

### 1.3.2.3 材料表征和工艺设计优化

机器学习在流变学本构关系研究中的应用不仅限于材料表征和工艺设计/优化，还通过直接引入材料制备和表征中的各种参数作为特征，显著简化了传统本构方程中针对特定材料体系拟合不同参数的复杂性。与传统统计方法相比，机器学习算法能够更高效地对这些复杂关系进行建模，其中主成分分析和深度神经网络等技术在管理和减少材料表征中常见的高维数据方面发挥了重要作用，从而实现了更高效的分析和解释。这些方法已广泛应用于 3D 打印混凝土、纤维增强混凝土、聚合物纳米复合材料、生物墨水、食品材料和高分子科学等领域。Zhang 和 Shao 的研究进一步探讨了基于图像的机器学习技术在材料科学中的应用，以应对各种挑战和任务，由于这些方法的通用性和可转移性，它们同样适用于流变学表征<sup>[86]</sup>。机器学习模型还彻底改变了高通量表征，为数据分析、预测和优化提供了强大的工具。例如，Zhang 等人开发了一种自主高通量系统，采用支持向量机（SVM）、随机森林（RF）和极端梯度提升（XGB）分类器等监督式机器学习算法，快速表征水凝胶的流变特性，所有模型在水凝胶相分类中均表现出色<sup>[87]</sup>。Verheyen 等人则利用基于树的集成算法（如随机森林和梯度提升）将数据驱动建模与颗粒水凝胶基质系统的实验优化相结合，这些技术因其在处理分类或回归任务、非线性关系、高维数据和混合数据类型方面的灵活性而被选用<sup>[88]</sup>。Martineau 等人开发了一种基于高斯过程（GP）建模的管道，用于识别细菌嵌入的丝水凝胶的凝胶化状态，通过比较人类专家和机器学习引导算法的性能，发现两者结合最能加速发现过程<sup>[89]</sup>。此外，随机森林和多元线性回归（MLR）等技术已被用作回归工具，将从大振幅振荡剪切（LAOS）实验中获得的流变特性与人类感官感知（如涂抹性）相关联，从而改进化妆品行业的配方设计。Lee 等人的研究表明，由于流变测量和铺展性之间的非线性关系，随机森林模型的性能优于多元线性回归模型<sup>[90]</sup>。

### 1.3.2.4 流变学计算模拟

机器学习为流变学的计算模拟提供助力，计算平台已经成为流变学研究的重要支柱，广泛应用于从聚合物动力学到颗粒系统的详细模拟，为复杂流体在不同条件下的行为提供了深刻的物理见解。然而，这些技术的主要瓶颈在于模拟与实验条件相关的时间和长度尺度的能力。由于大规模模拟中的大部分计算资源消耗在重复的数学运算上，而这些运算可以通过数据驱动技术高效学习，因此将机器学习与模拟相结合能够显著提升效率和精度。例如，Lu 等人基于卷积神经网络的仿真模型在颗粒流模拟中实现了显著

的加速，同时保持了较高的精度<sup>[91]</sup>。高斯过程回归则被 Seryo 等人用于从微观聚合物模拟中推断本构关系，并将这些关系应用于宏观流动仿真，从而调整流体中的应力分布以反映微观动力学<sup>[92]</sup>。类似的方法还被应用于缠结良好的聚合物熔体，通过机器学习的本构关系优化模拟效果。此外，Bai 等人介绍了一种数据驱动的平滑粒子流体动力学方法，该方法利用实验数据提高了牛顿流体和非牛顿流体的建模精度，即使在数据集较小的情况下也能准确预测幂律流体的速度曲线，同时显著优化计算时间<sup>[93]</sup>。多尺度建模通过在不同尺度之间交换信息来捕捉材料的复杂行为，例如 Li 等人基于生成对抗网络的方法实现了从粗粒度到原子级别的结构回溯映射<sup>[94]</sup>。主动学习作为一种高效的机器学习范式，通过选择性地标记信息量最大的数据点，以最少的数据优化学习过程，例如在多尺度建模中，Zhao 等人基于高斯过程回归的主动学习策略将所需的模拟次数大幅减少，显著提高了研究复杂材料行为的效率<sup>[95]</sup>。这些技术的结合不仅提升了模拟的精度和效率，还为流变学研究提供了更强大的工具。

### 1.3.2.5 小结

无论其架构或算法如何设计，以数据为中心的机器学习模型严重依赖丰富的训练数据来确保预测的可靠性和准确性。此外，材料特性通常对成分和加工条件的细微变化表现出高度敏感性，这可能导致材料行为的显著变化。因此，数据收集过程必须足够全面和细致，以捕捉这种复杂性，从而确保以数据为中心的模型能够做出准确的预测。例如，对于具有整体 Herschel-Bulkley 类型行为的屈服应力流体，如果算法仅暴露在大变形率或小变形率下的数据中，它将无法对观察域之外的一般行为做出可靠预测<sup>[79,96-97]</sup>。更重要的是，这些模型完全依赖于数据相关性和统计规律，而忽略了基础科学理论的支持，例如黏弹性材料的时间依赖性和应变依赖性等关键物理特性。纯数据驱动方法往往忽视了这些物理细节，导致模型在实际应用中可能失效。因此，在开发算法时，我们应当引入物理约束，将黏弹性的时间依赖性等基本物理规律纳入模型框架，以弥补数据驱动方法的不足，从而提升模型的预测能力和泛化性能。

## 1.4 引入物理约束的神经网络研究

### 1.4.1 引言

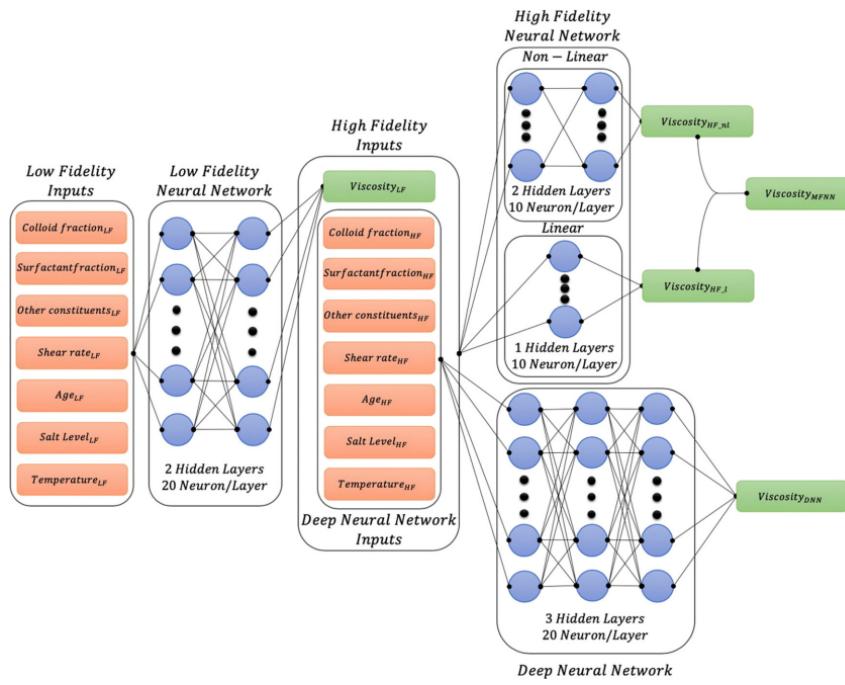
近年来，多种方法被提出并广泛应用于将基本物理规则和领域知识整合到机器学习框架中，这些方法在众多领域展现了深远的影响。这类模型的总体框架通常被称为物理

信息机器学习（PIML）。PIML 的一个开创性范例是“物理信息神经网络”（PINN），它代表了科学计算和应用数学领域的重大突破<sup>[98-99]</sup>。PINN 将机器学习算法与从系统观察、经验以及物理或数学理解中获得的先验知识无缝结合，通过将这些先验知识直接嵌入模型架构中，显著减少了对大规模训练数据集的依赖，从而能够利用更少的观测数据解决复杂的物理问题。

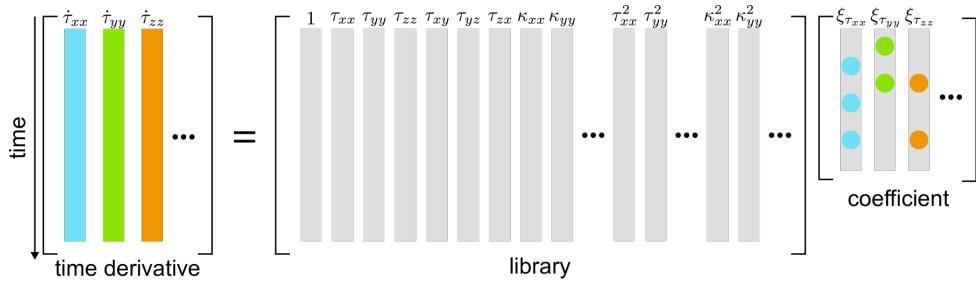
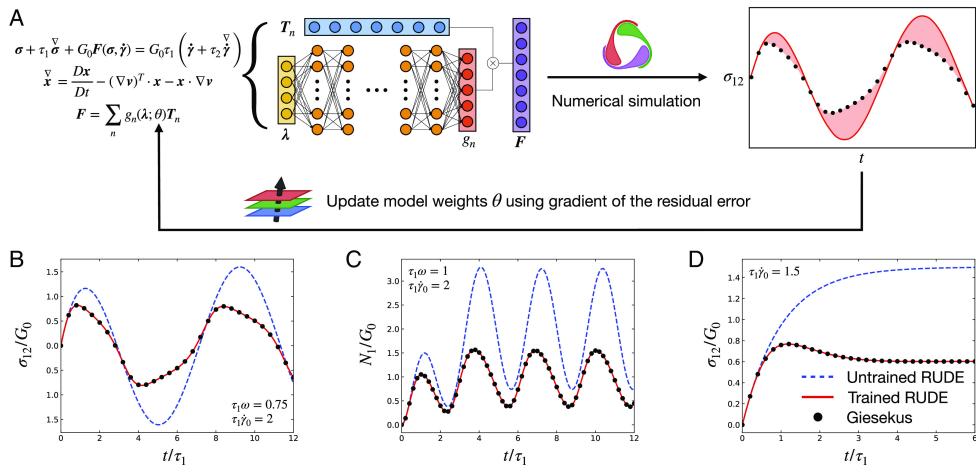
### 1.4.2 物理信息神经网络研究现状

近年来，物理信息神经网络（PINN）在流变学建模领域取得了重要进展，有效克服了传统方法依赖简化假设和难以处理复杂材料特性的局限。Mahmoudabadbozchelou 等人提出的流变学信息神经网络（RhINN）框架，能够处理触变性弹性粘塑性（TEVP）模型等多种本构模型<sup>[100]</sup>。该框架以时间  $t$  和剪切速率为输入，剪应力  $\sigma$  和结构参数  $\lambda$  为输出，通过最小化包含方程残差和初始条件差异的损失函数来训练网络参数。在逆问题求解中，RhINN 可同时学习网络参数和流变参数，其预测结果与真实数据高度吻合，展现了良好的鲁棒性。Dabiri 等人进一步将 RhINN 扩展至分数阶微分方程，提升了其在复杂本构模型参数识别中的应用价值<sup>[101]</sup>。在相关研究中，Zhang 等人开发的 RheologyNet 成功应用于胶凝材料触变特性评估，其预测结果与有限元分析高度一致<sup>[102]</sup>。Nagrani 等人则利用 PINN 研究了导热硅脂的流变行为，通过实验数据确定了流变参数<sup>[103]</sup>。基于物理的机器学习方法还可从间接观测中学习未知流变模型，例如通过三维流场数据推断广义牛顿流体的稳态剪切粘度，这一方法在聚合物熔体和颗粒悬浮液研究中取得了显著成果。此外，PINN 在稀薄气体流动预测中也展现出应用潜力<sup>[104]</sup>。Howard 等人将悬浮平衡模型与神经网络结合，成功预测了单分散悬浮液的颗粒应力，但在双分散系统中的应用仍存在局限。这些研究充分展示了物理信息神经网络在流变学领域的广泛应用前景<sup>[105]</sup>。

多保真度建模是一种强大的技术，通过整合来自不同保真度和计算成本的数据来增强模型预测能力。这种方法在物理定律不精确或高保真数据生成成本较高的情况下尤为有用。通过高效结合高保真和低保真数据，多保真度建模为复杂系统的精确建模提供了一种更高效且更具成本效益的解决方案。例如，Mahmoudabadbozchelou 等人利用多保真度方法构建了一个流变学元模型，用于预测复杂多组分系统的流变响应，同时考虑了老化、混合物的盐度和温度依赖性等输入参数<sup>[106]</sup>。在该框架中，低保真数据通过多种本构方程生成，而高保真数据则来自实验测量。与传统的高保真神经网络相比，这种组合方法显著提高了预测精度，充分展示了多保真度建模的优势。

图 1-5 多保真神经网络 (MFNN) 结构示意图<sup>[106]</sup>Figure 1-5 Schematic illustration of Multifidelity Neural Network (MFNN) structure<sup>[106]</sup>

类似的方法也被应用于预测纤维悬浮液的流变特性，其中基于法向载荷相关摩擦系数模型的数值模拟用于生成高保真数据，而低保真数据则通过不同的本构模型生成。纤维的物理特性，包括纵横比、纤维刚度、表面粗糙度以及体积分数，均被用作输入参数。这种将基础物理特性融入机器学习算法的模式并不局限于特定方法，因此多保真度建模也可以与直接或反向流变学信息神经网络（RhINN）相结合，以利用不同级别的数据准确性来优化模型预测。这种混合方法能够从有限的实验观察中做出高度准确的流变学预测，例如 Mahmoudabadbozchelou 等人对气相硅胶流变学的成功预测<sup>[107]</sup>。虽然多保真度算法通常依赖于不同准确性数据的可用性，但在上述应用中，这些数据是通过描述目标系统的物理或现象学模型直接生成的，因此这些方法被归类为物理信息建模。然而，如果不同保真度级别的数据源与基础物理学无关，则该方法更倾向于以数据为中心。例如，分层机器学习模型通过结合墨水和打印机参数之间的已知物理关系，能够在小数据集上实现精确建模。这种灵活性使得多保真度建模在流变学和其他复杂系统的研究中具有广泛的应用潜力。机器学习技术的另一个重要应用在于发现闭式本构关系，这些关系从数学上描述了应力和变形之间的关联。这一过程通常通过分析实验数据并结合非线性动力学稀疏识别（SINDy）和符号回归等技术来实现<sup>[108]</sup>。在这些方法中，通常采用多步骤流程：首先从广泛的潜在函数列表中筛选出最重要的候选函数，然后精确恢复

图 1-6 Rheo-SINDy 的示意图<sup>[108]</sup>Figure 1-6 Schematic illustration of Rheo-SINDy<sup>[108]</sup>图 1-7 (A) RUDE 训练循环示意图 (B-D) 基于 Giesekus 模型合成 LAOS 数据训练的 RUDE 评估结果, 黑色圆圈: 测试数据; 红色线条: 训练后的 RUDE; 蓝色线条: 未训练的 RUDE (B) 中间频率下的剪切应力响应 (C) 训练频率下的法向应力 (D) 稳态剪切流启动时的剪切应力响应<sup>[109]</sup>Figure 1-7 (A) Schematic depiction of a RUDE within the training loop (B-D) Evaluation of a RUDE trained on synthetic LAOS data for the Giesekus model, Black circles: test data; red lines: trained RUDE; blue lines: untrained RUDE (B) Shear stress response at an intermediate frequency (C) Normal stress at a training frequency (D) Shear stress during startup of steady shear flow<sup>[109]</sup>

这些函数的参数, 以最简洁的形式描述动力学系统。例如, SINDy 方法被直接扩展到流变学应用中, 开发了一种称为 Rheo-SINDy 的稀疏识别方法, 用于从已知方程库生成的流变学数据中恢复本构方程。然而, 现有方法在处理不完整、稀缺或噪声数据时面临挑战, 特别是需要数值微分来计算导数以构建控制方程<sup>[110]</sup>。这一问题可以通过结合自动微分功能的物理信息神经网络 (PINN) 来解决, 从而避免数值微分的需求。这种组合

方法被称为 PINN-SR（具有稀疏回归的 PINN），已成功应用于从模型弹性粘塑性流体的实验数据中提取精确的本构关系。

尽管目前大多数机器学习技术（无论是数据驱动还是物理信息）都集中在单个标量分量（如剪切应力、微观结构参数或粘度）作为流变学特征，并与粘度流动和体材料函数预测相关，但真正可推广的流变学机器学习技术必须具备张量性质，并避免客观性问题。Lennon 等人提出的 RUDE 框架优雅地解决了这些基本约束，构建了包含物理信息的可学习模型，同时对特定实验协议或流动运动学的细节保持不可知<sup>[109]</sup>。在该框架中，广义粘弹性模型中的未知非线性项被表示为张量基函数的线性组合，这些函数强制执行对称性和框架不变性等物理约束，而张量基函数的系数则通过神经网络输出建模。RUDE 框架的一个显著优势在于，其预测不仅能够推广到观测域之外，还可以扩展到应力张量的其他分量，从而实现完全解析的流动预测。这种能力使得 RUDE 在流变学应用中展现出强大的泛化能力和实用性。

### 1.4.3 其他物理信息深度学习模型

近年来，深度神经算子作为一种新的机器学习模型被提出，用于隐式学习物理现象的解算子<sup>[111]</sup>。与使用有限维向量空间的标准神经网络不同，神经算子学习函数空间之间的映射。典型的架构包括 DeepONet 和傅里叶神经算子（FNO）及其变体。DeepONet 由两个子网络组成：分支网络和中继网络，分别提取输入函数和输入坐标的潜在表示，并通过点积合并输出。FNO 通过在傅里叶空间中参数化积分核来实现高效的架构。神经算子可以作为隐藏控制方程的隐式解算子，使其成为理解复杂物理系统的强大工具。它们可以与物理场和其他域约束结合，以获得高保真解和良好的泛化能力。

神经算子在简洁且准确地学习复杂动力学方面表现出色，已在流体力学应用中得到验证，如天气预报和碳捕获的储层工程。然而，在复杂流体领域的应用仍有限。Rashid 等人采用 FNO 架构预测了数字复合材料中的应力和应变场<sup>[112]</sup>。FNO 的扩展，如隐式傅里叶神经算子（IFNO），已被证明可以预测不可见载荷条件下的材料响应，并且同样适用于流变学应用<sup>[113]</sup>。在 IFNO 中，层之间的增量由积分算子建模，因此所得架构可以解释为未知控制定律的定点方法。与传统的本构模型相比，这种方法将预测误差减少了十倍。Howard 等人还应用了模型算子回归（MOR-physics）框架，从单分散和双分散悬浮液中的体积分数和速度测量中学习粒子应力<sup>[105]</sup>。

## 1.5 本课题研究介绍

### 1.5.1 研究内容

本文旨在通过多方法融合的系统性研究，探索深度学习在模拟数据和实验数据下本构方程的建模与评估，文章主要结构如下，研究路线如图1-8所示。

第一章首先综述了流变学研究的基本问题和应用方向。其次讨论了本构方程理论的发展，经典本构方程的发展历史，数学形式，适用范围等。然后综述了本构方程的研究方法，包括传统的数值方法和近年来被广泛研究的数据驱动机器学习方法。最后综述了将物理约束引入机器学习方法的研究现状，并简述了本文后续的课题设计方案。

第二章主要介绍了本文课题中主要使用的各类算法，从算法理论到选型依据做了综述讨论。第三章介绍了本文的第一部分工作，使用门控循环单元（GRU）对经典本构方

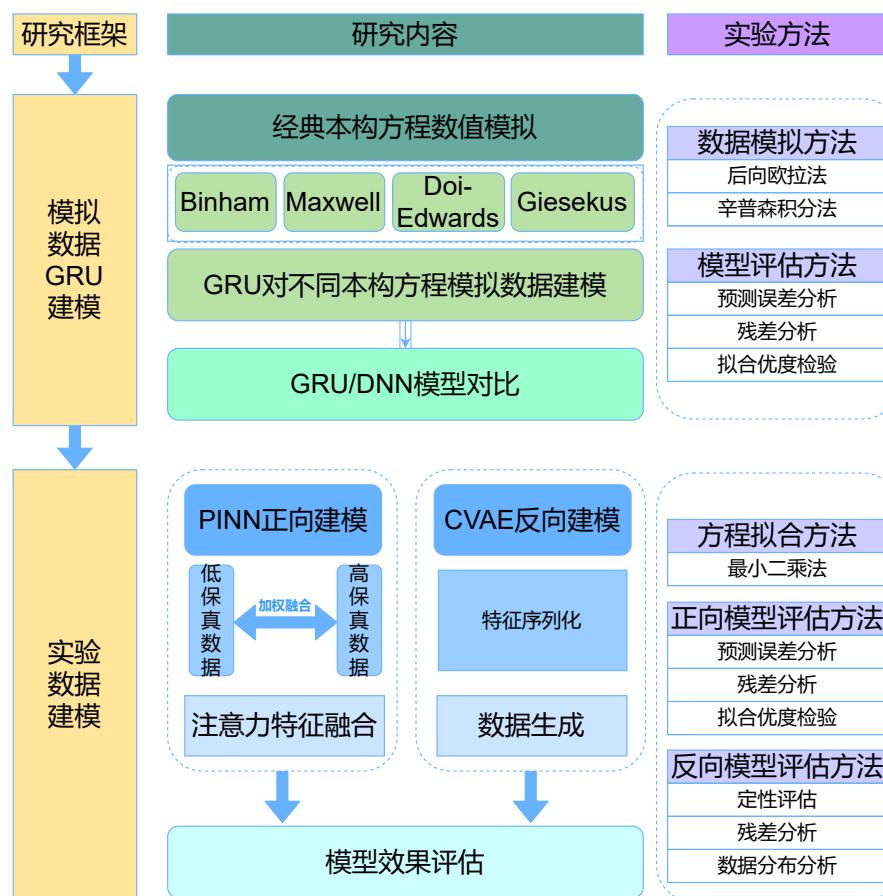


图 1-8 研究路线图

Figure 1-8 Research roadmap

程的模拟数据进行深度学习建模，并使用各种指标对模型性能进行评估。具体来说，首先基于经典本构方程（Binham 模型、Maxwell 模型、Doi-Edwards 模型、Giesekus 模型），

采用后向欧拉法和辛普森积分法等数值模拟方法生成模拟数据，并划分训练集、验证集、测试集。随后使用 GRU 分别对不同的模型模拟数据进行建模，训练后使用测试集进行模型的评估，采用决定系数 ( $R^2$ )、平均绝对误差 (MAE)、平均绝对百分比误差 (MAPE) 等指标，对模型性能进行定量评估。同时在相同的数据集上使用普通深度神经网络 (DNN) 进行训练，将两套模型进行比较，以验证 GRU 模型在处理复杂非线性时间依赖性流变学本构方程时的优势。

第四章介绍了本文的第二部分工作，针对黏弹性凝胶材料的真实实验流变数据进行物理信息神经网络 (PINN) 的建模，在 Mahmoudabadbozchelou 等人的模型基础之上，进一步优化 PINN 的模型，采用可学习的损失权重进行损失函数的优化，探究 PINN 对特定参数下凝胶材料模量及损耗因子的预测能力。随后，采用条件变分自编码器 (CVAE) 反向建立生成式模型，通过这个模型生成特定流变学数据下的制备参数，并进行生成效果评估。

### 1.5.2 研究创新点

- (1) 本文采用门控循环单元 (GRU)，通过其门控机制捕捉时间序列数据中的时间依赖性，使模型更贴近复杂流体的物理特性。
- (2) 优化 Mahmoudabadbozchelou 提出的物理信息神经网络 (PINN)，引入可学习的权重损失以缓解多损失函数的梯度消失问题，并结合注意力特征融合解决实验数据稀疏问题。
- (3) 使用 CVAE 反向建模，以流变学特性反预测制备参数，辅助实验设计。

### 1.5.3 研究意义

传统机器学习方法在流变学建模中往往局限于单点预测，难以捕捉复杂流体的时间依赖性，而本文采用门控循环单元 (GRU) 进行建模，充分利用其时间序列处理能力，使模型更贴近黏弹性材料的流变学特性。这一研究不仅拓展了深度学习在流变学领域的应用范围，还为复杂流体建模提供了新的理论支持。随着计算机科学的发展，自注意力机制（如 Transformer）在自然语言处理等领域展现了强大的长程依赖捕捉能力。尽管受限于流变学数据的稀缺性，本文未直接采用 Transformer 架构，但通过探索能够解决长期序列依赖的模型，为未来本构方程建模的研究指明了方向。这一思路有望进一步推动流变学本构建模的发展，为解决复杂流体建模问题提供更强大的工具。

本文通过优化物理信息神经网络 (PINN)，引入可学习权重和注意力特征融合，为

小样本学习提供了新的解决方案，提升了模型在数据稀缺情况下的性能。同时，利用条件变分自编码器（CVAE）进行反向建模，以流变学特性反推制备参数，为实验设计提供了理论支持。这些研究不仅推动了流变学建模方法的进步，还为材料科学和工程领域的实验优化提供了新的思路，具有一定的理论意义和实践价值。

## 第二章 流变学时间域本构方程的 GRU 建模研究

### 2.1 引言

近年来，深度学习在流变学本构建模研究中得到广泛应用。例如 Lennon、Mahmoudabadbozchelou 等人的研究工作，虽然具体方法各有不同，但在模型选择上基本都采用了普通多层感知机模型（MLP）<sup>[106,109]</sup>。MLP 是一种经典的前馈人工神经网络，由输入层、多个隐藏层（ $\geq 1$ ）及输出层的全连接层堆叠而成，通过非线性激活函数实现复杂函数逼近。当 MLP 的隐藏层数达到一定值时，它被视为深度神经网络（DNN）。传统的前馈性质 DNN 模型虽具备一定的非线性行为捕捉能力，但在处理具有时间依赖性的数据时，其性能往往受到限制。Lennon 和 Mahmoudabadbozchelou 的工作使用 DNN 模型，难以有效捕捉黏弹性材料中的长程应变历史依赖性。本章研究在前人基础上，采用门控循环单元（GRU）进行本构建模，旨在解决 DNN 模型在处理时间序列数据时性能受限的问题。GRU 的门控机制能够在处理流变学数据（如应力应变数据）时，有效控制历史信息在网络中的流动。

本章研究首先通过数值模拟方法构建了多种经典本构方程的应力应变数据，包括 Herschel-Bulkley 模型、Maxwell 模型和 Doi-Edwards 模型。这些模型在流变学领域具有重要的理论和应用价值，能够描述不同类型的流变行为。随后，本章详细设计了 GRU 模型的结构、参数初始化及训练优化策略，并使用数值模拟生成的应力应变数据进行训练和参数优化，使模型能够准确拟合训练数据。为了验证 GRU 模型在探索未知流变学本构方程方面的能力，本章将训练好的 GRU 模型应用于未经训练的测试集数据，并通过与经典 DNN 模型的对比，验证了 GRU 模型在处理时间序列数据方面的优势。

### 2.2 算法介绍

#### 2.2.1 时间序列数据介绍

时间序列数据是指在一系列时间点上按时间顺序排列的数据点集合。这些数据点通常是连续或定期记录的，反映了某个变量随时间的变化情况。在流变学研究中，时间域的应力应变数据在小应变时满足玻尔兹曼叠加原理，即当前应力状态为之前所有应变历史的线性和<sup>[27]</sup>。大应变时应力应变数据虽然不满足玻尔兹曼的线性叠加，但是依旧可以表示为过去应变历史的非线性关系叠加。

## 2.2.2 循环神经网络

### 2.2.2.1 简单 RNN

循环神经网络（RNN）是一种专门处理序列数据的神经网络结构，其核心在于利用循环结构捕捉时间或顺序上的依赖关系<sup>[114]</sup>。RNN 的基本结构由输入层、隐藏层和输出层组成（图2-1（a））。隐藏层中的神经元不仅接收来自输入层的信号，还接收来自前一时刻隐藏层的信号。这种循环连接使得 RNN 能够捕获序列中的时间依赖关系。RNN 的数学模型可以通过公式(2-1)描述：

$$\mathbf{h}_t = \sigma(\mathbf{W}_{xh}\mathbf{x}_t + \mathbf{W}_{hh}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_h) \quad (2-1)$$

$$\mathbf{o}_t = \mathbf{W}_{ho}\mathbf{h}_t + \mathbf{b}_o \quad (2-2)$$

其中  $\mathbf{h}_t$  是时刻  $t$  的隐藏状态， $\mathbf{x}_t$  是时刻  $t$  的输入， $\mathbf{o}_t$  是时刻  $t$  的输出， $\mathbf{W}_{xh}$  是输入到隐藏层的权重矩阵， $\mathbf{W}_{hh}$  是隐藏层到隐藏层的权重矩阵， $\mathbf{W}_{ho}$  是隐藏层到输出层的权重矩阵， $\mathbf{b}_h$  和  $\mathbf{b}_o$  是偏置。 $\sigma$  是激活函数，通常使用 tanh 或 ReLU。RNN 的训练过程通常使用反向传播算法。通过计算梯度来更新权重矩阵，从而最小化损失函数。

在简单的 RNN 中，存在梯度消失问题，这主要源于反向传播过程中梯度的连乘效应<sup>[115]</sup>。损失函数  $L$  对  $\mathbf{W}_{hh}$  的梯度可以表示为公式(2-3)：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{hh}} = \sum_{t=1}^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{W}_{hh}} \quad (2-3)$$

展开后，隐藏状态关于  $\mathbf{W}_{hh}$  的导数为公式(2-4)：

$$\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{W}_{hh}} = \sigma'(\mathbf{W}_{hh}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{W}_{xh}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_h) \cdot \mathbf{h}_{t-1}^T \quad (2-4)$$

注意到， $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t}$  依赖于前一个时间步的梯度，如公式(2-5)：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_{t+1}} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}_{t+1}}{\partial \mathbf{h}_t} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_{t+1}} \cdot \mathbf{W}_{hh} \cdot \sigma'(\mathbf{h}_t) \quad (2-5)$$

这表明梯度在通过时间反向传播时会乘以  $\mathbf{W}_{hh}$ 。从时间  $t$  到时间  $T$  的梯度可以表示为公式(2-6)：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} = \left( \prod_{k=t+1}^T \mathbf{W}_{hh} \cdot \sigma'(\mathbf{h}_{k-1}) \right) \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_T} \quad (2-6)$$

其中乘积  $\prod_{k=t+1}^T \mathbf{W}_{hh} \cdot \sigma'(\mathbf{h}_{k-1})$  在某些情况下可能会非常小，例如如果  $\mathbf{W}_{hh}$  的特征值

小于 1，那么随着  $(T - t)$  的增加， $\mathbf{W}_{hh}^{T-t}$  将呈指数级减小并趋近于零。如果反向传播过程中每一项都小于 1，那么整个乘积将随着  $(T - t)$  的增加呈指数级减小。这意味着对于远离输出端的时间步  $t$ ，梯度  $\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t}$  将非常小，导致权重更新几乎停止，这就是 RNN 的梯度消失问题。由于 RNN 为了捕捉时间依赖性，我们不可避免地设置长时间步，这导致 RNN 梯度消失问题几乎难以避免。

### 2.2.2.2 GRU

为了解决简单 RNN 的梯度消失问题，Schmidhuber 等提出了长短期记忆网络（LSTM）<sup>[115]</sup>。LSTM 通过引入门控机制来控制信息的流动，从而有效地缓解梯度消失问题。LSTM 的核心结构包括输入门、遗忘门和输出门，这些门控机制能够有效地控制信息的流动，从而捕获长期依赖关系。

LSTM 虽然通过引入门控机制有效地解决了简单 RNN 中的梯度消失问题，但在实际应用中仍然存在一些问题。LSTM 包含三个门（输入门、遗忘门、输出门），导致其参数数量较多，增加了模型的复杂度和计算成本。由于 LSTM 的复杂结构，其训练和推理速度相对较慢，尤其是在处理大规模数据时。为了解决 LSTM 的上述问题，Cho 等提出了 GRU（门控循环单元）作为 LSTM 的简化版本<sup>[116]</sup>（图2-1（b））。GRU 的设计初衷是为了简化 LSTM 的结构，同时保持其捕获长期依赖关系的能力。GRU 只有重置门（Reset Gate）和更新门（Update Gate）两种门控单元，与 LSTM 相比，GRU 的参数数量较少，训练和推理速度更快。重置门的计算公式为公式(2-7)。

$$\mathbf{r}_t = \sigma(\mathbf{W}_r \mathbf{x}_t + \mathbf{U}_r \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_r) \quad (2-7)$$

更新门的计算公式为公式(2-8)，重置门决定了前一时间步的隐藏状态在多大程度上被忽略。当重置门的输出接近 0 时，网络倾向于“忘记”前一时间步的信息，仅依赖于当前输入；而当输出接近 1 时，前一时间步的信息将被更多地保留。更新门决定了多少过去的信息将被保留，而新信息将占据多少比例。当更新门的输出接近 1 时，新的隐藏状态几乎等同于旧的隐藏状态，从而实现了长期依赖的捕捉；当更新门的输出接近 0 时，新的隐藏状态将主要由当前输入决定。

$$\mathbf{z}_t = \sigma(\mathbf{W}_z \mathbf{x}_t + \mathbf{U}_z \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_z) \quad (2-8)$$

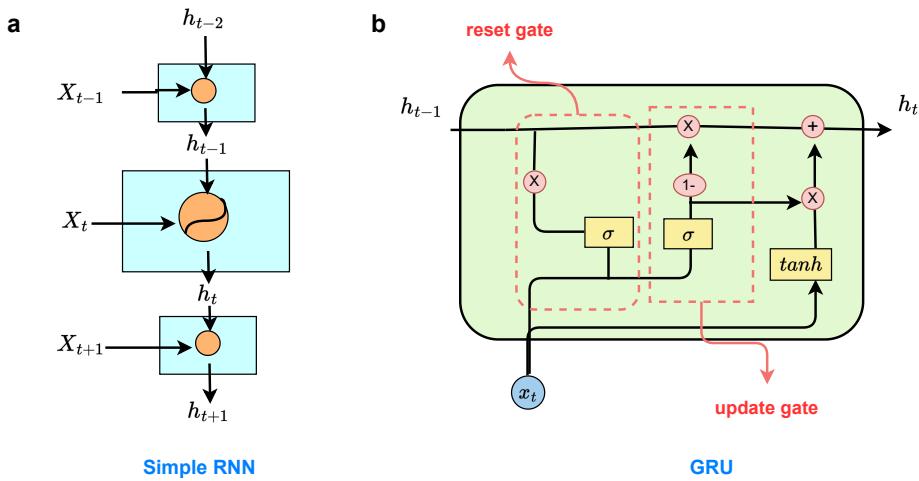


图 2-1 (a) RNN 示意图; (b) GRU 示意图

Figure 2-1 Schematic illustration of (a) RNN and (b) GRU

候选隐藏状态决定了当前时间步的新信息，如公式(2-9)所示。

$$\tilde{\mathbf{h}}_t = \tanh(\mathbf{W}_h \mathbf{x}_t + \mathbf{U}_h (\mathbf{r}_t \odot \mathbf{h}_{t-1}) + \mathbf{b}_h) \quad (2-9)$$

当前隐藏状态如公式(2-10)所示，这里的当前隐藏状态与上文 LSTM 的隐藏状态含义是一样的。

$$\mathbf{h}_t = (1 - \mathbf{z}_t) \odot \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{z}_t \odot \tilde{\mathbf{h}}_t \quad (2-10)$$

GRU 移除了单元状态的概念，直接从门控单元来计算隐藏状态，GRU 通过重置门和更新门的协同工作，实现了对信息流动的有效控制，使得网络能够在需要时记住长期依赖关系，同时减少梯度消失/爆炸的问题。GRU 的结构比 LSTM 更简单，计算效率更高，因此在实践应用中广受欢迎。本章使用 GRU 模型进行流变学本构方程的预测建模。

## 2.3 实验设计

### 2.3.1 数据获取

#### 2.3.1.1 Herschel-Bulkley 模型模拟数据

Herschel-Bulkley 模型的本构方程如公式(1-9)所示，其中剪切应力  $\sigma$  与剪切率  $\dot{\gamma}$  之间存在函数关系。该模型包含流变参数  $K$ 、流动指数  $n$  及屈服应力  $\sigma_0$ 。在模拟过程中，

本章设置  $\sigma_0$  为 1.0 Pa,  $K$  为 1, 而  $n$  则取值为 0.2、0.6、1.0、1.4 及 1.8。剪切率  $\dot{\gamma}$  范围设定为 [0,100], 并以 0.01 的时间步长进行离散采样。

数据生成后, 本章首先采用 Matplotlib 库绘制出剪切应力  $\sigma$  与剪切率  $\dot{\gamma}$  的关系曲线, 观察模拟效果, 并进行生成效果评估。随后本章采用 Numpy 库进行数据处理, 使用 Pandas 库将数据存储为 Excel 文件, 便于后续的模型训练。

### 2.3.1.2 Maxwell 模型模拟数据

Maxwell 模型的微分本构方程如公式(1-3)所示。该模型包含松弛时间  $\tau = \eta/G$ , 其中  $\eta$  表示黏性系数,  $G$  为剪切模量。本章设置  $\eta$  为 0.1 Pa · s,  $G$  为 1.0 Pa。采用后向欧拉法来离散化微分方程, 具体推导如下:

首先将微分离散化, 设  $d\sigma = \sigma_i - \sigma_{i-1}$ ,  $dt = \Delta t$ ,  $d\gamma = \gamma_i - \gamma_{i-1}$ , 则原方程可以化简为公式(2-11),

$$\frac{\sigma_i - \sigma_{i-1}}{\Delta t} + \frac{\sigma_i}{\tau} = G \frac{\gamma_i - \gamma_{i-1}}{\Delta t} \quad (2-11)$$

移项并化简可得公式(2-12)。

$$\sigma_i = \frac{\sigma_{i-1} + G(\gamma_i - \gamma_{i-1})}{1 + \frac{\Delta t}{\tau}} \quad (2-12)$$

根据公式(2-12), 本章首先使用 NumPy 库生成 6 个不同应变变化协议的应变数据, 时间步为 0.01 s, 每个协议模拟 2000 个数据点, 并存为 NumPy 数组, 随后通过迭代法计算单个应变数据对应的应力数据, 并存为 NumPy 数组。之后, 本章使用 Matplotlib 库绘制出剪切应力与剪切应变的关系曲线, 观察模拟效果, 并进行生成效果评估。最后本章使用 Pandas 库将数据存储为 Excel 文件, 便于后续的模型训练。

### 2.3.1.3 Doi-Edwards 模型模拟数据

Doi-Edwards 模型的本构方程如公式(1-17)所示。该方程为积分形式的本构方程, 本章首先对该方程进行处理, 将取向张量函数  $\underline{Q}(t', t)$  写为球坐标形式, 即公式(2-13)。

$$Q(t', t) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi 5 \left( \frac{\underline{u}' \cdot \underline{F}^{-1} \underline{u}' \cdot \underline{F}^{-1}}{|\underline{u}' \cdot \underline{F}^{-1}|^2} \right) \sin \theta d\theta d\phi \quad (2-13)$$

$$G(t, t') = \frac{G_0}{\lambda_i} \exp \left( \frac{t' - t}{\lambda_i} \right) \quad (2-14)$$

$$\sigma(t) = \int_{t_0}^t G(t, t') \cdot Q(\gamma(t')) dt' \quad (2-15)$$

本章模拟的为简单剪切流动，只在  $xy$  方向存在应变，因此可以将逆变形梯度张量  $\underline{\underline{F}}^{-1}$  写为公式(2-16)的矩阵形式， $\underline{\underline{u}'}$  为球坐标系下的单位向量。

$$\underline{\underline{F}}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \gamma & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2-16)$$

公式(2-14)为松弛模量函数，本章使用 Numpy 库生成 7 个不同的应变协议的 NumPy 数组，单个协议时间区间为  $[0, 4\pi]$ ，总数据点为 2000 个，生成形式为  $3*3$  的张量矩阵，代入公式(2-13)计算  $Q$  值数组。设置  $G_0$  为 1.0 Pa， $\lambda$  为 1.0 s， $i = 1$ ，根据公式(2-15)计算应变张量，使用的积分工具为 Python 的 `scipy.integrate` 库，生成形式为  $3*3$  的张量矩阵，如公式(2-17)所示。本章提取  $\sigma_{12}$ 、 $\sigma_{11}$ 、 $\sigma_{22}$  分量作为模拟实验数据，与对应的应变分量数据一起通过 Pandas 库存入 Excel 文件，便于后续的模型训练。

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (2-17)$$

## 2.3.2 模型训练

### 2.3.2.1 数据集划分

首先本章对模拟生成的数据进行数据集划分，将数据集分为训练集（Train）、验证集（Valid）和测试集（Test），不同模型的具体划分如下：

Herschel-Bulkley 模型数据单独划分  $n = 1.0$  的数据为测试集，其余数据按照 9:1 比例划分为训练集和验证集。

Maxwell 模型数据单独划分 4 个交变应变协议为训练集和验证集，其中按照 9:1 比例划分为训练集和验证集。划分 1 个交变应变协议，1 个线性应变协议为测试集。

Doi-Edwards 模型数据单独划分 5 个交变应变协议为训练集和验证集，其中按照 9:1 比例划分为训练集和验证集。划分 1 个交变应变协议，1 个线性应变协议为测试集。

### 2.3.2.2 损失函数构建

本章构建的损失函数主要包括均方误差（MSE）损失和  $L_2$  正则化损失两部分。均方误差损失用于衡量模型预测值与真实值之间的差异， $L_2$  正则化损失则用于防止模型过拟合。

均方误差损失函数的数学表达式如公式(2-18)所示：

$$\mathcal{L}_{\text{MSE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2-18)$$

其中， $y_i$  表示第  $i$  个样本的真实值， $\hat{y}_i$  表示模型对第  $i$  个样本的预测值， $n$  表示样本总数。MSE 损失函数对误差进行平方处理，使得较大的误差在优化过程中受到更多关注，有利于模型快速收敛到最优解。

L2 正则化损失函数的数学表达式如公式(2-19)所示：

$$\mathcal{L}_{\text{L}_2} = \lambda \sum_{j=1}^m \theta_j^2 \quad (2-19)$$

其中， $\theta_j$  表示模型的第  $j$  个参数， $m$  表示模型参数总数， $\lambda$  为正则化系数，用于控制正则化强度。L<sub>2</sub> 正则化通过惩罚较大的参数值，促使模型学习更加平滑的函数，从而提高模型的泛化能力。

综合以上两部分，本章采用的总损失函数如公式(2-20)所示：

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \mathcal{L}_{\text{MSE}} + \mathcal{L}_{\text{L}_2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^m \theta_j^2 \quad (2-20)$$

### 2.3.2.3 训练细节

本章的模型训练流程相同。首先对数据集进行划分，接着对训练集和验证集的数据实施归一化处理，随后将其转换为 Torch 张量。利用 Pytorch 框架编写模型代码，开展深度学习训练。在训练期间，采用 Adam 优化算法，以 MSE 损失函数为评估标准，借助网格搜索算法和随机搜索算法实现超参数的优化与选择。待训练结束后，把模型参数存储为.pth 文件，方便后续进行模型测试。

## 2.3.3 模型测试

### 2.3.3.1 测试指标细节

本章的模型训练均为回归问题，所以采用的测试指标为决定系数 ( $R^2$ )，如公式(2-21)所示，平均绝对误差 (MAE)，如公式(2-22)所示，平均百分比误差 (MAPE)，如公式(2-23)所示。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2-21)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (2-22)$$

$$\text{MAPE} = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (2-23)$$

此外，加上训练时间（Training Time）作为训练成本指标。

### 2.3.3.2 测试实验划分

Herschel-Bulkley 模型使用训练后保存的模型参数，使用测试集时间进行预测，训练数据与测试数据为不同的流动指数  $n$ ，采用已知流动指数数据预测未知流动指数数据，预测物理量为剪切应力。按照上述实验步骤分别使用 DNN 和 GRU 两种模型进行测试，绘制两个模型的测试比对曲线。

Maxwell 模型训练数据为交变应变数据，其应变关系符合公式(2-24)，测试数据分为交变应变数据和公式(2-25)所示的稳态应变数据。采用已知交变协议数据预测未知交变协议数据，已知交变协议数据预测未知稳态协议数据，预测物理量为剪切应力。按照上述实验步骤分别使用 DNN 和 GRU 两种模型进行测试，绘制两个模型的测试比对曲线。对于 GRU 模型，设置不同的序列时间步进行训练，探究模型的最佳时间步。

$$\gamma = \gamma_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (2-24)$$

$$\gamma = \dot{\gamma}t \quad (2-25)$$

Doi-Edwards 模型与 Maxwell 模型的实验流程一致，采用已知交变协议数据预测未知交变协议数据，已知交变协议数据预测未知线性协议数据，预测物理量为 xy 方向剪切应力 ( $\sigma_{12}$ ) 和第一法向应力差 ( $N_1$ )。第一法向应力差的公式为  $N_1 = \sigma_{11} - \sigma_{12}$ ，表示模拟流体的弹性行为。按照上述实验步骤分别使用 DNN 和 GRU 两种模型进行测试，绘制两个模型的测试比对曲线。对于 GRU 模型，设置不同的序列时间步进行训练，探究模型的最佳时间步。

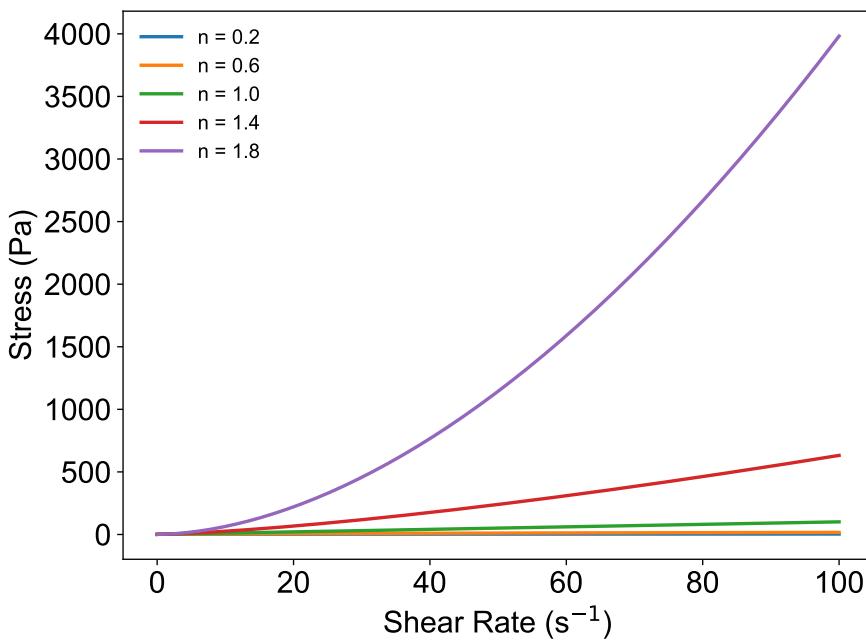


图 2-2 Herschel-Bulkley 模型模拟数据应力-应变率曲线图,  $n$  为流变指数

Figure 2-2 Stress-strain rate curve of simulated data for the Herschel-Bulkley model, where  $n$  represents the flow index

## 2.4 结果与讨论

### 2.4.1 Herschel-Bulkley 模型建模

#### 2.4.1.1 数值模拟数据

本节使用 Herschel-Bulkley 模型模拟数据, 模拟结果如图2-2所示。由图2-2可以看到, 模拟数据中剪切应力 (Stress) 与剪切速率 (Shear Rate) 呈现幂函数关系, 随着流变指数  $n$  的增加, 曲线的斜率增大, 表明流体的非牛顿特性增强。这一现象与 Herschel-Bulkley 模型的数学形式相符, 说明模拟数据符合预期。

#### 2.4.1.2 GRU/DNN 模型预测效果对比

本节分别使用 GRU 和 DNN 两种算法对 Herschel-Bulkley 模型模拟数据进行深度学习建模, 之后使用预测模型在测试集上进行验证, 测试结果如图2-3所示。图2-3 (a) 为两种算法测试的真实值-预测值曲线, 从曲线可以定性看出两种算法的预测值曲线与真实值曲线都非常接近。图2-3 (b) 为两种算法测试结果的残差图, 可以看出两种算法的

残差点离散程度接近，均没有明显趋向性，均呈现无序分布，说明两种算法均可以比较好地捕捉到所有的输入特征。图2-3（c-f）分别比较了两种算法预测结果的  $R^2$ , MAE, MAPE 指标，从结果中可以看出，两种算法的预测效果都十分良好， $R^2$  都接近 1，GRU 预测结果的  $R^2$  值略高于 DNN，GRU 预测结果的 MAE 和 MAPE 值都小于 DNN，但数值差距不大。GRU 算法的平均训练时间为 378 s，高于 DNN 的 155 s 一倍以上，这是由于 GRU 网络的参数量更大，且由于其循环神经网络的特点，只能顺序运算，限制了 GPU 的并行计算能力，导致训练时间较长。

综合看来 GRU 和 DNN 两种算法在 Herschel-Bulkley 模型模拟数据上的预测表现比较接近，从预测指标的绝对数值看，GRU 略优于 DNN。这个结果符合预期，因为 Herschel-Bulkley 模型本质上是模拟了剪切稀化增稠过程，不涉及黏弹性材料的时间依赖性，并且我们模拟的过程中，对于某个特定时间的应力状态也仅仅是当前应变状态的函数。从训练时间的分析看，GRU 的训练成本远高于 DNN。综合而言对于本构方程类似于 Herschel-Bulkley 模型的流体，GRU 算法虽然在泛化效果上略有优势，但是综合性能上不具备显著优势。

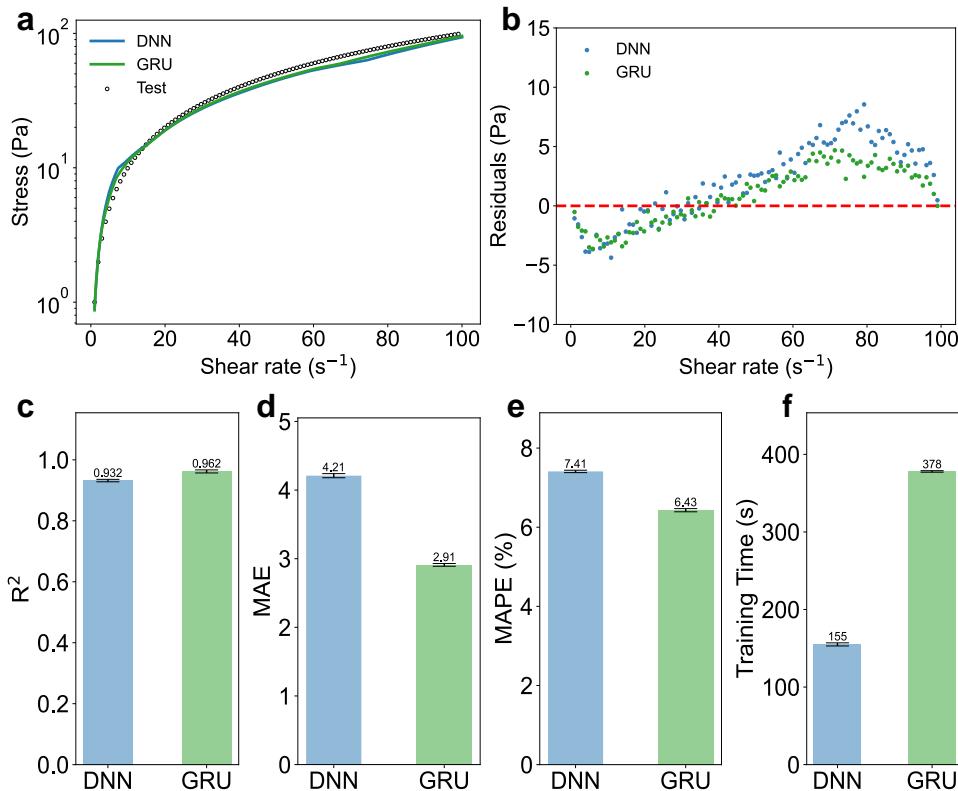


图 2-3 GRU 算法和 DNN 算法在 Herschel-Bulkley 模型测试集上的预测效果对比示意  
 图: (a) GRU 和 DNN 在训练建模后的预测值-真实值曲线图; (b) GRU 和 DNN 训练建模后的预测值残差图; (c) GRU 和 DNN 测试集上的  $R^2$  指标图; (d) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图; (e) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图; (f) GRU 和 DNN 在测试集上的训练时间指标图

Figure 2-3 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Herschel-Bulkley model test set: (a) Predicted value–true value curves for GRU and DNN after training and modeling; (b) Residual plots of the predicted values for GRU and DNN after training and modeling; (c)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (d) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (e) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN; (f) Training Time metric plots on the test set for GRU and DNN

## 2.4.2 Maxwell 模型建模

### 2.4.2.1 数值模拟数据

本节通过后向欧拉法对简单 Maxwell 模型进行了数值模拟，生成了模拟数据，并绘制了应力-应变曲线（Lissajous 曲线），结果如图 2-4 所示。图 2-4 展示了不同应变协议

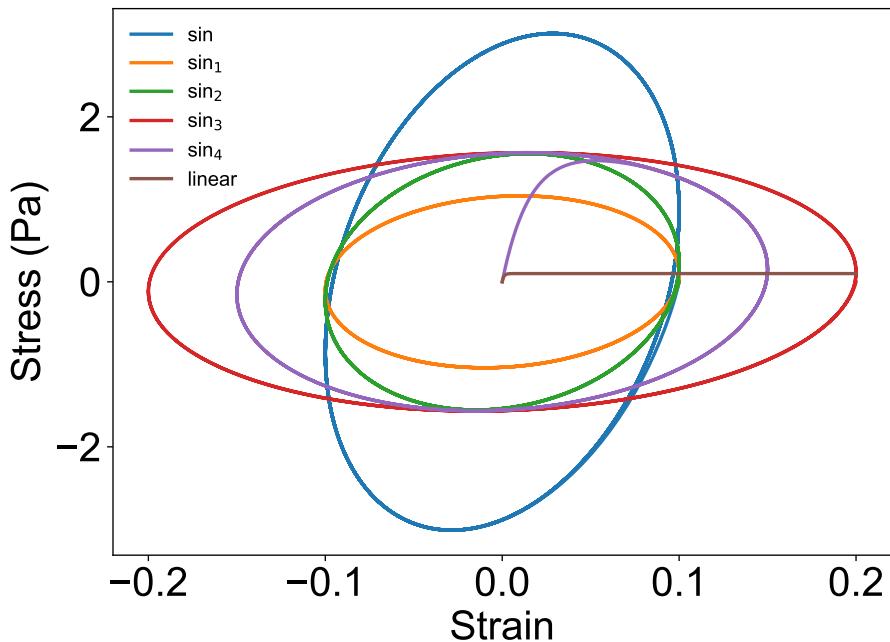


图 2-4 不同应变变化协议的 Maxwell 模型模拟数据应力-应变曲线（Lissajous 曲线）图

Figure 2-4 Stress-strain curves (Lissajous curves) of simulated data for the Maxwell model under different strain variation protocols

下的模拟结果。对于正弦交变应变，Lissajous 曲线呈现出标准的闭合椭圆形状，这与 Maxwell 模型的理论预期一致，表明模型在周期性应变下的响应具有良好的稳定性和可预测性。对于线性应变，Lissajous 曲线在应变较小时表现出应力的快速增加，随后随着应变的继续增加，应力逐渐趋于一个稳定值，这一现象同样符合 Maxwell 模型的理论预期，反映了材料在持续应变下的应力松弛特性。综合看来，后向欧拉法模拟的数据符合预期，可以用于后续训练。

#### 2.4.2.2 交变协议预测交变协议效果验证

为了验证 GRU 算法在时间序列本构方程数据中的预测效果，本节使用交变应变协议生成的数据作为训练集，交变应变协议生成的数据作为测试集。分别使用了 GRU 和 DNN 进行训练，并在测试集上进行验证，测试结果如图2-5、图2-6所示。

图2-5（a-b）为两种不同算法预测模型在测试集上的真实值-预测值曲线，图 a 为 Lissajous 曲线，可以看到 GRU 算法的预测值的 Lissajous 曲线与真实值曲线十分接近，而 DNN 算法的预测值的 Lissajous 曲线与真实的曲线则有明显的周期性偏差，尤其在大

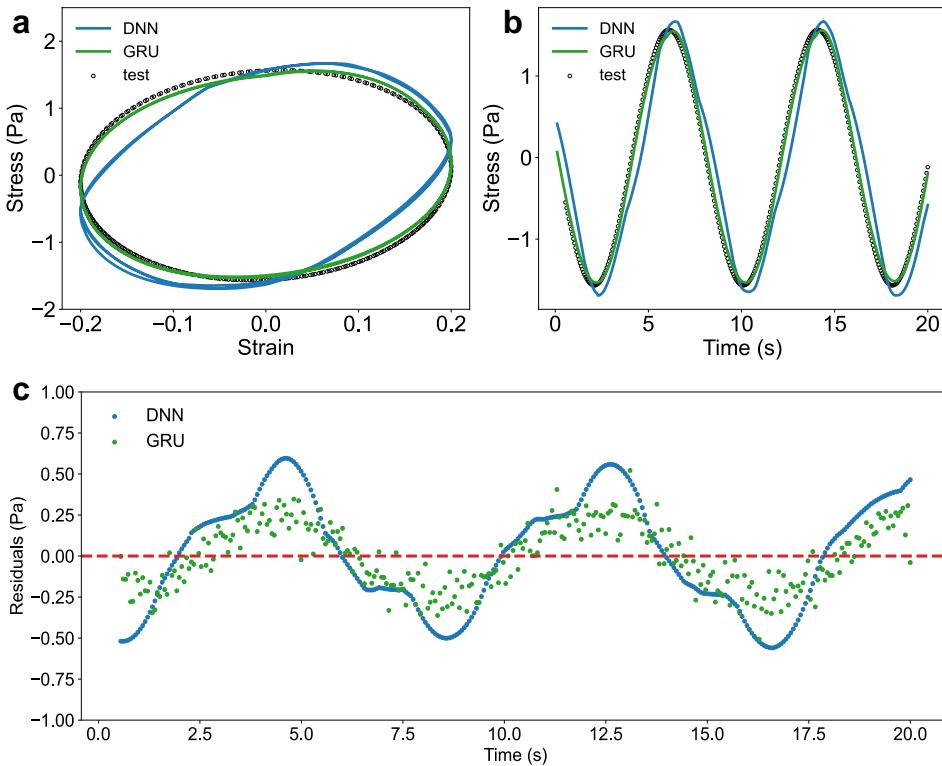


图 2-5 GRU 算法和 DNN 算法在 Maxwell 模型交变协议测试集上的预测效果对比示意  
 图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的应力-应变曲线 (Lissajous 曲线); (b) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的应力-时间曲线; (c) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值残差图

Figure 2-5 Comparison of prediction performance between GRU and DNN algorithms on Maxwell model alternating protocol test set: (a) Stress-strain curves (Lissajous curves) of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (b) Stress-time curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (c) Residual plots of predicted values for GRU and DNN on test set

应变时，预测值与真实值有较大的偏差。图 b 为时间-应力曲线，从中可以看到 GRU 算法的预测值曲线随时间变化较为稳定，贴近真实值曲线，而 DNN 算法的预测值的曲线明显偏离真实值曲线。

图2-5 (c) 为两种算法预测模型的测试集残差图，从图中可以看到 DNN 算法的预测值与真实值残差呈现非常明显的周期性分布，极值偏离 0 刻度线，说明 DNN 模型无法泛化到测试集。而 GRU 的残差图虽然也存在一定周期性，但是总体分布效果明显优

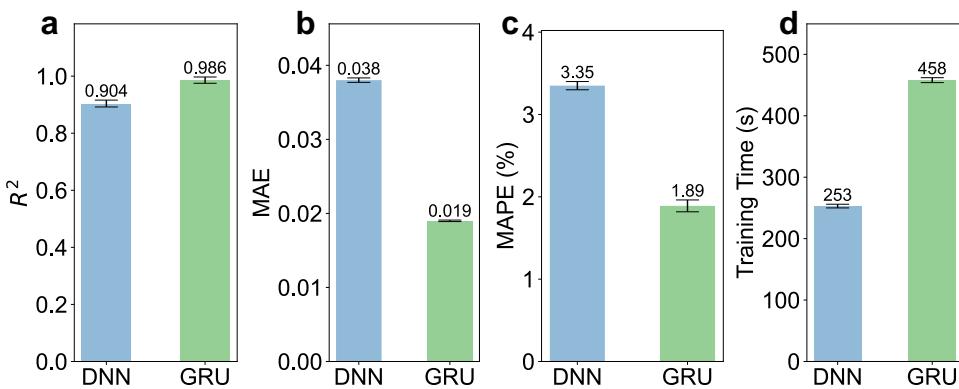


图 2-6 GRU 算法和 DNN 算法在 Maxwell 模型交变测试集上的预测指标对比图: (a) GRU 和 DNN 在测试集上的  $R^2$  指标图; (b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图; (c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图; (d) GRU 和 DNN 在测试集上的训练时间指标图

Figure 2-6 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Maxwell model alternating protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN; (d) Training Time metric plots on the test set for GRU and DNN

于 DNN 的对应残差, 这说明 GRU 捕捉到了训练数据的较完整的特征, 尤其是 DNN 未能捕捉的周期性特征。综合真实值-预测值曲线和残差图, 可以定性分析出 GRU 的预测效果更为优秀。

接下来, 本节计算两种算法的测试集预测指标, 绘制指标对比图2-6。从图?? (a) 显示, GRU 的  $R^2$  值为 0.986, 接近 1, 说明 GRU 的预测效果十分优秀, 而 DNN 的  $R^2$  值为 0.904, 略低于 GRU, 但是也高于 0.9, 属于非常出色的指标。仅从  $R^2$  指标来看, GRU 预测效果优于 DNN, 但是优势不明显。从图2-6 (b-c) 看, GRU 预测结果的 MAE 值为 0.019, 仅为 DNN 预测结果的 MAE 值的一半, GRU 预测结果的 MAPE 值为 1.89, 仅为 DNN 预测结果的 MAPE 值 3.35 的一半。这定量说明 GRU 的预测结果误差远小于 DNN 的预测结果误差, GRU 在此项任务上预测泛化效果更好。当然, 由于 GRU 的模型特性, 其训练时间如图2-6 (d) 所示, 要高于 DNN。

综合各项分析数据来看, 当训练数据和测试数据为同类型应变变化过程 (都为交变应变) 时, GRU 算法可以更好的学习到 Maxwell 模型数据的内在特征, 包括周期性响

应，黏弹性，时间依赖性响应。从定性与定量分析结果看，GRU 算法的预测泛化效果在此项任务上明显优于 DNN，在计算资源足够时，GRU 算法相比 DNN 性能更佳。

#### 2.4.2.3 交变协议预测线性协议效果验证

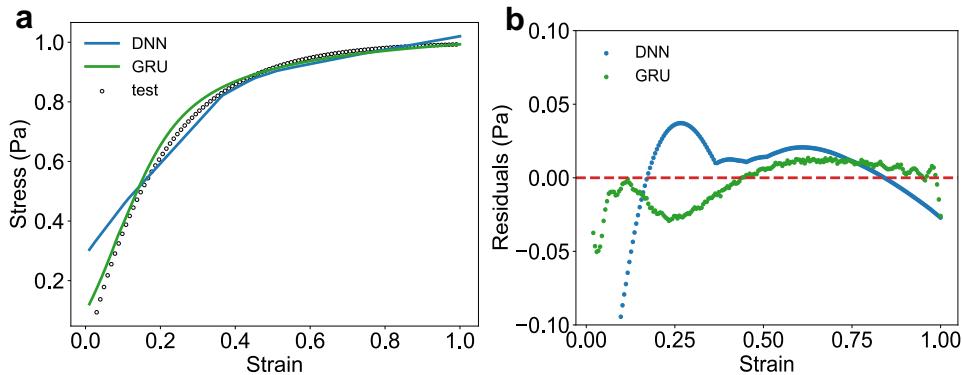


图 2-7 GRU 算法和 DNN 算法在 Maxwell 模型线性协议测试集上的预测效果对比示意

图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的应力-应变曲线 (Lissajous 曲线); (b) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值残差图

Figure 2-7 Comparison of prediction performance between GRU and DNN algorithms on Maxwell model linear protocol test set: (a) Stress-strain curves (Lissajous curves) of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (b) Residual plots of predicted values for GRU and DNN on test set

为了验证 GRU 算法在不同形式的应变历史下的泛化预测效果，本节使用交变应变协议生成的数据作为训练集，线性应变协议生成的数据作为测试集。分别使用了 GRU 和 DNN 进行训练，并在测试集上进行验证，测试结果如图2-7、图2-8所示。图2-7 (a) 为两种不同算法预测模型在测试集上的真实值-预测值的 Lissajous 曲线，图中可以看到 GRU 算法的预测值的 Lissajous 曲线与真实值曲线接近，在小应变时有一定偏差，这可能源于门控单元对初始状态记忆单元的权重初始化敏感性问题。而 DNN 算法的预测值的 Lissajous 曲线与真实的曲线相比 GRU 偏差更大，在小应变时，预测值与真实值有较大的偏差。

图2-7 (b) 为两种算法预测模型的测试集残差图，从图中可以看到 DNN 算法的残差在初始时相比 GRU 更为偏离 0 刻度线，GRU 的残差图残差点相对均匀地分布在 0 刻度线两侧，总体分布效果明显优于 DNN 的对应残差。这说明 GRU 捕捉到了训练数据

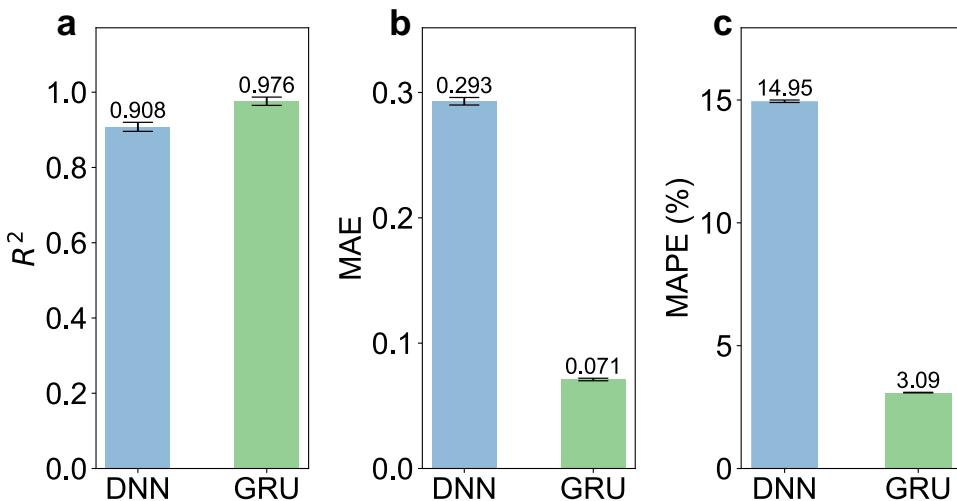


图 2-8 GRU 算法和 DNN 算法在 Maxwell 模型线性协议测试集上的预测指标对比  
图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图

Figure 2-8 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Maxwell model linear protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN

的较完整的特征，且预测偏差较小。综合真实值-预测值曲线和残差图，可以定性分析出 GRU 的预测效果更为优秀。

接下来，本节计算两种算法的测试集预测指标，绘制指标对比图2-8。图2-8（a）显示，GRU 的  $R^2$  值为 0.976，接近 1，证明 GRU 的预测效果十分优秀，而 DNN 的  $R^2$  值为 0.908，略低于 GRU，但是也高于 0.9，属于非常出色的指标。仅从  $R^2$  指标来看，GRU 预测效果优于 DNN，但是优势不明显。从图2-8（b-c）看，GRU 预测结果的 MAE 值为 0.071，而 DNN 的预测结果的 MAE 值为 0.293，GRU 在绝对误差上仅为 DNN 的四分之一，优势显著。GRU 预测结果的 MAPE 值为 3.09，仅为 DNN 预测结果的 MAPE 值 14.95 的五分之一左右。这定量说明 GRU 的预测结果误差远小于 DNN 的预测结果误差，GRU 在此项任务上预测泛化效果更好。这里的训练时间对比与上一节的交变协议预测交变协议一致，同图2-6（d）所示。

综合各项分析数据来看，当训练数据和测试数据为不同类型应变变化过程时，GRU

算法展现出了显著的优势，尤其是在学习 Maxwell 模型数据的内在特征方面。Maxwell 模型作为一种经典的粘弹性模型，其核心在于描述材料在应力作用下的时间依赖性响应。GRU 算法可以仅通过学习交变应变的训练数据，就能够很好地预测线性应变的测试数据。这是因为 GRU 算法能够有效地从交变应变数据中提取出关键的时间依赖性特征，并将其应用于线性应变的预测中。

#### 2.4.2.4 不同时间步的预测效果对比

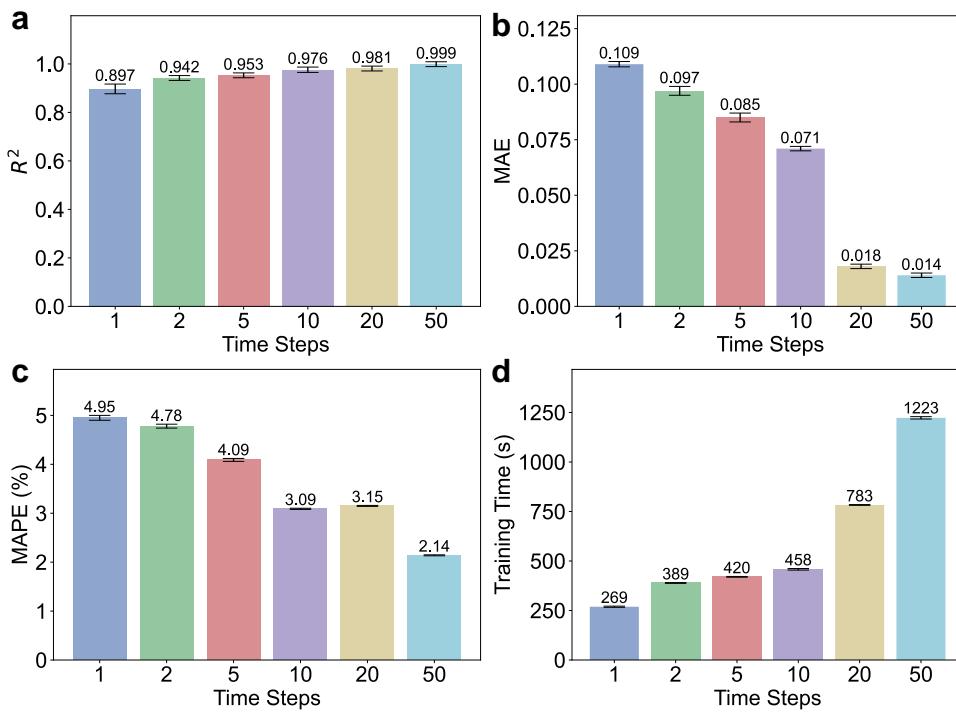


图 2-9 GRU 算法在 Maxwell 模型不同时间步下的预测效果对比图：(a) GRU 在不同时间步下的  $R^2$  指标图；(b) GRU 在不同时间步下的 MAE 指标图；(c) GRU 在不同时间步下的 MAPE 指标图；(d) GRU 在不同时间步下的训练时间指标图

Figure 2-9 Comparison of prediction performance of the GRU algorithm on the Maxwell model with different time steps: (a)  $R^2$  metric plots with different time steps; (b) MAE metric plots with different time steps; (c) MAPE metric plots with different time steps; (d) Training Time metric plots with different time steps

对于 GRU 这类循环神经网络来说，网络架构的时间步数（序列长度）是非常重要的超参数。较大的时间步可以使模型在每个时间步上处理更多的信息，有助于捕捉长期依赖关系，但是可能导致模型学习到数据中的噪声，而不是其潜在的结构，从而导致过

拟合。较小的时间步较小的时间步可以更细致地捕捉序列中的短期变化和细节信息，有助于模型更好地理解数据的短期动态特征，可能导致模型过于关注噪声，而忽略重要的长期依赖关系，从而导致欠拟合。本节研究了不同时间步下训练的模型在测试集上的预测效果。如图2-9所示。由图可见，预测模型  $R^2$  值随着时间步的增加而增加，但是幅度较小。MAE 值和 MAPE 值随时间步的增加而减少，说明随着时间步的增加，模型的预测效果变的更好，时间步小于 10 时，这种误差减小的趋势较明显，时间步大于 20 时，MAE 值下降幅度变小，时间步大于 10，MAPE 值下降幅度变小。这说明模型的优化指标上升存在阈值，这是因为 GRU 算法在较长序列中容易遗忘丢失信息，对于时间序列的处理长度有一定限制。而随着时间步的增加，当时间步大于 20 后，模型的训练时间急剧增加，训练成本陡增。

本节分析针对此项任务，最佳时间步在 10-20 之间，MAE 值和 MAPE 值开始下降到阈值，且训练时间还未显著增加。

### 2.4.3 Doi-Edwards 模型建模

#### 2.4.3.1 数值模拟数据

本节使用 Python 的 `scipy.integrate` 库对 Doi-Edwards 模型进行数值积分模拟。模拟结果如图2-10所示。图2-10 (a) 为不同应变振幅模拟的剪切应力应变 Lissajous 曲线，曲线呈现标准的椭圆形状，符合 Doi-Edwards 模型在小应变下的假设。图2-10 (b) 为模拟的第一法向应力差 ( $N_1$ ) 的 Lissajous 曲线，曲线具有振幅依赖性，且为滞回曲线，与文献中的 Doi-Edwards 模型一致。图2-10 (c) 为线性应变协议下的应力-时间曲线，可以看到随着应变加载，应力一开始为近似的线性增加，后逐渐趋向平台值，这个结果符合预期。综上本节模拟的数据可以认为符合 Doi-Edwards 模型，可以用于后续实验。

#### 2.4.3.2 交变协议预测交变协议效果验证

为了验证 GRU 算法在 Doi-Edwards 模型本构方程数据中的预测效果，本节使用交变应变协议生成的数据作为训练集，交变应变协议生成的数据作为测试集。分别使用了 GRU 和 DNN 进行训练，并在测试集上进行验证，测试结果如图2-11、图2-12所示。

图2-11 (a-c) 为两种不同算法构建的预测模型预测的剪切应力 ( $\sigma_{12}$ ) 的 Lissajous 曲线、时间-应力曲线、残差图，(d-f) 为预测的第一法向应力差 ( $N_1$ ) 的 Lissajous 曲线、时间-应力曲线、残差图。图 a 和图 b 可以看出 GRU 算法的预测的  $\sigma_{12}$  值与真实的  $\sigma_{12}$  接近，曲线拟合较好。而 DNN 算法的预测值在某些区域存在较大误差，例如在应

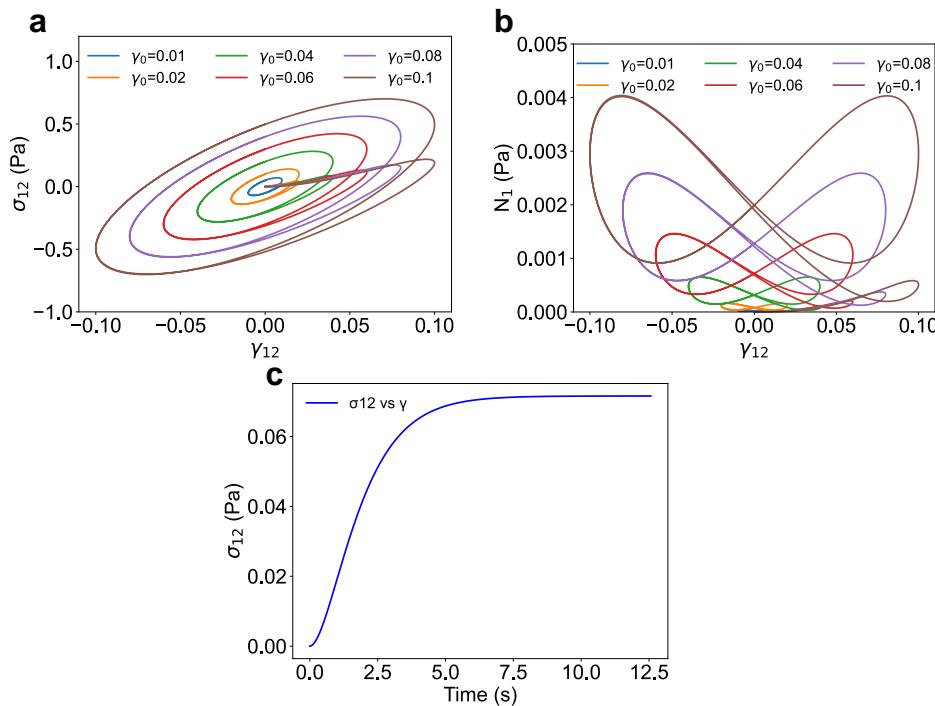


图 2-10 Doi-Edwards 模型模拟数据: (a) 不同应变振幅下的剪切应力应变 Lissajous 曲线; (b) 不同应变振幅下的第一法向应力差 ( $N_1$ ) 的 Lissajous 曲线; (c) 线性应变协议下的应力-时间曲线

Figure 2-10 Doi-Edwards model simulation data: (a) Lissajous curves of shear stress-strain under different strain amplitudes; (b) Lissajous curves of first normal stress difference ( $N_1$ ); (c) Stress-time curves under linear strain protocol

变化变化的初始和 5-10 s 之间, DNN 存在较大误差。图 c 的残差图则显示, GRU 算法预测值与真实值的残差紧贴 0 刻度线, 呈现无序离散的分布状态, 而 DNN 算法预测值和真实值的残差呈现明显的曲线规律, 且与 0 刻度线性距离偏差较大, 残差分布区间远远大于 GRU 部分。残差图的结果表明对于 GRU 成功地学习到了训练数据中的各项特征, 复杂的非线性关系, 且不存在明显周期性, 总体残差较小, 而 DNN 存在特征未能完全学习的问题, 拟合效果较差, 未能很好地捕捉到训练数据的特征。从图 d、图 e 和图 f 的  $N_1$  的预测效果图来看,  $N_1$  与  $\sigma_{12}$  的结果类似, 均是 GRU 的预测效果要优于 DNN, 而对比 GRU 预测的  $N_1$  值和  $\sigma_{12}$  值, 则是  $\sigma_{12}$  值的预测效果会更好, 这可能是因为  $\sigma_{12}$  与输入的剪切速率特征  $\dot{\gamma}_{12}$  之间的函数关系更为简单, 且更加符合时间叠加原理, 所以 GRU 可以更好地捕捉其时间依赖性和内在联系。

之后本节分别对两种不同算法在  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  上的预测效果做了定量分析, 指标图如

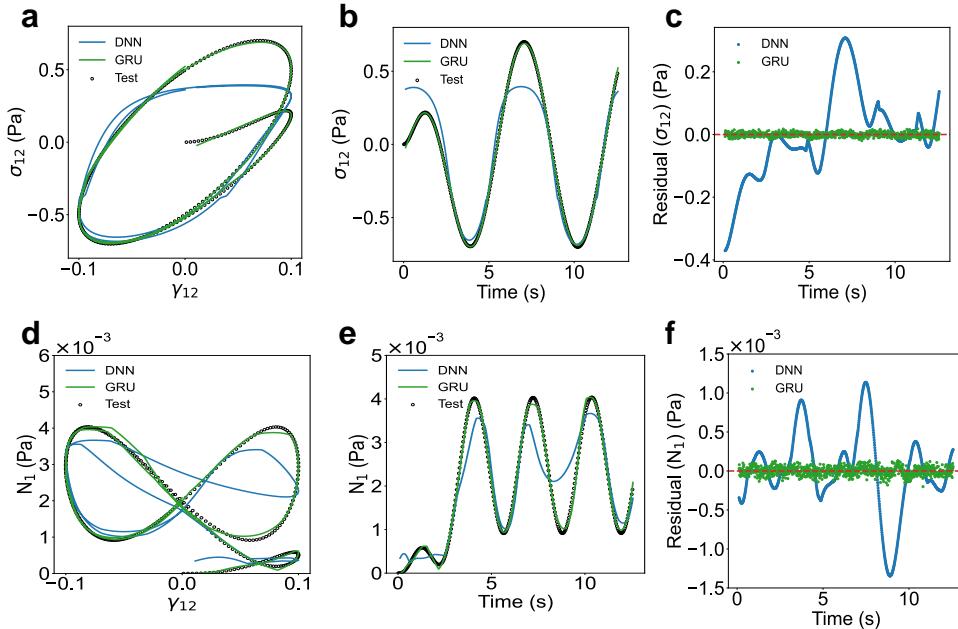


图 2-11 GRU 算法和 DNN 算法在 Doi-Edwards 模型交变协议测试集上的预测效果对比示意图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的剪切应力-应变曲线 (Lissajous 曲线); (b) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的时间-应力曲线; (c) GRU 和 DNN 在测试集上剪切应力的预测值残差图; (d) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的第一法向应力差 ( $N_1$ ) 的 Lissajous 曲线; (e) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的时间-第一法向应力差曲线; (f) GRU 和 DNN 在测试集上的第一法向应力差预测值残差图

Figure 2-11 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Doi-Edwards model alternating protocol test set: (a) Shear stress-strain curves (Lissajous curves) of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (b) Time-stress curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (c) Residual plots of shear stress predicted values for GRU and DNN on test set; (d) First normal stress difference ( $N_1$ ) Lissajous curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (e) Time-first normal stress difference curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (f) Residual plots of first normal stress difference predicted values for GRU and DNN on test set

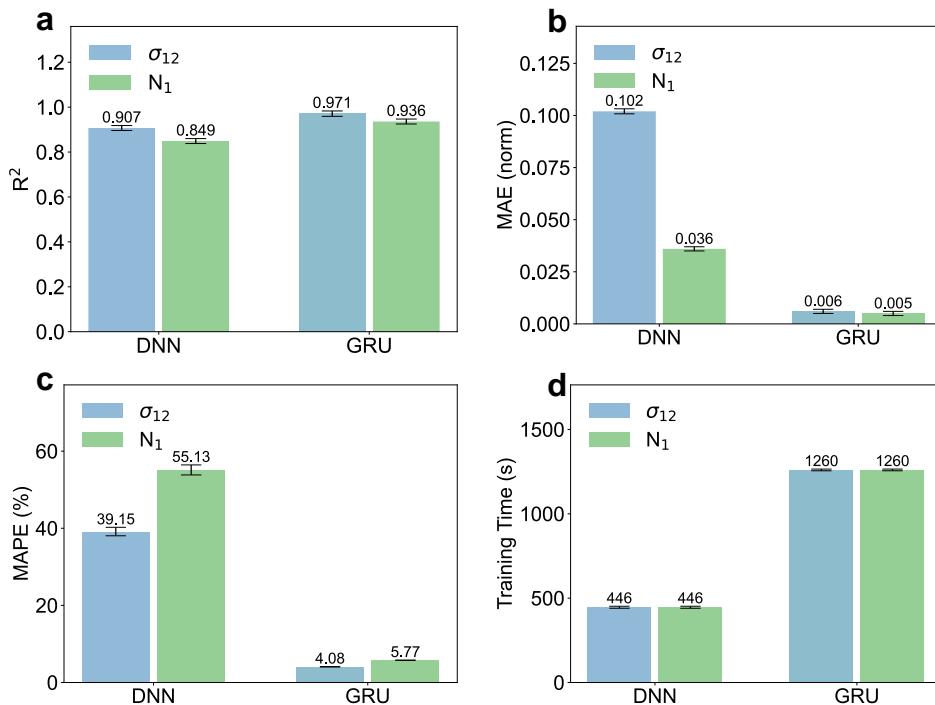


图 2-12 GRU 算法和 DNN 算法在 Doi-Edwards 模型交变协议测试集上的预测指标对比图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图；(d) GRU 和 DNN 在测试集上的训练时间指标图

Figure 2-12 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Doi-Edwards model alternating protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN; (d) Training Time metric plots on the test set for GRU and DNN

图2-12所示。在  $R^2$  指标上，GRU 在  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  的预测指标均优于 DNN，而同种算法下  $\sigma_{12}$  的  $R^2$  值要高于  $N_1$ ，显示  $\sigma_{12}$  的预测效果更好。在 MAE 指标上，DNN 的  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  的 MAE 值均远高于 GRU，说明 GRU 的预测误差远小于 DNN。MAPE 指标与 MAE 指标的对比基本一致，都是 GRU 的预测误差小于 DNN。但是同种算法下  $\sigma_{12}$  的 MAE 值高于  $N_1$ ，但是 MAPE 值反之，这是因为 MAE 值强调的是绝对值比较，受到真实数据本身尺度的影响，因此比较同种算法下  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  的预测效果应当以去除了数据尺度影响的 MAPE 值来判定，而 MAPE 值的结论表明同种算法下  $\sigma_{12}$  值的预测效果相比  $N_1$  更好，这与  $R^2$  的分析和图2-11的定性分析一致，这也是后续可以优化的方向之一。最后，

从图2-12 (d) 来看, GRU 在此项任务上的训练时间为 DNN 的 3 倍左右, 符合更高成本的预期。

综合各项分析数据来看, 当训练数据和测试数据为同类型应变变化过程 (都为交变应变) 时, GRU 算法可以更好的学习到 Doi-Edwards 模型数据的内在特征, 包括周期性响应, 黏弹性, 时间依赖性响应。从定性与定量分析结果看, GRU 算法的预测泛化效果在此项任务上明显优于 DNN, 在计算资源足够时, GRU 算法相比 DNN 性能更佳, 而在同种算法下  $\sigma_{12}$  的预测效果优于  $N_1$ 。

#### 2.4.3.3 交变协议预测线性协议效果验证

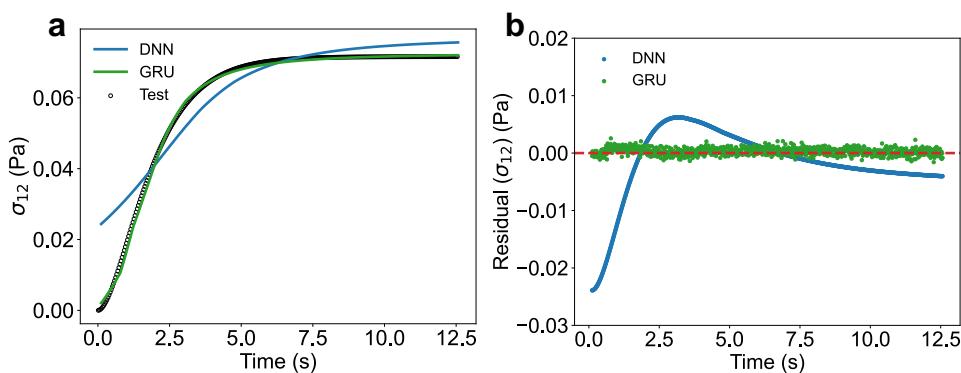


图 2-13 GRU 算法和 DNN 算法在 Doi-Edwards 模型线性协议测试集上的预测效果对比示意图: (a) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的剪切应力-应变曲线 (Lissajous 曲线); (b) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值残差图

Figure 2-13 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Doi-Edwards model linear protocol test set: (a) Shear stress-strain curves (Lissajous curves) of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (b) Residual plots of predicted values for GRU and DNN on test set

为了验证 GRU 算法在不同形式的应变历史下对于 Doi-Edwards 模型泛化预测效果, 本节使用交变应变协议生成的数据作为训练集, 线性应变协议生成的数据作为测试集。分别使用了 GRU 和 DNN 进行训练, 并在测试集上进行验证, 测试结果如图2-13、图2-14所示。

图2-13 (a) 为两种不同算法预测模型在测试集上的真实值-预测值曲线, 图中可以看到 GRU 算法的预测值的曲线与真实值曲线接近, 无较明显的偏差区间, 而 DNN 算法的预测值的曲线与真实的曲线存在明显的偏差。在应变加载初始和结束时, DNN 算

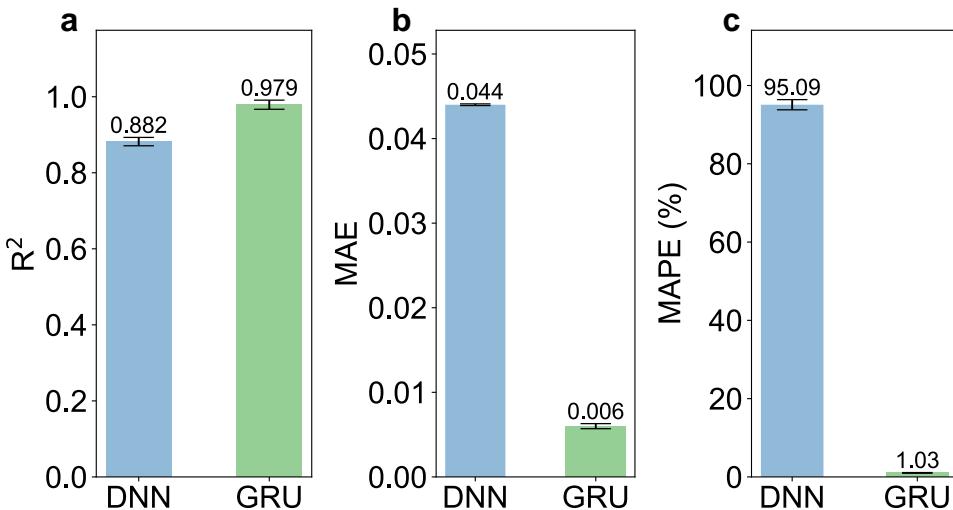


图 2-14 GRU 算法和 DNN 算法在 Doi-Edwards 模型线性协议测试集上的预测效果对比示意图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图

Figure 2-14 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Doi-Edwards model linear protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN

法的预测值相比真实值偏大，而应变加载 2-6 s 的中间阶段，DNN 算法的预测值又偏小，总体来看仅在大致趋势上符合真实值曲线。

图2-13 (b) 展示了两种算法在测试集上的残差图。从图中可以明显看出，DNN 算法的预测值与真实值之间的残差分布并不均匀，整体呈现出较为清晰的曲线趋势，尤其是在 3 秒附近出现了显著的峰值。这表明 DNN 未能充分捕捉到训练数据中的关键特征，导致其在测试集上的表现不尽如人意。相比之下，GRU 算法的残差图则呈现出无序分布，残差点均匀地分布在 0 刻度线两侧，且残差值普遍小于 DNN。这说明 GRU 能够更好地捕捉到训练数据中的特征，预测偏差也更小。综合真实值与预测值的曲线以及残差图的分析，可以定性地得出结论：GRU 的预测效果优于 DNN。

接下来，本节对两种算法在测试集上的预测性能指标进行了详细计算，并绘制了相应的指标对比图，如图2-14所示。从图2-14 (a) 中可以看出，GRU 算法的  $R^2$  值达到了 0.979，这一结果充分证明了 GRU 在预测任务中的卓越表现。相比之下，DNN 算法的

$R^2$  值仅为 0.882，明显低于 GRU，这表明在  $R^2$  指标的评估中，GRU 的表现更为出色。进一步观察图2-14 (b-c)，可以发现 GRU 预测结果的平均绝对误差（MAE）值为 0.006，而 DNN 的 MAE 值则高达 0.044。这意味着 GRU 在绝对误差方面的表现仅为 DNN 的七分之一，优势极为显著。此外，GRU 预测结果的平均绝对百分比误差（MAPE）值为 1.03，而 DNN 的 MAPE 值则为 95.09。这些定量数据充分说明了 GRU 的预测结果误差远小于 DNN，从而证明了 GRU 在该任务上的预测泛化能力更强。至于训练时间的对比，与上一节中交变协议预测交变协议的情况一致，具体可参考图2-12 (d) 所示。

从整体分析数据来看，当训练数据与测试数据涉及不同类型的应变变化过程时，GRU 算法在学习 Doi-Edwards 模型数据的内在特性方面有显著优势。这主要归因于 GRU 算法能够高效地从交变应变数据中提取关键的时间依赖特征，并将其成功应用于线性应变的预测之中。

#### 2.4.3.4 不同时间步的预测效果对比

为了探究在 Doi-Edwards 模型上 GRU 算法的最佳时间步，本节研究了不同时间步下训练的模型在测试集上的预测效果，如图2-15所示。由图可见，预测模型  $R^2$  值在时间步小于 40 时随着时间步的增加而增加，在时间步大于 40 后反而略有下降。MAE 值和 MAPE 值在时间步小于 40 时随时间步的增加而减少，时间步为 40 的值只有不到时间步为 20 的值的十分之一，显著下降，而时间步大于 40 后，MAE 值和 MAPE 值则趋于稳定。这说明对于本项任务，时间步为 40 左右时，恰好可以开始获得不错的预测效果，而从训练成本来看，训练时间是随着时间步设置增加而单调增的，所以综合看来，时间步为 40 左右时，性价比最高。

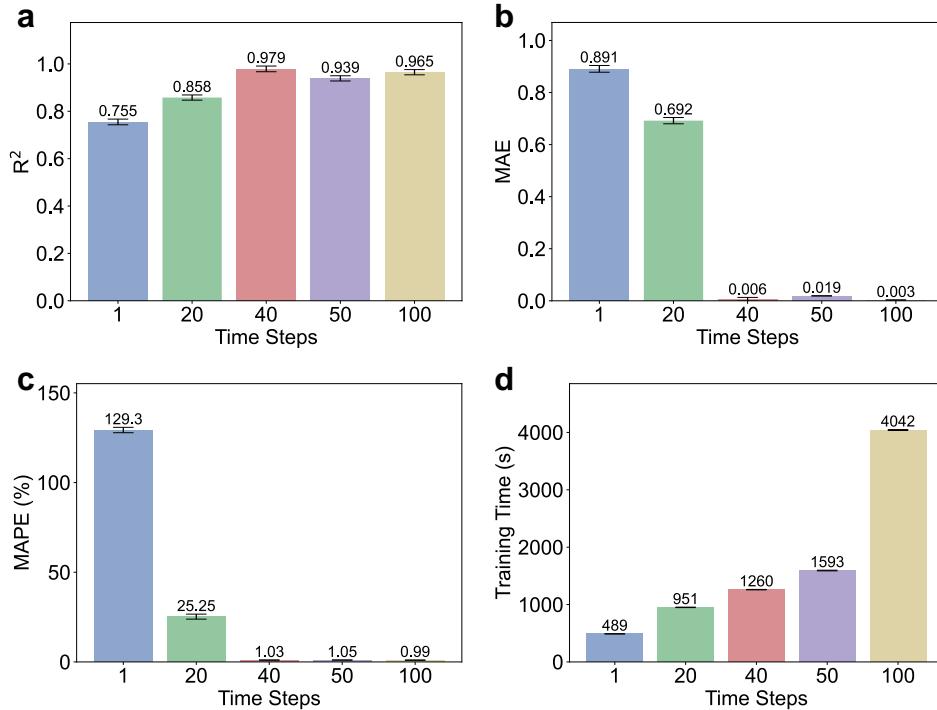


图 2-15 GRU 算法和 DNN 算法在 Doi-Edwards 模型不同时间步长下的预测指标对比图：(a) GRU 和 DNN 在不同时间步下的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在不同时间步下的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在不同时间步下的 MAPE 指标图；(d) GRU 和 DNN 在不同时间步下的训练时间指标图

Figure 2-15 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm under different time steps of the Doi-Edwards model: (a)  $R^2$  metric plots under different time steps for GRU and DNN; (b) MAE metric plots under different time steps for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots under different time steps for GRU and DNN; (d) Training Time metric plots under different time steps for GRU and DNN

## 2.5 本章小结

本章首先运用了门控循环单元（GRU）算法对数值模拟的 Herschel-Bulkley 模型、Maxwell 模型以及 Doi-Edwards 模型所产生的模拟数据展开深度学习建模工作。

研究结果揭示出，GRU 作为一种循环神经网络，依托其独特的门控单元机制，能够精准地捕捉黏弹性材料流变学模拟数据所蕴含的时间依赖性以及复杂非线性特征。特别的，在处理 Herschel-Bulkley 模型这类非时间序列数据时，GRU 模型的预测效果相较于 DNN（深度神经网络）模型依旧略胜一筹。究其原因，在于 GRU 的门控单元机制引

入了更多的参数，从而赋予了其更佳的泛化性能。对于经典的简单 Maxwell 模型，由于属于典型的时间序列数据，GRU 对其进行建模预测的效果全面超越 DNN，各项评估指标均展现出显著优势。当面对更为复杂 Doi-Edwards 模型时，GRU 的建模预测效果依旧优于 DNN。进一步分析发现，在相同的建模任务中，GRU 在剪切应力  $\sigma_{12}$  的预测效果上强于第一法向应力差  $N_1$ 。

在本章模拟数据预测部分设计的实验中，我们探讨了两类预测任务：首先，利用交变应变变化的训练数据，预测相应的测试数据；其次，使用交变应变变化实验的训练数据，预测稳态剪切的测试数据。在针对不同本构模型的这两类实验中，GRU（门控循环单元）模型的表现均优于 DNN（深度神经网络）。这一现象充分表明，GRU 具备更强的泛化能力，能够有效地预测更为一般化的本构关系，而不仅仅是进行简单的函数逼近。GRU 通过引入门控机制，能够有效捕捉序列数据中的长期依赖关系，从而在处理复杂的本构模型时展现出更优的性能。相比之下，DNN 虽然在非时序本构模型中表现出色，但在处理具有复杂时序特征的本构模型时，其性能会受到限制。因此，选择 GRU 模型进行本构关系的预测，能够更好地适应数据的复杂性和多样性，提升预测的准确性和可靠性，但是本章的实验结果同样表明，GRU 模型由于其架构特征，比普通 DNN 的训练时间高很多，且训练时消耗更多的计算机资源（计算机内存、GPU 显存等）。

综上所述，本章的研究工作充分验证了 GRU 在流变学数据建模中的优异效果。该模型不仅能够准确捕捉黏弹性材料的时间依赖性，从而高效刻画非线性、时变的物理过程，展现出良好的关联适配性，而且在理论上突破了传统数据拟合方法的局限，在模拟数据和真实实验数据中均表现出卓越的泛化能力和预测稳定性。总的来说，本章的研究为深度学习在流变学本构建模领域的应用开辟了全新的思路，即可以从模型升级的角度去优化本构建模的过程。

## 第三章 PI-GRU 建模

本章提出了物理信息-门控循环单元（PI-GRU）模型，该模型以 GRU 为基础结构，并在损失函数中引入本构方程残差损失项，旨在利用 GRU 的门控机制捕捉黏弹性本构方程中的时间依赖性特征，同时确保模型符合物理约束，从而增强其泛化能力。

### 3.1 PI-GRU 建模原理

#### 3.1.0.1 Giesekus 模型模拟数据

Giesekus 模型的本构方程如公式(1-12)所示，迁移因子  $\alpha$  用于引入剪切稀化的强度。Giesekus 模型模拟的为简单剪切流动，只在 xy 方向存在应变，应变张量  $\gamma$  仅在  $\gamma_{12}$  分量上存在值。本章首先使用 NumPy 库生成 8 个不同速度场协议的简单剪切流动速度数据，再使用公式(3-1)对应生成应变速率张量数据，时间区间为 [0,24]，单个协议的模拟数据点为 2000，生成形式为 3\*3 应变速率张量矩阵，之后根据  $\gamma_t = \dot{\gamma}_{t-1}\Delta t + \gamma_{t-1}$  迭代计算应变张量。

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}_{ii} &= 2v_{ii}(t) \\ \dot{\gamma}_{ij} &= v_{ij}(t) + v_{ji}(t)\end{aligned}\tag{3-1}$$

随后设置迁移因子  $\alpha$  为 0.8，其余松弛时间参数 ( $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ ) 为 1.0，使用 Python 的 `scipy.integrate.solve_ivp` 函数（内置方法为 Runge-Kutta 法）对 Giesekus 模型的微分方程组进行求解计算，生成 3\*3 应力张量矩阵，如公式(2-17)所示。本章提取  $\sigma_{12}$ 、 $\sigma_{11}$ 、 $\sigma_{22}$  分量作为模拟实验数据，与对应的应变速率张量数据、计算后的应变张量数据一起通过 Pandas 库存入 Excel 文件，便于后续的模型训练。

### 3.2 PI-GRU 建模方法

Giesekus 模型数据单独划分 6 个交变应变协议为训练集和验证集，其中按照 9:1 比例划分为训练集和验证集。划分 1 个交变应变协议，1 个线性应变协议为测试集。

ABE 弹性体数据选取 1 组 SAOS 数据和 1 组 LAOS 数据作为测试集，其余数据按照 9:1 比例划分为训练集和验证集。

### 3.3 PI-GRU 建模结果

本章模型为 PI-GRU 架构，损失函数由数据损失和物理约束损失共同组成：

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \lambda_{\text{data}} \mathcal{L}_{\text{data}} + \lambda_{\text{ode}} \mathcal{L}_{\text{ode}} + \lambda_{\text{dae}} \mathcal{L}_{\text{dae}} + \mathcal{L}_{L_2} \quad (3-2)$$

$$\mathcal{L}_{\text{data}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\hat{\boldsymbol{\sigma}}_i - \boldsymbol{\sigma}_i^{\text{real}}\|_F^2 \quad (3-3)$$

$$\mathcal{L}_{\text{ode}} = \frac{1}{T-1} \sum_{t=1}^{T-1} \|\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{t+1} - [\hat{\boldsymbol{\sigma}}_t + \Delta t \cdot f_{\text{constitutive}}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_t, \dot{\boldsymbol{\sigma}}_t)]\|_F^2 \quad (3-4)$$

$$\mathcal{L}_{\text{dae}} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \left( \underbrace{\|\hat{\boldsymbol{\sigma}}_t - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_t^\top\|_F^2}_{\text{对称性约束}} \right) \quad (3-5)$$

$$\mathcal{L}_{L_2} = \lambda \sum_i w_i^2 \quad (3-6)$$

其中数据损失  $\mathcal{L}_{\text{data}}$  通过 MSE 计算，目的是确保模型的预测结果与数值模拟数据尽可能接近，这是监督学习的基础，直接拟合数据，也是最重要和最基本的损失项。物理损失分为 ODE 损失  $\mathcal{L}_{\text{ode}}$  和对称损失  $\mathcal{L}_{\text{dae}}$ ，物理损失确保模型的预测遵循本构方程描述的物理规律。这里的本构方程在模拟数值训练时为构建模拟数据的原方程，在真实实验数据（ABE 弹性体数据）时为最小二乘法拟合的 Maxwell 方程。这部分损失是为了将物理知识融入模型，增强模型的泛化能力，抑制过拟合。

### 3.4 PI-GRU 建模分析

作为真实实验数据测试的 ABE 弹性体的数据测试，本文选取一组 SAOS 数据和一组 LAOS 数据作为测试集，通过其他不同振幅的动态流变学数据训练，预测未知的振幅的应力应变 Lissajous 曲线。按照上述实验步骤分别使用极端梯度提升树（XGBoost）、多层感知器（MLP）、物理信息-多层感知器（PI-MLP）、物理信息-门控循环单元（PI-GRU）四种模型进行测试，绘制不同算法下的测试比对曲线。

### 3.4.1 Giesekus 模型建模

#### 3.4.1.1 数值模拟数据

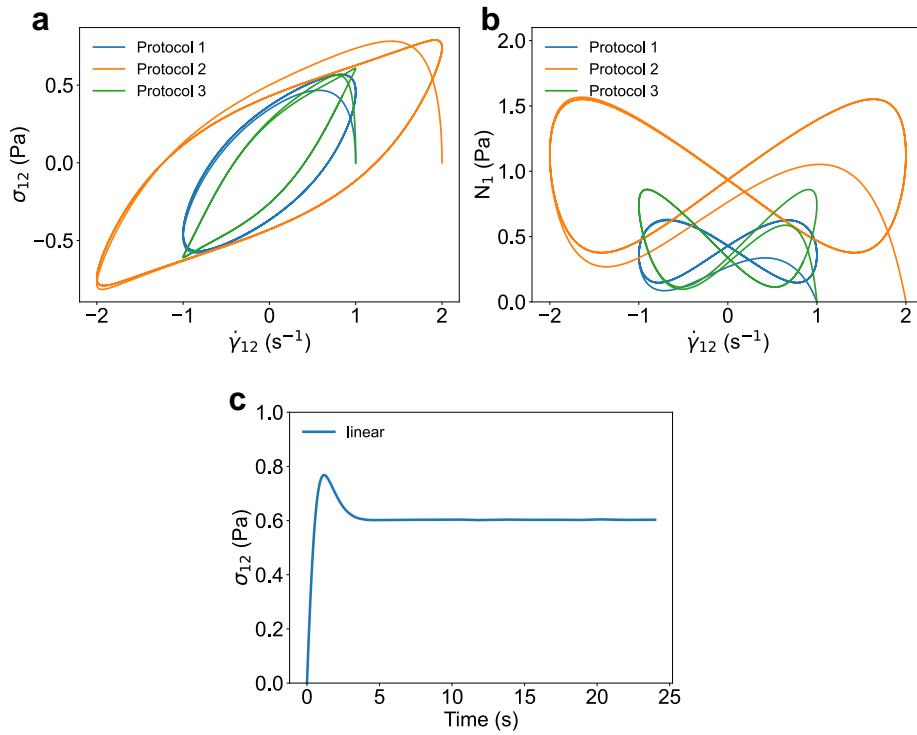


图 3-1 Giesekus 模型模拟数据: (a) 不同交变应变协议的应力-应变率 Lissajous 曲线; (b) 不同交变应变协议的第一法向应力差-应变率 Lissajous 曲线; (c) 线性应变协议下的应力-时间曲线

Figure 3-1 Giesekus model simulation data: (a) Lissajous curves of stress-strain rate for different oscillatory shear protocols; (b) Lissajous curves of first normal stress difference-strain rate for different oscillatory shear protocols; (c) Stress-time curve under linear strain protocol

本节通过 Python 的微分方程求解库来模拟 Giesekus 模型，模拟结果如图3-1。

图3-1展示了部分模拟数据，主要展示不同应变振幅下，本构关系从线性本构到非线性的转变。图3-1 (a) 展示了不同交变应变协议的应力-应变率 Lissajous 曲线，Protocol 1 为小振幅振荡剪切 (SAOS) 的模拟曲线，呈现椭圆状的滞后环，随着振幅增加，Protocol 2 和 Protocol 3 呈现非线性特征的扭曲和不对称，这是大振幅振荡剪切 (LAOS) 的拟合曲线。图3-1 (b) 展示了不同交变应变协议的第一法向应力差 ( $N_1$ ) - 应变率 Lissajous 曲线，随着振幅增加呈现不对称扭曲，曲线形状符合 Giesekus 模型假设<sup>[109]</sup>。

图3-1 (c) 为线性应变协议下的应力-时间曲线，曲线先随着应变加载攀升，存在明

显峰值后回落，后趋于稳定。这可能是因为在屈服点之前，材料主要表现出弹性行为，应力随着应变的增加而线性增长。当应力达到峰值时，材料开始发生塑性变形，内部结构发生不可逆的变化，峰值之后，材料的内部结构开始重新组织，形成新的平衡状态，这种重组过程通常伴随着应力的下降与重新平衡。综上，线性协议的曲线符合 Giesekus 模型对于大剪切应变下材料应力响应的假设，可以用于后续实验。

### 3.4.1.2 交变协议预测交变协议效果验证

为了评估 GRU 算法在 Giesekus 模型本构方程数据预测中的有效性，本节采用交变应变协议生成的数据作为训练集与测试集，分别运用 GRU 和 DNN 进行模型训练，并在测试集上开展验证工作，测试结果如图 3-2、图 3-3 所示。

图 3-2 (a-c) 分别为两种算法构建的预测模型所预测的剪切应力 ( $\sigma_{12}$ ) 的 Lissajous 曲线、时间-应力曲线以及残差图，(d-f) 则对应预测的第一法向应力差 ( $N_1$ ) 的 Lissajous 曲线、时间-应力曲线与残差图。

从图 a 和图 b 可以观察到，GRU 算法预测的  $\sigma_{12}$  值与真实值高度接近，曲线拟合效果理想，而 DNN 算法在部分区域的预测值存在较大偏差。图 c 的残差图进一步显示，GRU 算法预测值与真实值的残差紧密围绕 0 刻度线，呈无序离散分布；相比之下，DNN 算法预测值与真实值的残差呈现出明显的曲线规律及周期性特征，且与 0 刻度线的偏离程度较大，残差分布区间显著宽于 GRU 部分。残差图的结果有力地表明，GRU 成功地学习到了训练数据中的各类特征及复杂的非线性关系，不存在明显的周期性规律，整体残差较小；而 DNN 存在未能充分学习特征的问题，拟合效果欠佳，未能精准捕捉训练数据的特征。

对于图 d、图 e 和图 f 所展示的  $N_1$  预测效果，其与  $\sigma_{12}$  的结果呈现出相似性，即 GRU 的预测性能优于 DNN。进一步对比 GRU 预测的  $N_1$  值和  $\sigma_{12}$  值，发现  $\sigma_{12}$  值的预测效果更为优异，这可能归因于  $\sigma_{12}$  与输入的剪切速率特征  $\gamma_{12}$  之间的函数关系相对简单，且更契合时间叠加原理，从而使得 GRU 能够更有效地捕捉其时间依赖性及内在联系。这部分的模型结果与 Doi-Edwards 模型结果类似，对于第一法向应力差 ( $N_1$ )，目前的 GRU 模型存在进一步改进的空间。在本节中，进一步对两种算法在  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  上的预测效果进行了定量分析，相关指标如图 3-3 所示。在  $R^2$  指标方面，GRU 在  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  的预测中均优于 DNN。此外，对于同一种算法， $\sigma_{12}$  的  $R^2$  值高于  $N_1$ ，例如 GRU 算法下  $\sigma_{12}$  的  $R^2$  值达到 0.981，但是对应的  $N_1$  的  $R^2$  值仅达到 0.857。在 MAE 指标方面，DNN

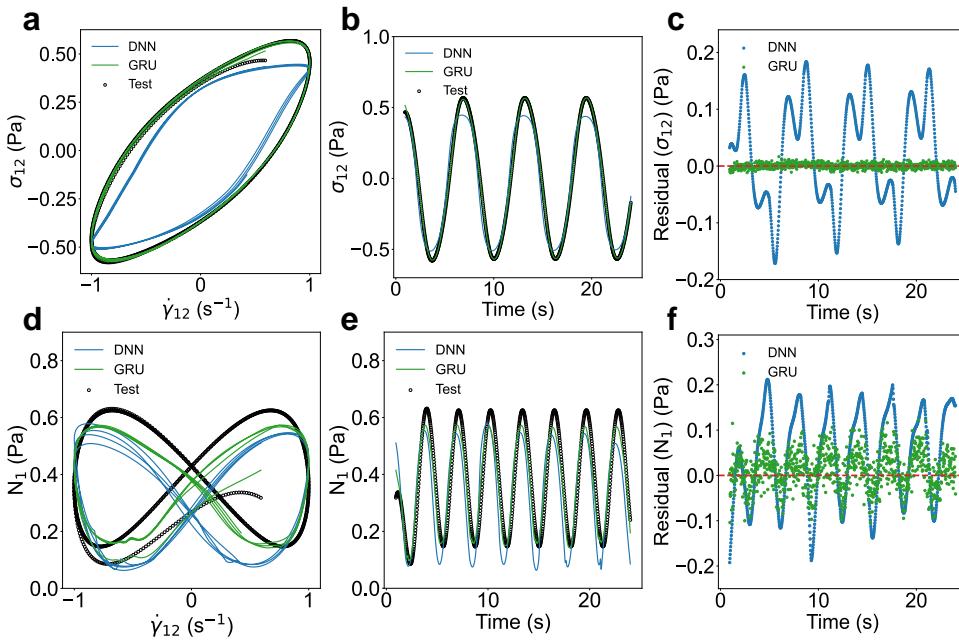


图 3-2 GRU 算法和 DNN 算法在 Giesekus 模型交变协议测试集上的预测效果对比示意  
 图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的剪切应力-应变率 Lissajous 曲线；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的剪切应力-时间曲线；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的剪切应力预测值残差图；(d) GRU 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值的第一法向应力差-应变率 Lissajous 曲线；(e) GRU 和 DNN 在测试集上的第一法向应力差-时间曲线；(f) GRU 和 DNN 在测试集上的第一法向应力差预测值残差图

Figure 3-2 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Giesekus model oscillatory protocol test set: (a) Shear stress-strain rate Lissajous curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (b) Shear stress-time curves for GRU and DNN on test set; (c) Residual plots of shear stress predicted values for GRU and DNN on test set; (d) First normal stress difference-strain rate Lissajous curves of predicted vs. true values for GRU and DNN on test set; (e) First normal stress difference-time curves for GRU and DNN on test set; (f) Residual plots of first normal stress difference predicted values for GRU and DNN on test set

的  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  的 MAE 值分别为 0.079 和 0.197，均显著高于 GRU 的 0.004 和 0.051。而在  $\sigma_{12}$  上，GRU 的 MAE 值为 DNN 的约二十分之一，对应地，在  $N_1$  上，GRU 的 MAE 值为 DNN 的约四分之一。这说明 GRU 相比 DNN 的算法领先在  $\sigma_{12}$  上更为显著。MAPE 值的结果表明相同的结论，DNN 预测结果的  $\sigma_{12}$  和  $N_1$  分别为 112.5% 和 76.81%，预测

结果较差，而 GRU 的结果为 2.68% 和 15.44%，预测效果显著优于 DNN，且 GRU 相比 DNN 在  $\sigma_{12}$  的优化效果优于  $N_1$ ，这与 MAE 的结论一致。最后，从图 3-2 (d) 可以看出，GRU 在此项任务上的训练时间为 1156 s，是 DNN 训练时间的 5 倍左右，符合其高计算成本的预期。根据综合分析结果，当训练数据和测试数据均为交变应变时，GRU

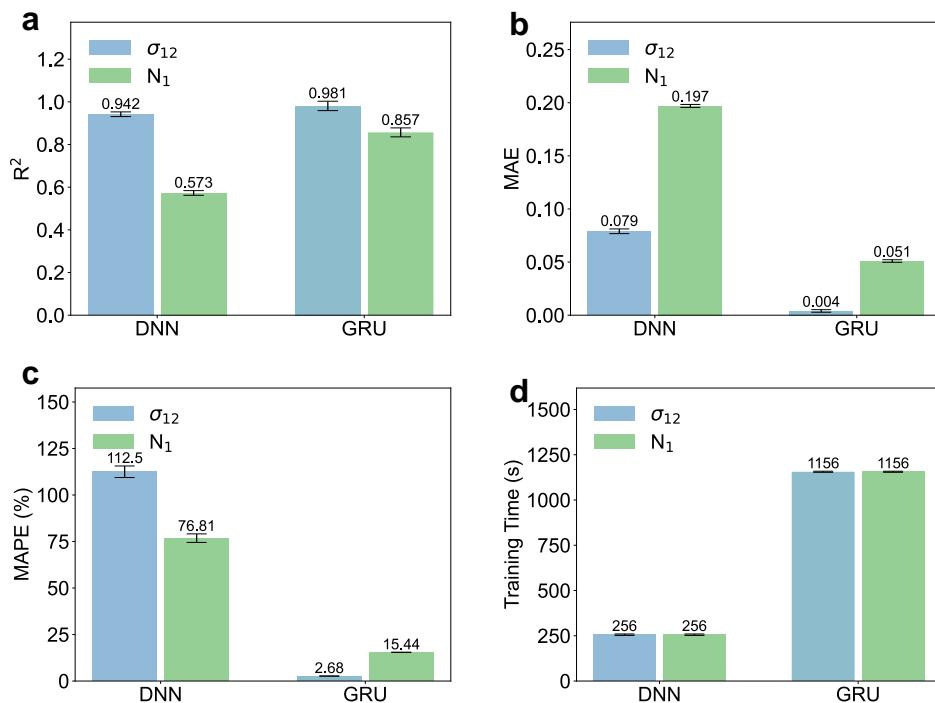


图 3-3 GRU 算法和 DNN 算法在 Giesekus 模型交变协议测试集上的预测效果对比示意  
图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的 R<sup>2</sup> 指标图；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图；(d) GRU 和 DNN 在测试集上  
的训练时间指标图

Figure 3-3 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Giesekus model oscillatory protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN; (d) Training Time metric plots on the test set for GRU and DNN

算法相比 DNN 能够更好地学习到 Giesekus 模型数据的内在特征。本节中，我们使用了 SAOS 和 LAOS 结合的训练数据，以探究模型对非线性黏弹性的学习能力。结果显示，GRU 算法很好地完成了任务，成功捕捉了 Giesekus 模型模拟数据中的复杂非线性关系。综合来看，GRU 算法在处理 Giesekus 模型的非线性黏弹性数据时表现出了显著的优越

性，为后续研究提供了新的视角。

### 3.4.1.3 交变协议预测线性协议效果验证

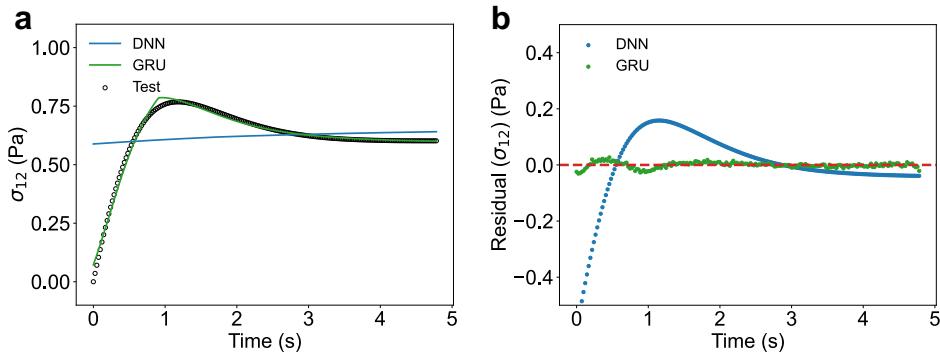


图 3-4 GRU 算法和 DNN 算法在 Giesekus 模型交变协议预测线性协议测试集上的预测效果对比示意图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的时间-应力曲线；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的残差图

Figure 3-4 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Giesekus model oscillatory protocol predicting linear protocol test set: (a) Time-stress curves for GRU and DNN on test set; (b) Residual plots for GRU and DNN on test set

为了检验 GRU 算法在不同形式的应变历史下对 Giesekus 模型的泛化预测能力，本节采用交变应变协议生成的数据作为训练集，线性应变协议生成的数据作为测试集。分别使用 GRU 和 DNN 进行模型训练，并在测试集上进行验证，验证结果如图 3-4 和图 3-5 所示。

图3-4 (a) 为两种不同算法预测模型在测试集上的真实值-预测值曲线，图中可以看到 GRU 算法的预测值的曲线与真实值曲线接近，仅在 1-2 s 之间存在小部分突出偏差，而 DNN 算法的预测值曲线完全没有拟合到曲线特征。图3-4 (b) 展示了两种算法在测试集上的残差图。从图中可以明显看出，DNN 算法的预测值与真实值之间的残差整体呈现出较为清晰的曲线趋势，存在明显的峰值。图中结果表明 DNN 完全没有捕捉到训练数据中的关键特征，导致其在测试集上的表现很差。与之形成鲜明对比的是，GRU 算法的残差图呈现出无序分布的特征，残差点均匀地分布贴近在 0 刻度线两侧。这一现象表明，GRU 能够更有效地学习数据中的关键特征，从而实现更小的预测偏差。结合真实值与预测值的曲线分析以及残差图的观察，可以分析出 GRU 在此项任务的预测性

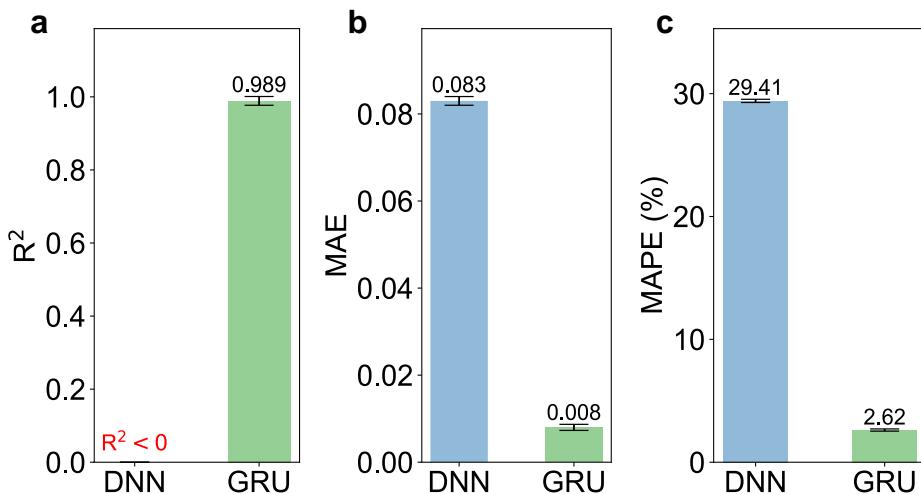


图 3-5 GRU 算法和 DNN 算法在 Giesekeus 模型交变协议预测线性协议测试集上的预测效果对比示意图：(a) GRU 和 DNN 在测试集上的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在测试集上的 MAPE 指标图

Figure 3-5 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm on the Giesekeus model oscillatory protocol predicting linear protocol test set: (a)  $R^2$  metric plots on the test set for GRU and DNN; (b) MAE metric plots on the test set for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots on the test set for GRU and DNN

能优于 DNN。

具体如图3-5 所示。从图3-5 (a) 可以清晰地观察到，GRU 算法的  $R^2$  值高达 0.989，这一结果有力地表明了 GRU 在预测任务中的出色表现。与之形成鲜明对比的是，DNN 算法的  $R^2$  值小于 0，这表明 DNN 并未有效学习到相关特征。进一步分析图3-5 (b-c)，可以发现 GRU 预测结果的平均绝对误差 (MAE) 值为 0.008，而 DNN 的 MAE 值则高达 0.083。这表明 GRU 在绝对误差方面的表现仅为 DNN 的十分之一，优势极为明显。此外，GRU 预测结果的平均绝对百分比误差 (MAPE) 值为 2.62%，而 DNN 的 MAPE 值则为 29.41%。这些定量数据充分证明了 GRU 的预测结果误差小于 DNN，从而进一步证实了 GRU 在该任务上的预测泛化能力更强。在两种算法的训练时间对比方面，与上一节中交变协议预测交变协议的情况相同，具体可参考图 3-3 (d) 所示。

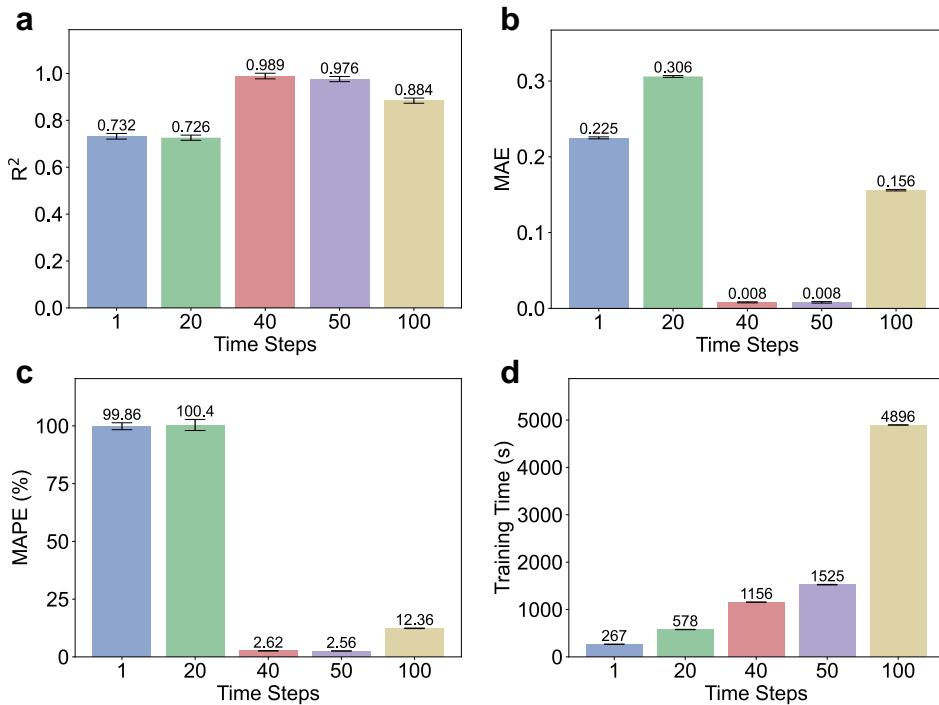


图 3-6 GRU 算法和 DNN 算法在 Giesekeus 模型不同时间步长下的预测指标对比图：(a) GRU 和 DNN 在不同时间步下的  $R^2$  指标图；(b) GRU 和 DNN 在不同时间步下的 MAE 指标图；(c) GRU 和 DNN 在不同时间步下的 MAPE 指标图；(d) GRU 和 DNN 在不同时间步下的训练时间指标图

Figure 3-6 Comparison schematic of the prediction performance of the GRU algorithm and the DNN algorithm under different time steps of the Giesekeus model: (a)  $R^2$  metric plots under different time steps for GRU and DNN; (b) MAE metric plots under different time steps for GRU and DNN; (c) MAPE metric plots under different time steps for GRU and DNN; (d) Training Time metric plots under different time steps for GRU and DNN

#### 3.4.1.4 不同时间步的预测效果对比

为了探究在 Giesekeus 模型上 GRU 算法的最佳时间步，本节研究了不同时间步下训练的模型在测试集上的预测效果，如图3-6所示。由图可见，预测模型  $R^2$  值在时间步小于 40 时为 0.7 左右，当时间步为 40 时为 0.969，时间步进一步增加， $R^2$  开始下降。MAE 值在时间步为 40 相比 20 时从 0.306 跳跃减少至 0.008，进一步增加时间步，MAE 值不再显著改变，直到时间步为 100，MAE 值回升至 0.156，显现过拟合趋势。MAPE 值变化趋势与 MAE 值类似，在时间步为 40 左右跳跃减少，随后直到 100 步开始回升。

从训练时间来看，随着时间步增加，训练时间单调增加，这一点与预期一致。

### 3.4.2 真实数据集实验

为了验证我们的 PI-GRU 模型在真实数据集上的表现，本文选取了 ABE 弹性体数据集，训练数据集为 SAOS 和 LAOS 的混合数据集，测试集分为 SAOS 和 LAOS 数据两类以验证模型在线性区间和非线性区间的预测效果。由图3-7可知，PI-GRU 模型在 SAOS 测试集上相比对比的 XGBoost 模型、多层感知器（MLP）模型、PI-MLP 模型（该模型构建参考 Mahmoudabadbozchelou<sup>[106]</sup>）具有最佳的预测效果，预测指标（图3-8）中 MAPE 值仅为 3.33%，属于优秀泛化范畴，相比 PI-MLP 模型的 14.9% 下降了 11.57%，在训练时间成本上，PI-GRU 模型为 1070s 相比 PI-MLP 模型（789s）仅增加了 281s。

LAOS 测试集上，如图3-7（c-d）所示，PI-GRU 的表现大幅度领先对比模型，PI-GRU 模型预测指标（图3-9）中 MAPE 值仅为 4.32%，相比 PI-MLP 模型的 28.4% 下降了 24.08%，在训练时间成本上，PI-GRU 模型为 895s 相比 PI-MLP 模型（671s）仅增加了 224s。这一结果说明，PI-GRU 模型在处理非线性黏弹性材料的流变学数据时，能够更好地捕捉到数据中的时间依赖性特征，这是因为门控单元可以自主决定是否记忆和遗忘信息，即对于每一个时间步的应变状态历史，门控单元自主给予不同的权重，从而更好地拟合非线性区应力历史叠加并非玻尔兹曼叠加原理的流变学数据，这一特性使得 GRU 结构相当于对黏弹性材料的历史依赖性做了特有的特征融合，这是作为前馈神经网络的 MLP 模型无法做到的。值得注意的是，在预测过程中，物理约束损失的本构方程形式为最简单的 Maxwell 模型（并未引入非线性点），然后就结果来看，PI-GRU 模型依旧可以很好地泛化到非线性区间的 LAOS 数据，这是因为物理约束给予的是大致的物理规律符合，例如 Oldroyd-B 类模型（Giesekus、FENE-P、LPTT）通过不同形式的非线性修正扩展了基础模型的适用范围，而 GRU 模型在 Maxwell 模型的物理约束下从另一种独特的形式修正扩展了基础模型。由于简单 Maxwell 模型的参数拟合非常简单，且本文的研究并不需要过分追求物理约束部分的本构方程的参数精确度，因此该模型可以低成本地扩展到其他不同的流变学实验体系。

## 3.5 PI-GRU 建模总结

在 Giesekus 模型的研究中，本章模拟了小振幅振荡剪切（SAOS）以及大振幅振荡剪切（LAOS）这两种不同的工况。实验结果表明，GRU 的建模效果优于 DNN，这有力地说明 GRU 所捕捉的时间依赖性，不仅仅局限于基于玻尔兹曼叠加原理的线性黏弹

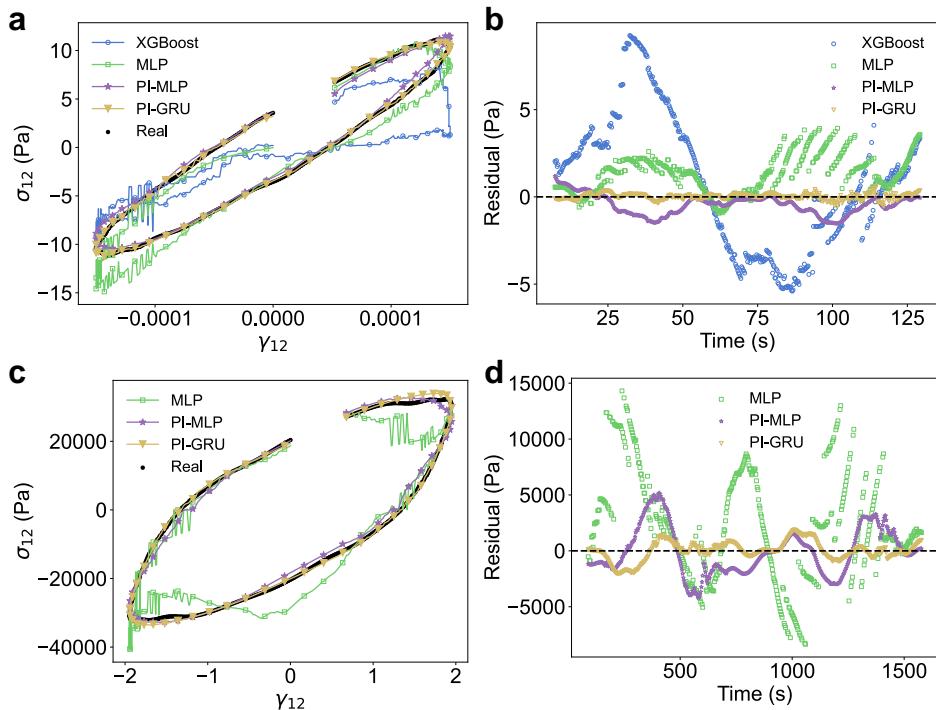


图 3-7 ABE 弹性体的 Lissajous 曲线在不同算法上的预测效果: (a) 小振幅振荡剪切 (SAOS) 测试集真实值与模型预测值的 Lissajous 曲线对比; (b) 小振幅振荡剪切 (SAOS) 测试集真实值与模型预测值的残差图; (c) 大振幅振荡剪切 (LAOS) 测试集真实值与模型预测值的 Lissajous 曲线对比; (d) 大振幅振荡剪切 (LAOS) 测试集真实值与模型预测值的残差图

Figure 3-7 Prediction performance comparison of Lissajous curves for ABE elastomer using different algorithms: (a) Comparison of Lissajous curves between true values and model predictions on small-amplitude oscillatory shear (SAOS) test set; (b) Residual plot of true values and model predictions on SAOS test set; (c) Comparison of Lissajous curves between true values and model predictions on large-amplitude oscillatory shear (LAOS) test set; (d) Residual plot of true values and model predictions on LAOS test set

性的时间特性，还能够涵盖更为复杂的非线性关系，而 Giesekus 模型下 GRU 对第一法向应力差  $N_1$  的预测效果也比  $\sigma_{12}$  差。为了进一步探究 GRU 在真实数据集上的表现，本章选取了 ABE 弹性体的流变学实验数据集进行验证。使用简答 Maxwell 模型作为物理约束残差方程，设计物理信息约束的门控循环单元（PI-GRU）。通过将 PI-GRU 模型与 XGBoost、MLP 以及 PI-MLP 等模型进行对比，结果显示 PI-GRU 模型在测试集上

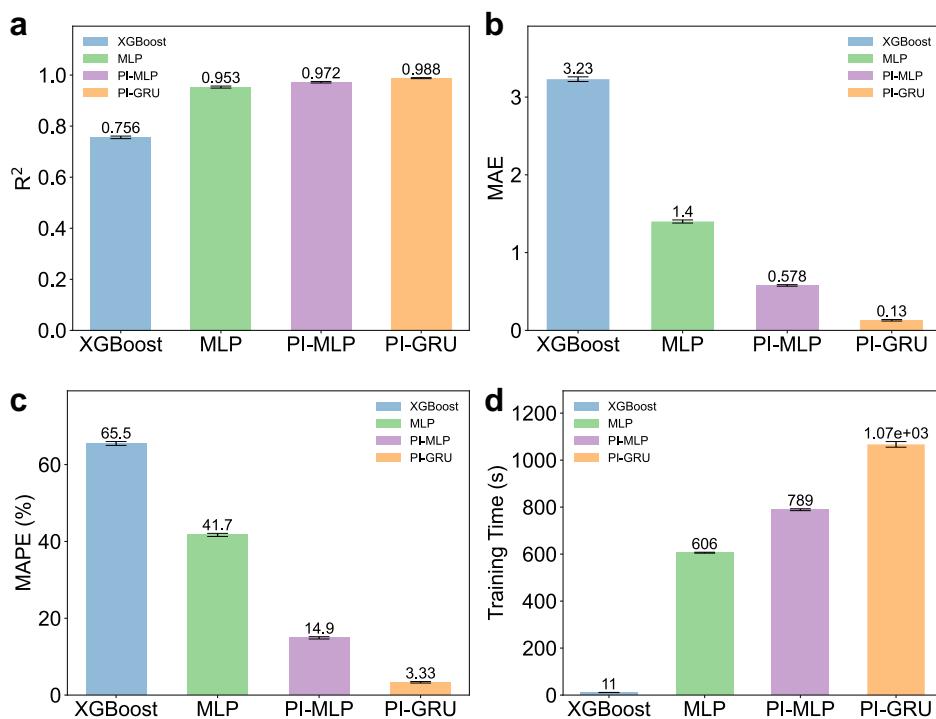


图 3-8

Figure 3-8 不同算法在 ABE 弹性体 SAOS 实验 Lissajous 曲线上的预测指标对比: (a) 决定系数 ( $R^2$ ), (b) 平均绝对误差 (MAE), (c) 平均绝对百分比误差 (MAPE), (d) 计算训练时间

Comparative Evaluation of Predictive Metrics for ABE Elastomer's Lissajous Curves in SAOS Experiments Across Algorithms: (a) Coefficient of Determination ( $R^2$ ), (b) Mean Absolute Error (MAE), (c) Mean Absolute Percentage Error (MAPE), (d) Computational Training Time

表现最佳。特别值得注意的是, 即使在物理约束采用最简单的 Maxwell 模型的情况下, PI-GRU 模型仍然能够很好地泛化到非线性区间的 LAOS 数据, 这充分证明了该模型在处理复杂流变学数据时的优越性。

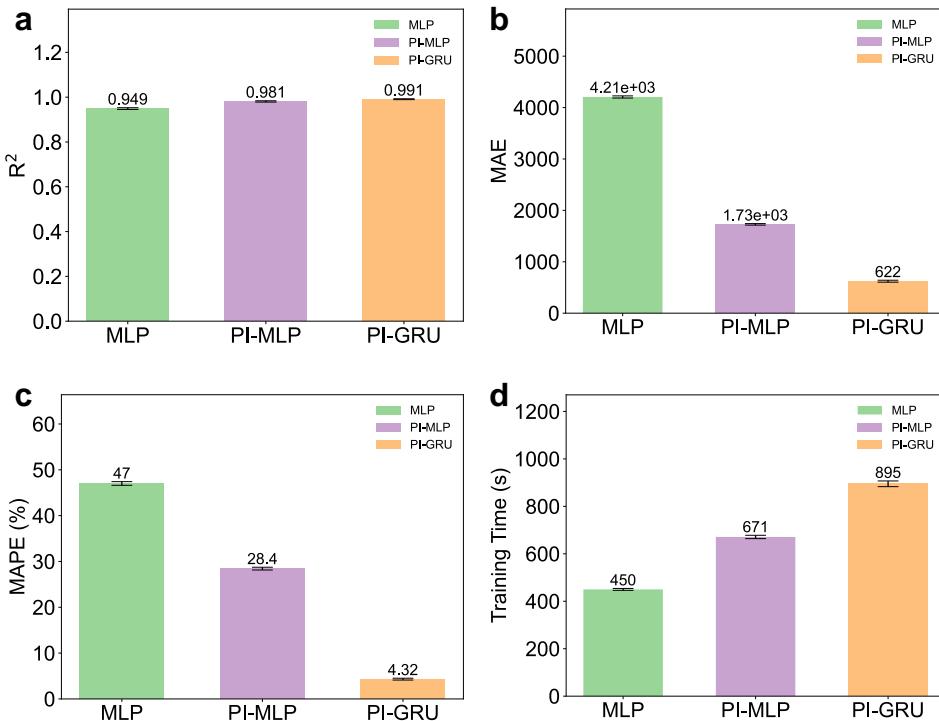


图 3-9

Figure 3-9 不同算法在 ABE 弹性体 LAOS 实验 Lissajous 曲线上的预测指标对比: (a) 决定系数 ( $R^2$ ), (b) 平均绝对误差 (MAE), (c) 平均绝对百分比误差 (MAPE), (d) 计算训练时间

Comparative Evaluation of Predictive Metrics for ABE Elastomer's Lissajous Curves in LAOS Experiments Across Algorithms: (a) Coefficient of Determination ( $R^2$ ), (b) Mean Absolute Error (MAE), (c) Mean Absolute Percentage Error (MAPE), (d) Computational Training Time

## 第四章 物理信息-生成式混合流变学本构建模方法研究

### 4.1 引言

流变学本构建模长期面临实验数据与理论模型间的鸿沟。传统方法常基于理想化假设构建本构方程，虽能获得形式优美的数学模型，却难以准确表征真实材料在复杂工况下的非线性响应。基于前章通过 GRU 网络对流变数据的时序建模基础，本章提出物理信息驱动与生成式建模融合的新范式，通过融合频率域的真实实验数据与物理守恒定律的强约束机制，构建兼具高预测精度与可解释性的智能建模框架。

当前流变学本构建模领域存在两大核心矛盾，第一个矛盾是传统物理模型在描述真实材料复杂流变行为时，常因过度简化导致预测偏差累积，而纯数据驱动的黑箱模型虽能实现高精度拟合，却丧失了物理可解释性这一流变学研究的本质诉求，同时由于流变学数据往往依赖于各类流变仪的实验测量，所以优质的流变学数据是稀有的，本文前一章使用数值模拟方法可以生成大量模拟数据，但是这在真实实验上不可以复刻。Mahmoudabadbozchelou 提出的一类 PINN 方法，通过对实验数据进行本构方程的参数拟合，然后借用拟合后的方程进行数值模拟生成大量低保真数据，之后使用高保真数据（原本的实验数据）和低保真数据（模拟数据）联合进行深度学习训练，在一定程度上缓解了数据不足问题，同时由于低保真数据本身是符合经典本构方程的，具有一定物理约束意义。本章参考了 Mahmoudabadbozchelou 的方法，来对一类黏弹性聚合物凝胶的流变学数据：储存模量 ( $G'$ )、损耗模量 ( $G''$ ) 和损耗角正切 ( $\tan\delta$ ) 进行 PINN 建模，尝试构建材料制备参数、频率到流变学性质的模型映射。在 Mahmoudabadbozchelou 的基础模型中，本文引入了几个优化，首先是通过引入可学习的损失函数权重，使得模型在训练过程中，能够根据训练数据中不同参数的分布情况，动态调整损失函数的权重，从而提高模型泛化能力，其次在特征工程方面，引入注意力特征融合的方法，进一步解决实验数据特征稀疏的问题。

第二个矛盾是材料逆向设计过程中，基于试错法的实验优化模式耗费大量资源，而现有生成模型在流变学参数空间的可控生成方面缺乏物理约束，导致生成结果常偏离热力学可行域。近年来，许多研究者聚焦于材料制备参数到流变学性质的建模，但是实际应用中，根据已知的期望的材料性质，通过反向建模来确定这种材料应该如何制备也是非常重要。考虑到多组分材料体系的流变指纹具有高维参数空间中的低维流形特性，变分自编码器 (VAE) 的潜空间建模应用于流变学的反向建模是可行的，本章使用了 VAE

类模型中的条件变分自编码器（CVAE）来进行反向建模，探究定制备参数到流变学特性的可控映射。

综上所述，本章创新性地将物理信息神经网络（PINN）与条件变分自编码器（CVAE）进行耦合，建立双向建模通道：在正向建模路径中，通过将已知的本构方程编码为 PINN 的软约束条件，有效解决了小样本实验数据下的过拟合问题；在逆向设计路径中，利用 CVAE 的潜空间探索能力，结合流变响应的物理可行性验证模块，实现了从目标流变特性到材料制备参数的可控映射。这种混合建模策略不仅突破了传统方法在数据-物理融合层面的技术壁垒，更重要的是构建了闭环的材料设计-验证工作流，为智能流变学提供一定方法论基础。

## 4.2 实验设计

### 4.2.1 PINN 数据预处理

#### 4.2.1.1 实验数据来源

本章所有训练和测试的实验数据是基于 Huang 等人的工作<sup>[117]</sup>。Huang 等人介绍了一种将粘性聚合物流体（PBA）注入弹性网络中，形成聚合物流体凝胶（PFGs），以实现宽频带可控超高能量耗散的策略，如图4-1所示。在实验过程中，Huang 等人对不同分子量的 PBA 流体，注入不同分子量 PBA 制备的 PFGs，分别进行了流变学实验，得到了对应材料特定频率下的储存模量、损耗模量和损耗角正切等数据。本章采用他们的实验数据进行具体的深度学习建模。

#### 4.2.1.2 实验数据分类

首先本节对真实实验数据进行分类，第一类为单 PBA 流体数据，为不同分子量的 PBA 流体的流变学数据，特征包括：聚合度（DP）、数均分子量（M<sub>n</sub>）、分散指数（PDI）、频率（ $\omega$ ），标签包括：储存模量（G'）、损耗模量（G''）和损耗角正切（tan $\delta$ ），第二类为单分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据，特征和标签和第一类单 PBA 流体数据一致，第三类为多分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据，特征包括：不同分子量的 PBA 特征和组分信息（M<sub>n*i*</sub>、PDI<sub>*i*</sub>、DP<sub>*i*</sub>、 $\phi_i$ , *i* = 1, 2, 3）、频率（ $\omega$ ），标签包括：储存模量（G'）、损耗模量（G''）和损耗角正切（tan $\delta$ ）。第三类数据的组分信息见表4-1所示。

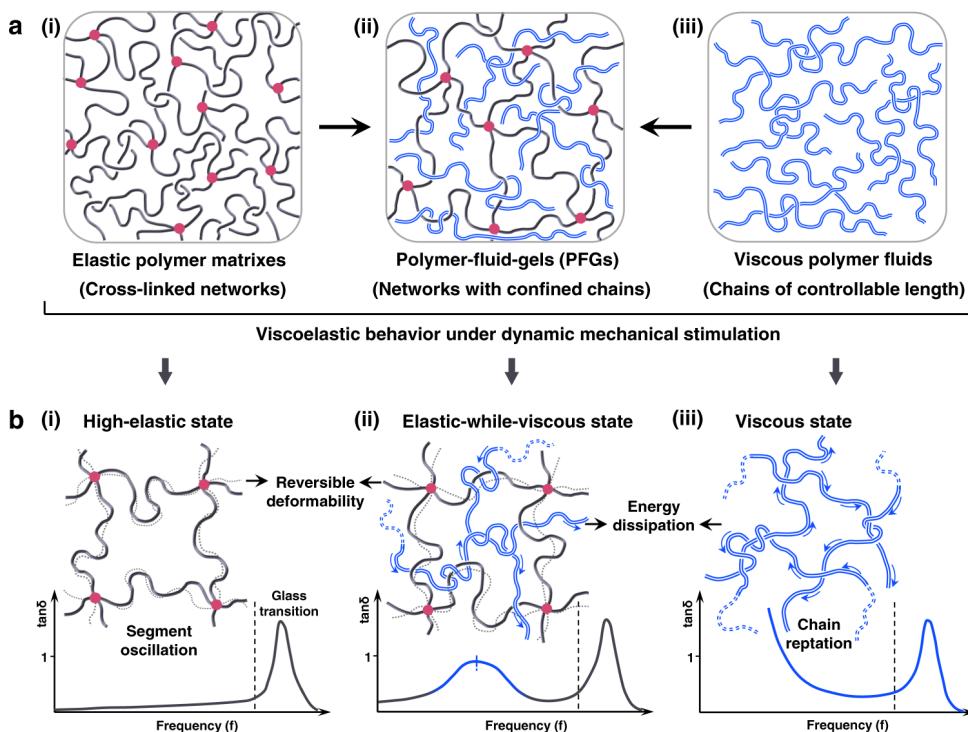


图 4-1 Huang 等人制备的 PFGs 示意图

Figure 4-1 Schematic illustration of the PFGs prepared by Huang et al.

表 4-1 多分子量 PBA 流体制备 PFGs 的配比参数表

Table 4-1 Formulation Parameters of Multi-MW PBA Fluids for PFGs

实验分组	$\phi_{PBA}(\%)$
	Mn(20k,35k,52k,78k,102k,152k)
PFG-b1	(0,20,0,0,30,10)
PFG-b2	(0,30,0,30,0,0)
PFG-b3	(20,0,0,40,0,0)
PFG-b4	(10,0,20,30,0,0)
PFG-b5	(0,0,30,0,0,30)
PFG-b6	(0,0,20,0,0,40)

#### 4.2.1.3 低保真数据生成

分类后，本节使用 Doi-Edwards 模型来进行低保真数据拟合。首先假设实验数据可以使用 Doi-Edwards 模型描述。Doi-Edwards 模型的频率域公式可以通过时间域公式进

行傅里叶变换得到公式(4-1)和公式(4-2)

$$G'(\omega) = G_0 \frac{8}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{p^2} \frac{1}{1 + (\omega\tau_d/p^2)^2} \quad (4-1)$$

$$G''(\omega) = G_0 \frac{8}{\pi^2} \sum_{p=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{p^2} \frac{\omega\tau_d/p^2}{1 + (\omega\tau_d/p^2)^2} \quad (4-2)$$

本节使用 Python 的 `scipy.optimize` 库对真实数据进行最小二乘法的拟合，为了简化运算设置公式中的  $p$  为 1，得到 Doi-Edwards 模型的拟合参数。之后根据拟合后的方程，通过 Numpy 库生成频率-模量数据，用于后续的 PINN 模型训练，这一部分数据被称为低保真数据（LF-data）。

#### 4.2.1.4 数据集划分

本节将数据集划分为训练集、验证集和测试集，其中训练集和验证集用于模型训练，测试集用于模型验证。对于 PBA 流体数据取 DP 值为 162 的数据为测试集，其余数据为训练集和验证集，训练集和验证集按照 9:1 的比例划分。对于单分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据，取 DP 值为 162 的数据为测试集，其余数据为训练集和验证集，训练集和验证集按照 9:1 的比例划分。对于多分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据，取 PFG-b2 组（分组见表4-1）的数据为测试集，其余数据为训练集和验证集，训练集和验证集按照 9:1 的比例划分。

### 4.2.2 PINN 模型训练

#### 4.2.2.1 损失函数构建

本节使用 PINN 模型对低保真数据（LF-data）和高保真数据（HF-data）进行训练。模型架构包含两个多层感知机（MLP）网络：低保真网络  $\mathbf{M}_{low}$  和高保真网络  $\mathbf{M}_{high}$ 。训练流程如下：

首先低保真数据  $X_{low}$  首先通过低保真网络得到预测值  $\hat{y}_{low}$ ，与真实低保真标签  $y_{low}$  计算物理损失。之后高保真数据  $X_{high}$  通过低保真网络得到中间特征  $f_{mid}$ ，将  $f_{mid}$  与  $X_{high}$  拼接后输入高保真网络，得到最终预测值  $\hat{y}_{high}$ 。 $\hat{y}_{high}$  与真实高保真标签  $y_{high}$  计算数据损失，并与物理损失拼接得到总损失。

具体计算过程可表示为公式(4-3)和公式(4-4)：

$$\hat{y}_{low} = \mathbf{M}_{low}(X_{low}) \quad (4-3)$$

$$\hat{y}_{high} = \mathbf{M}_{high}(X_{high}, \mathbf{M}_{low}(X_{high})) \quad (4-4)$$

本节使用 Python 语言和 PyTorch 深度学习框架实现模型训练。在优化策略方面，采用 Adam 优化器进行参数更新，并引入基于性能指标的学习率调度机制实现自适应学习率调整。为获得最优的模型结构，本文结合网格搜索和随机搜索两种方法对关键超参数进行系统调优，包括网络层数、每层神经元数量、初始学习率、正则化强度、训练轮次以及批次大小等。

在损失函数选择上，考虑到实验数据中可能存在的异常值和噪声，本文采用鲁棒性较好的 Huber 损失函数，其定义如公式(4-5)所示：

$$L_\delta(y, \hat{y}) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2 & \text{if } |y - \hat{y}| \leq \delta \\ \delta|y - \hat{y}| - \frac{1}{2}\delta^2 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4-5)$$

Huber 损失函数通过参数  $\delta$  实现对异常值敏感度的动态调节：当  $\delta$  趋近于 0 时，其行为接近平均绝对误差 (MAE)，表现出对异常值的强鲁棒性；当  $\delta$  较大时，其特性近似于均方误差 (MSE)，保持了较高的训练效率。这种自适应特性使得模型能够在保持训练稳定性的同时，有效应对实验数据中的噪声干扰。

本节在基本的 PINN 损失函数构建公式中添加可学习的权重  $\alpha$ ，如公式(4-6)，通过权重  $\alpha$  平衡损失强度，适应不同的训练任务。

$$L_{PINN} = \underbrace{L_\delta(y_{low}, \hat{y}_{low})}_{\text{低保真物理损失}} + \alpha \cdot \underbrace{L_\delta(y_{high}, \hat{y}_{high})}_{\text{高保真数据损失}} \quad (4-6)$$

#### 4.2.2.2 特征融合细节

本章中 4.2.1 中提到的第一类和第二类数据的 PINN 训练均直接按照 PINN 方案进行训练，第三类数据涉及不同分子量的分子量和组分数据，在训练时分别采用哈达玛积特征融合和注意力特征融合的方法进行特征融合，再进行训练。哈达积融合方法如公式(4-7)，

$$\mathbf{Mn} \circ \mathbf{w} = \begin{bmatrix} M_{n_1} \cdot w_1 \\ M_{n_2} \cdot w_2 \\ \vdots \\ M_{n_k} \cdot w_k \end{bmatrix} \quad (4-7)$$

即将不同的分子量与其对应的组分进行哈达玛积融合，这有助于模型更好地理解特征间的关系，优化训练效果。该操作的本质是构建流变学特征基元，其中高分子链的松弛行为同时受  $M_n$ (链长) 和  $w_i$ (浓度) 调控。

公式(4-8)表示经过哈达玛积融合后的结果，根据  $\mathbf{H}$  按照公式(4-9)到(4-11)计算  $\mathbf{Q}$ 、 $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{V}$ 。 $\mathbf{Q}(\text{Query})$  是编码目标流变性能的特征查询， $\mathbf{K}(\text{Key})$  表征各组分分子量分布的“响应指纹”， $\mathbf{V}(\text{Value})$  携带原始流变特征的实际物理量级信息。

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} M_{n_1} \cdot w_1 \\ M_{n_2} \cdot w_2 \\ M_{n_3} \cdot w_3 \end{bmatrix} \quad (4-8)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{W}_q \mathbf{H}, \quad \mathbf{W}_q \in \mathbb{R}^{d \times 3} \quad (4-9)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{W}_k \mathbf{H}, \quad \mathbf{W}_k \in \mathbb{R}^{d \times 3} \quad (4-10)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{W}_v \mathbf{H}, \quad \mathbf{W}_v \in \mathbb{R}^{d \times 3} \quad (4-11)$$

之后使用公式(4-12)计算注意力分数，注意力分数量化了组分间的流变学相互作用，该机制可自动识别关键组分，例如高分子量组分 ( $M_{n_1} > M_{n_2}$ ) 对模量等的主导作用。

$$\text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax} \left( \frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{d}} \right) \mathbf{V} \quad (4-12)$$

最后使用公式(4-13)计算最终的注意力输出。

$$\mathbf{Z} = \text{LayerNorm}(\mathbf{H} + \text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V})) \quad (4-13)$$

本节分别使用原始特征的 PINN、哈达玛积特征融合后的 PINN 和注意力特征融合后的 PINN 训练多分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据，得到不同的训练模型。

### 4.2.3 PINN 模型测试

本节对训练模型进行测试，并分析训练结果，对于第一类数据（单 PBA 流体数据）和第二类数据（单分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据），使用 DNN 和 PINN 两种模型分别训练。保存模型后，使用测试数据进行预测，并分析预测结果。绘制真实值-预测值曲线，残差曲线进行定性分析。计算指标：决定系数  $R^2$ 、平均绝对误差 MAE、平均百分比误差 MAPE 和训练时间 Training Time，并绘制指标对比图进行定量分析。

对于第三类数据（多分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据），本节分别使用 DNN、PINN、哈达玛积特征融合后的 PINN 和注意力特征融合后的 PINN 进行训练，对不同的训练模型进行测试，并分析训练结果，具体分析方法同上。

#### 4.2.4 CVAE 反向建模训练

本节使用条件变分自编码器（CVAE）进行反向建模，将 PFG-b4 的数据作为测试集，其余数据为训练集和验证集，训练集和验证集按照 9：1 划分，输入特征改为 [ $\omega$ 、 $G'$ 、 $G''$ 、 $\tan\delta$ ] 序列，输出标签为制备参数： $M_{n_i}$  和  $w_i$ 。

本节使用 Python 的 Pytorch 库编写 CVAE 代码，并使用训练数据进行训练，得到模型参数。CVAE 的损失函数公式如公式(4-14)所示，其中  $x = [w, G', G'', \tan\delta]$ ,  $p = M_{n_i}, w_i'$ 。

$$\mathcal{L}(\theta_E, \theta_D) = \mathbb{E}_{q(\theta_E(z|\mathbf{x}, p))} [\log p_{\theta_D}(\mathbf{x}|z, p)] - D_{KL}(q_{\theta_E}(z|\mathbf{x}, p)||p(z|p)) \quad (4-14)$$

CVAE 的训练模型采用 Adam 优化器来进行优化，采用余弦退火算法自动调整学习率，采用网格搜索算法和随机搜索算法对超参数进行调优，其中超参数包括：隐藏层数、隐藏层节点数、学习率、迭代次数、批次大小，隐藏层激活函数采用 ReLU6 激活函数。

#### 4.2.5 CVAE 反向建模测试

本节通过 CVAE 训练频率-模量序列到组分信息的映射，将训练好后的模型保存。生成测试数据时，首先加载保存的模型参数，并输入目标制备条件  $p = M_{n_i}, w_i'$  作为生成约束；随后从条件先验分布  $p(z|p)$  中采样潜在变量  $z$ （通过重参数化技巧  $z = \mu_p + \epsilon\sigma_p$  实现可导性，其中  $\epsilon$  服从标准正态分布），将其与条件变量  $p$  拼接后输入解码器网络  $p_{\theta_D}(\mathbf{x}|z, p)$ ，生成对应的  $x = [w, G', G'', \tan\delta]$ 。为增强生成多样性，通过潜在空间插值或对条件参数  $p$  施加微小扰动生成 100 个多模态解。

针对生成的多模态解，本节通过多模态分布分析揭示其内在结构特征，采用核密度估计与箱线图结合的小提琴图可视化方法，呈现不同模态下解的密度分布、峰值位置及离散程度。使用残差分析对预测值与理论解的偏离模式进行系统性检验。使用真实数据误差分析，采用平均绝对百分比误差（MAPE）量化多模态解的整体预测精度。

#### 4.2.6 正逆向联合建模

本节将训练好的 PINN 模型和 CVAE 模型进行正逆向联合建模，将 CVAE 生成的组分信息作为 PINN 模型的输入的特征，验证 CVAE 生成的数据对最终的流变学性质参数的预测效果，并分析 CVAE 生成的数据对 PINN 模型预测效果的提升作用，绘制真实组

分特征与 CVAE 生成的数据输入 PINN 模型后预测的流变学性质参数的对比图，并计算 MAPE 指标，进行定量分析。

## 4.3 结果与讨论

### 4.3.1 低保真数据拟合

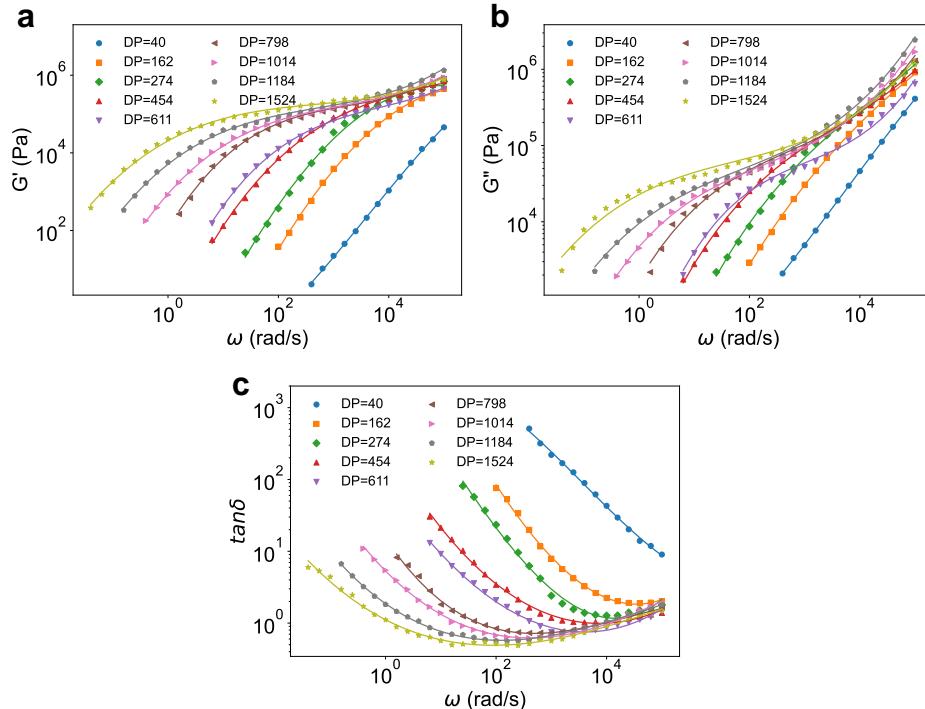


图 4-2 不同 PBA 流体的频率-流变学性质参数数据低保真拟合结果：(a) 不同 DP 值的 PBA 流体的频率-储存模量 ( $\omega$ - $G'$ ) 数据拟合结果；(b) 不同 DP 值的 PBA 流体的频率-损耗模量 ( $\omega$ - $G''$ ) 数据拟合结果；(c) 不同 DP 值的 PBA 流体的频率-损耗角正切 ( $\omega$ - $\tan\delta$ ) 数据拟合结果

Figure 4-2 Low-fidelity fitting results of frequency-rheological property parameter data of different PBA fluids: (a) Fitting results of frequency-storage modulus ( $\omega$ - $G'$ ) data of PBA fluids with different DP values; (b) Fitting results of frequency-loss modulus ( $\omega$ - $G''$ ) data of PBA fluids with different DP values; (c) Fitting results of frequency-loss tangent ( $\omega$ - $\tan\delta$ ) data of PBA fluids with different DP values

本节使用 Python 的 `scipy.optimize` 库对真实数据进行最小二乘法拟合，既定函数为公式(4-1)和(4-2)。首先对 PBA 流体进行拟合，训练数据为不同聚合度 (DP) 的 PBA

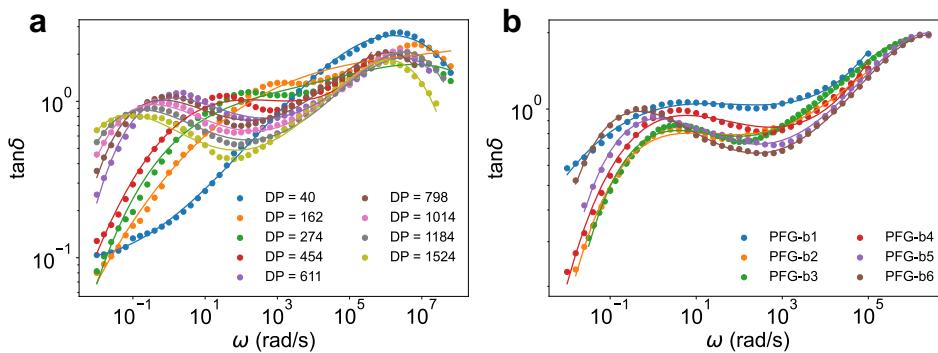


图 4-3

Figure 4-3 不同 PBA 流体组合制备的 PFGs 的频率-流变学性质参数数据低保真拟合结果: (a) 不同 DP 值的 PBA 流体制备的 PFGs 的频率-储存模量 ( $\omega\text{-}G'$ ) 数据拟合结果; (b) 不同 PBA 流体组合制备的 PFGs 的频率-损耗模量 ( $\omega\text{-}G''$ ) 数据拟合结果; (c) 不同 PBA 流体组合制备的 PFGs 的频率-损耗角正切 ( $\omega\text{-}\tan\delta$ ) 数据拟合结果  
Low-fidelity fitting results of frequency-rheological property parameter data of PFGs prepared by different PBA fluid combinations: (a) Fitting results of frequency-storage modulus ( $\omega\text{-}G'$ ) data of PFGs prepared by PBA fluids with different DP values; (b) Fitting results of frequency-loss modulus ( $\omega\text{-}G''$ ) data of PFGs prepared by different PBA fluid combinations;  
(c) Fitting results of frequency-loss tangent ( $\omega\text{-}\tan\delta$ ) data of PFGs prepared by different PBA fluid combinations

流体的频率-储存模量 ( $\omega\text{-}G'$ ) 数据、频率-损耗模量数据 ( $\omega\text{-}G''$ ) 和频率-损耗角正切 ( $\omega\text{-}\tan\delta$ ) 数据，拟合结果如图4-2所示。从拟合曲线来看，不同 PBA 流体的拟合质量较优，拟合曲线和数据点贴合。表4-2展示了低保真数据的回归拟合指标，其中  $g_1$ 、 $g_2$ 、 $g_3$  分别对应不同 PBA 流体的  $\omega\text{-}G'$ 、 $\omega\text{-}G''$  和  $\omega\text{-}\tan\delta$ ，可以看到这三组拟合指标的  $R^2$  指标都大于 0.95，拟合效果优秀。 $g_1$  组的 MAPE 值为 19.72%， $g_2$  组的 MAPE 值为 15.89%， $g_3$  组的 MAPE 值为 12.45%，根据统计学标准，MAPE 值小于 20% 被认为是可接受误差，这三组均在可接受范围，可以用于后续实验。

之后，针对 PBA 流体注入制备的 PFGs 数据，使用最小二乘法进行拟合。图4-3 (a) 展示了不同 DP 值的注入制备的 PFGs 数据的拟合曲线，拟合曲线和数据点贴合，拟合效果较优。图 (a) 对应的定量指标为表4-2的  $g_4$ ， $R^2$  值为 0.985，MAPE 值为 19.91%，均在可接受范围，可以用于后续实验。

图4-3 (b) 展示了多分子量 PBA 注入制备的 PFGs 数据的拟合曲线，其中 b1-b6 是

表 4-2 低保真数据拟合回归指标表

Table 4-2 Regression Metrics of Low-Fidelity Data Fitting

实验分组	R <sup>2</sup>	MAE	MAPE(%)
$g_1$	0.977	456.78	19.72
$g_2$	0.982	2456.23	15.89
$g_3$	0.964	5.17	12.45
$g_4$	0.985	0.25	19.91
$g_5$	0.962	0.11	9.89

不同的 PBA 流体组合，具体组合如表4-1所示。拟合曲线显示拟合效果优秀，定量指标如表4-2的  $g_5$  所示，R<sup>2</sup> 值为 0.962，MAPE 值为 9.89%，误差范围在可接受范围，可以用于后续实验。

### 4.3.2 单 PBA 流体本构建模

本节首先对不同分子量的单 PBA 流体进行深度学习本构建模，分别建模预测储存模量 (G')、损耗模量 (G'') 和损耗角正切 ( $\tan\delta$ )。图4-4为 G' 的预测结果，图4-4 (a) 为真实-预测值曲线，从曲线图可以看到 PINN 建模的预测曲线相比 DNN 建模的预测曲线更为贴近真实数据点，拟合效果更佳。图4-4 (b) 为残差图，PINN 预测值与真实值的残差总体更为贴近 0 刻度线，极值范围相比 DNN 更小。根据图4-4，可以定性分析出 PINN 相比 DNN 在此项任务上具有更好的泛化预测效果。

图4-5为 G'' 的预测结果，图4-5 (a) 为真实-预测值曲线。从真实-预测值曲线 (图4-5 (a)) 可观察到 PINN 建模的预测值序列与真实值分布趋势呈现更高程度的吻合，而 DNN 的预测曲线在低频率段明显偏高，拟合效果欠佳。进一步通过残差分布图 (图4-5 (b)) 进行评估，发现 PINN 模型的残差绝对值显著低于 DNN 模型的残差绝对值，且 PINN 模型的残差点分布更为集中，更为邻近 0 刻度线。综上所述，可以定性认为在此项任务中，PINN 模型的泛化预测效果更佳。

图4-6为  $\tan\delta$  的预测结果，图4-6 (a) 为真实-预测值曲线。从真实-预测值曲线 (图4-6(a)) 可观察到 PINN 建模的预测值序列与真实值分布趋势呈现更高程度的吻合，相较于传统深度神经网络 (DNN) 建模产生的预测曲线展现出更优的轨迹跟踪特性。进一步通过残差分布图 (图4-6(b)) 进行评估，两种模型的预测残差虽均呈现以负偏差为

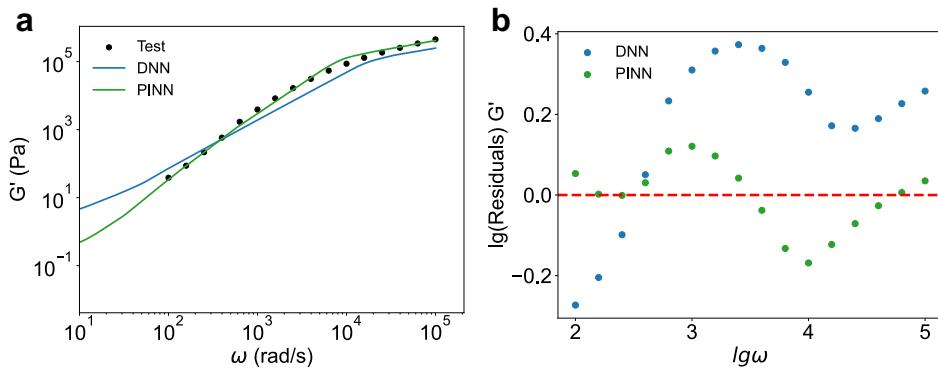


图 4-4 不同分子量的 PBA 流体 PINN 和 DNN 建模的  $G'$  预测结果: (a) 真实-预测值曲线; (b) 残差图

Figure 4-4 Prediction results of  $G'$  of PBA fluids with different DP values using PINN and DNN: (a) Real-predicted value curve; (b) Residual diagram

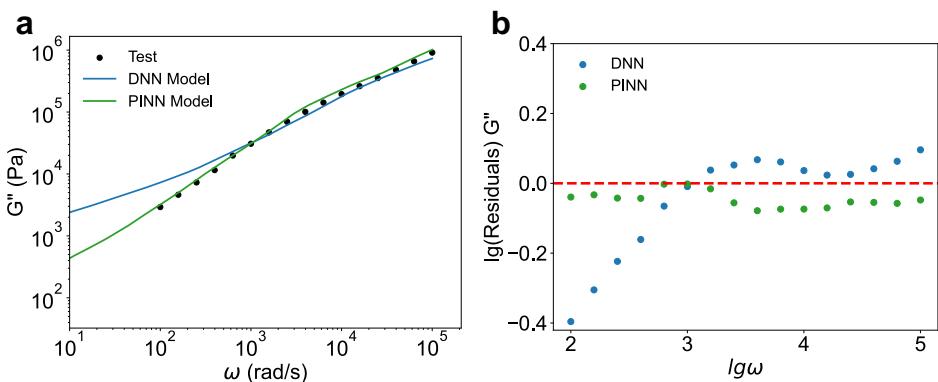


图 4-5 不同分子量的 PBA 流体 PINN 和 DNN 建模的  $G''$  预测结果: (a) 真实-预测值曲线; (b) 残差图

Figure 4-5 Prediction results of  $G''$  of PBA fluids with different DP values using PINN and DNN: (a) Real-predicted value curve; (b) Residual diagram

主的分布特征，但 PINN 模型的残差绝对值显著低于 DNN 模型的残差绝对值，极值绝对值较小。为了进一步定量分析 PBA 流体的模量数据 PINN 建模效果，本节计算测试集的  $R^2$ 、MAE、MAPE、Training Time。图4-7为两个模型在  $G'$  预测、 $G''$  预测和  $\tan\delta$  预测三种不同任务上的指标对比图。从图 4-7 可以看出，PINN 模型在  $G'$ 、 $G''$  和  $\tan\delta$  三个任务上的  $R^2$  均略高于 DNN 模型。此外，PINN 模型的 MAE 值在所有任务中均小于 DNN 模型，而 MAPE 值均小于 10%，属于较小误差范围。相比之下，DNN 模型的 MAPE 值均大于 10%，表明其误差较大。这些结果表明，PINN 模型在  $G'$ 、 $G''$  和  $\tan\delta$

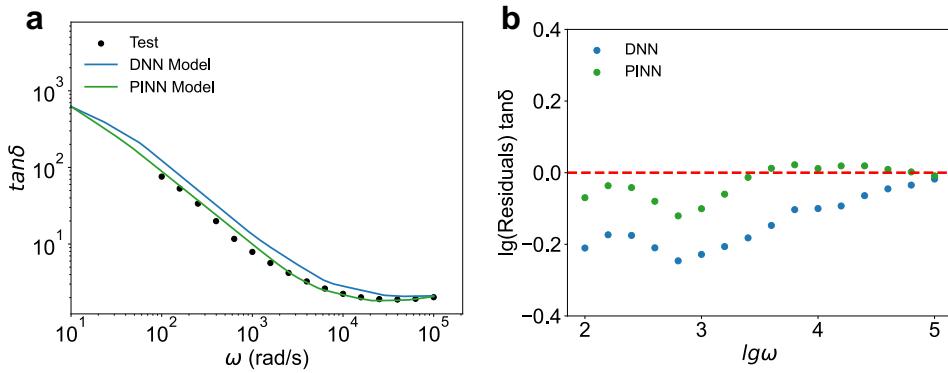


图 4-6 不同分子量的 PBA 流体 PINN 和 DNN 建模的  $\tan\delta$  预测结果: (a) 真实-预测值曲线; (b) 残差图

Figure 4-6 Prediction results of  $\tan\delta$  of PBA fluids with different DP values using PINN and DNN: (a) Real-predicted value curve; (b) Residual diagram

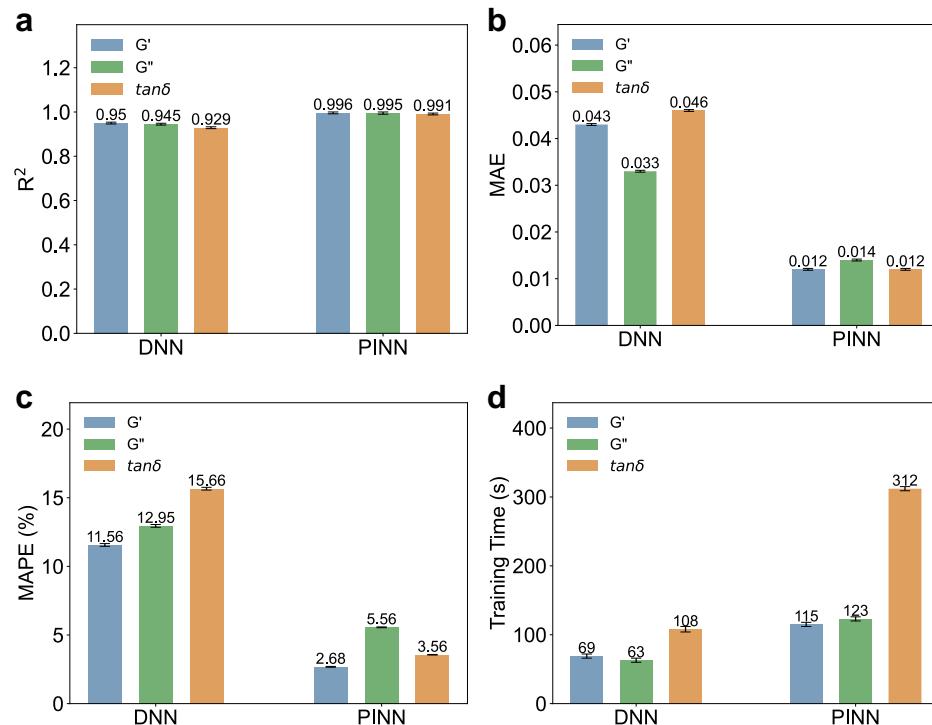


图 4-7 不同分子量的 PBA 流体 PINN 和 DNN 建模的指标对比图: (a)  $R^2$  对比; (b) MAE 对比; (c) MAPE 对比; (d) 训练时间对比

Figure 4-7 Metrics comparison of PINN and DNN modeling for PBA fluids with different molecular weights: (a)  $R^2$  comparison; (b) MAE comparison; (c) MAPE comparison; (d) Training time comparison

三个任务上均具有更低的误差。然而，PINN 模型的训练时间显著更长，约为 DNN 模型的 2-3 倍。

这种差异表明 PINN 通过嵌入物理守恒方程作为正则化约束，有效抑制了 DNN 模型因纯数据驱动导致的过拟合现象，其残差分布的紧致性和对称性改善印证了物理先验知识对模型泛化能力的提升作用。综合可视化分析与统计指标可知，PINN 框架在本研究涉及的偏微分方程反演任务中，通过融合物理机理与数据特征的双重驱动，实现了比传统数据驱动范式更优的泛化预测性能。

#### 4.3.3 单组分 PBA 注入的 PFGs 本构建模

本节对第二类数据，即单一分子量 PBA 注入制备的 PFGs 进行深度学习本构建模，探究在不同分子量 PBA 注入的 PFGs 上，PINN 模型与 DNN 模型的性能对比。图4-8为两种算法模型对这类数据的预测性能对比。图4-8（a）为真实值-预测值曲线，这里对比的是  $\tan\delta$  的预测结果。从图中可以看出，PINN 模型的预测曲线与真实值曲线更为贴近，拟合效果更佳。图4-8（b）为残差图，PINN 模型的残差绝对值显著低于 DNN 模型的残差绝对值，PINN 的残差更为邻近 0 刻度线。综上所述，可以定性认为在此项任务中，PINN 模型的泛化预测效果更佳。为了进一步定量分析单组分 PBA 注入的 PFGs 数据的

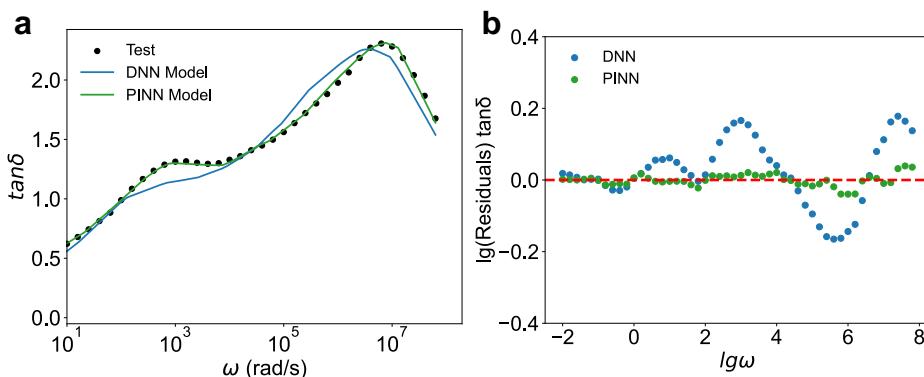


图 4-8 单分子量 PBA 注入的 PFGs 数据 PINN 和 DNN 建模的  $\tan\delta$  预测结果：(a) PINN 和 DNN 在测试集上的预测值与真实值对比曲线；(b) PINN 和 DNN 在测试集上的预测值残差图

Figure 4-8 Prediction results of  $\tan\delta$  of PFGs prepared by single molecular weight PBA injection using PINN and DNN modeling: (a) Comparison curves of predicted vs. true values for PINN and DNN on test set; (b) Residual plots of predicted values for PINN and DNN on test set

PINN 建模效果，本节计算测试集的  $R^2$ 、MAE、MAPE、Training Time。图4-9为两个模型  $\tan\delta$  预测的指标对比图。从图中可以看出，PINN 模型在该任务上的  $R^2$  略低于 DNN 模型。在 MAE 指标上，PINN 为 0.012，DNN 为 0.071，PINN 的 MAE 值相比 DNN 降低了 83.38%。MAPE 指标方面，PINN 为 0.03%，DNN 为 8.59%，相差近 3 个数量级别。这里 PINN 模型的  $R^2$  值意外地低可能是因为 PINN 引入的物理约束可能降低了模型对训练数据的过拟合程度，但模型的泛化能力和实际预测精度（MAPE）更好这些结果表明，PINN 模型在预测单组分 PBA 注入的 PFGs 流变性能时具有更高的准确性和稳定性。然而，与前文类似，PINN 模型的训练时间显著长于 DNN 模型，大约是后者的 5 倍，这是由于物理约束的引入增加了计算复杂度。综上所述，PINN 模型在单组分 PBA 注入的

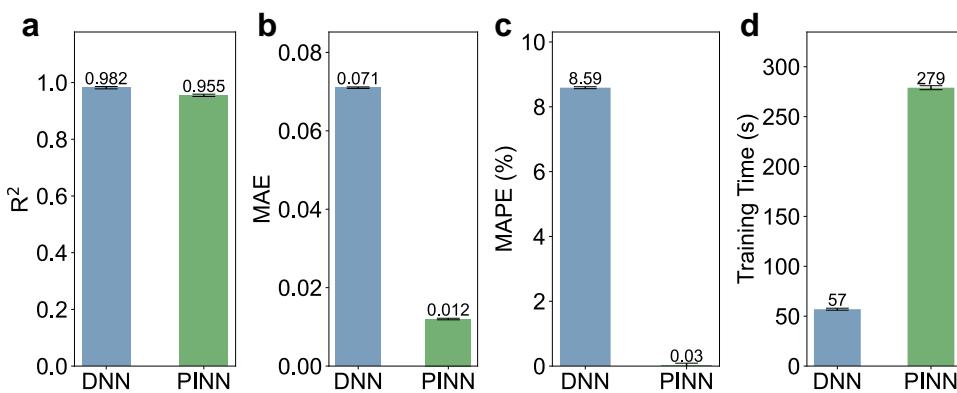


图 4-9 单分子量 PBA 注入的 PFGs 数据 PINN 和 DNN 建模的  $\tan\delta$  预测指标对比图：(a)  $R^2$  对比；(b) MAE 对比；(c) MAPE 对比；(d) 训练时间对比

Figure 4-9 Comparison of  $R^2$ , MAE, MAPE, and Training Time metrics of PINN and DNN for  $\tan\delta$  prediction of PFGs prepared by single molecular weight PBA injection: (a)  $R^2$  comparison; (b) MAE comparison; (c) MAPE comparison; (d) Training Time comparison

PFGs 数据的建模预测中展现出显著优势。从定性分析角度来看，PINN 模型生成的预测曲线与实验数据点更为贴合，残差分布更加集中且接近零值。从定量分析的角度来看，尽管 PINN 的  $R^2$  指标略低于 DNN 模型，但在 MAE 和 MAPE 这两个更能反映实际预测精度的指标上，PINN 模型都取得了显著优势。特别是在 MAPE 指标上，PINN 与 DNN 指标差近 3 个数量级。这表明 PINN 通过引入物理约束，有效抑制了过拟合现象，提高了模型的泛化能力和预测准确性。然而需要注意的是，由于引入物理约束增加了计算复杂度，PINN 模型的训练时间约为 DNN 模型的 5 倍，这是可以预见的成本增加。

#### 4.3.4 多组分 PBA 注入的 PFGs 本构建模

上一节研究了单组分 PBA 注入的 PFGs 数据建模，验证了 PINN 模型在处理简单制备参数特征（单一分子量）时，通过引入物理约束能够有效提升模型的泛化能力。本节将进一步探讨 PINN 模型在多组分 PBA 注入的 PFGs 数据上的表现，研究其在处理复杂制备参数特征（多分子量组合）时的泛化性能，以期为实际应用提供更有价值的参考。图4-10为多组分 PBA 注入的 PFGs 数据建模结果，图4-10 (a) 为真实值-预测值曲

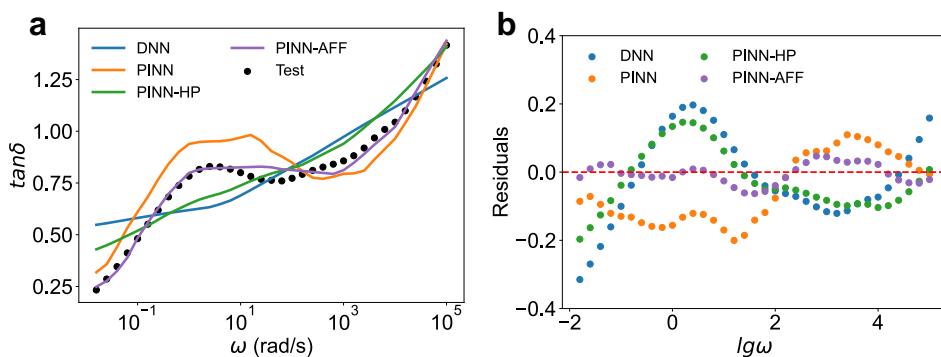


图 4-10 多组分 PBA 注入制备的 PFGs 数据不同算法建模的  $\tan\delta$  预测结果：(a) 不同算法在测试集上的预测值与真实值对比曲线；(b) 不同算法在测试集上的预测值残差图

Figure 4-10 Prediction results of  $\tan\delta$  of PFGs prepared by multiple molecular weight PBA injection using different algorithms: (a) Comparison curves of predicted vs. true values on test set; (b) Residual plots of predicted values on test set

线，图4-10 (b) 为残差图。本项预测建模任务一共使用 4 组不同的算法建模，分别是普通 DNN、普通 PINN、采用哈达玛积特征融合的 PINN (PINN-HP) 和采用注意力特征融合的 PINN (PINN-AFF)。图4-10显示 PINN-AFF 的预测效果最佳，预测曲线与真实值曲线最为贴近，残差分布最为集中且接近 0 刻度线。而其他算法模型的预测存在不同类型的偏差。

为了进一步定量分析多组分 PBA 注入的 PFGs 数据的 PINN 建模效果，本节计算了测试集的  $R^2$ 、MAE、MAPE 和训练时间等评价指标。图4-11展示了 4 种不同算法模型在  $\tan\delta$  预测任务上的性能对比。从图中可以看出，在所有评价指标上，注意力特征融合的 PINN (PINN-AFF) 模型均表现最佳，其次是哈达玛积特征融合的 PINN (PINN-HP) 模型，再次是普通 PINN 模型，而传统 DNN 模型的表现最差。这一结果表明，引入特征融合机制能够有效提升 PINN 模型的预测性能，其中基于注意力机制的特征融合方

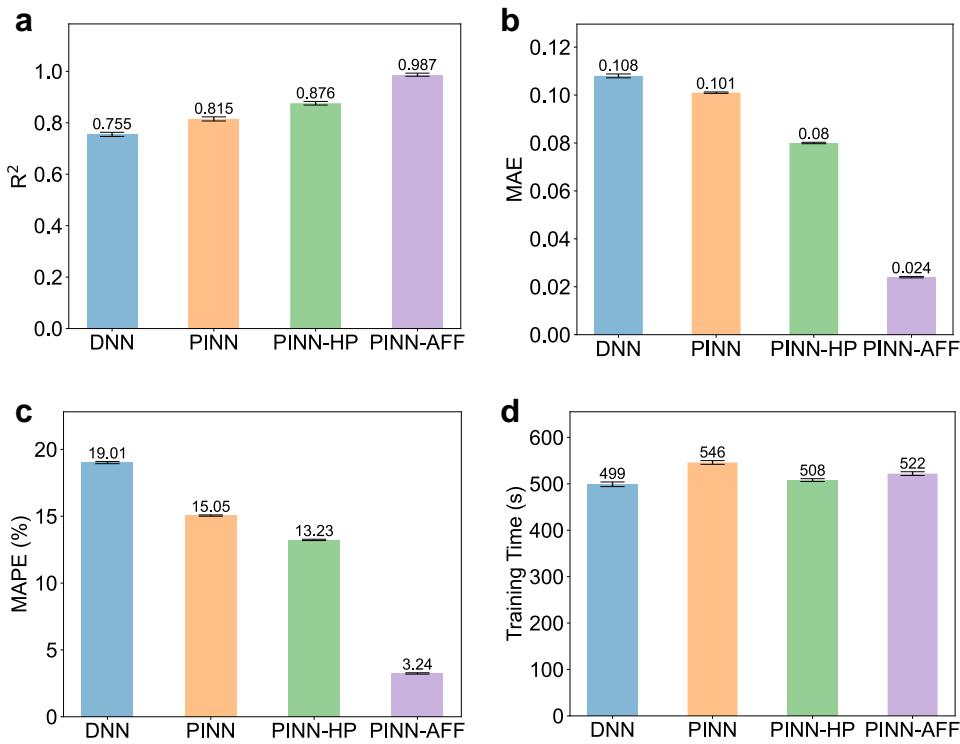


图 4-11 多组分 PBA 注入制备的 PFGs 数据不同算法建模的  $\tan\delta$  预测指标对比图: (a)  $R^2$  对比; (b) MAE 对比; (c) MAPE 对比; (d) 训练时间对比

Figure 4-11 Comparison of  $R^2$ , MAE, MAPE, and Training Time metrics of PINN and DNN for  $\tan\delta$  prediction of PFGs prepared by multiple molecular weight PBA injection: (a)  $R^2$  comparison; (b) MAE comparison; (c) MAPE comparison; (d) Training Time comparison

案尤为有效。从时间指标上看, PINN 的训练时间略大于 DNN, 这与之前的实验一致, PINN-HP 的训练时间略小于 PINN, 这是因为 PINN-HP 通过将分子量和组分含量特征融合减少了总的特征数量, 减少了训练参数的数量。PINN-AFF 的训练时间又略大于 PINN-HP, 这是因为 PINN-AFF 引入了注意力机制, 增加了计算复杂度。

综合图4-10和图4-11的分析结果可以看出, 在处理特征数量较多且特征之间存在复杂物理关系的情况下, 普通 PINN 模型的学习泛化能力相对有限。针对这一问题, 本研究提出了两种改进方案。首先, 哈达玛积特征融合的 PINN (PINN-HP) 模型通过将分子量和组分含量特征进行哈达玛积运算进行特征融合, 这种方式相当于为模型预设了特征之间的物理关联, 从而提升了模型的预测效果。在此基础上, 注意力特征融合的 PINN (PINN-AFF) 模型进一步引入了注意力机制, 对不同分子量与组分含量融合后的联合特征进行注意力加权。这种机制能够有效学习不同高分子链段之间的相互作用关系, 通过

注意力分数定量描述组分间的流变学相互作用强度，并能自动识别关键组分的影响程度，例如能够捕捉到高分子量组分对整体流变学性能的主导作用。实验结果表明，这两种改进方案都显著提升了模型性能，其中 PINN-AFF 模型取得了最优的预测效果。

#### 4.3.5 CVAE 组分预测的多模态解分析

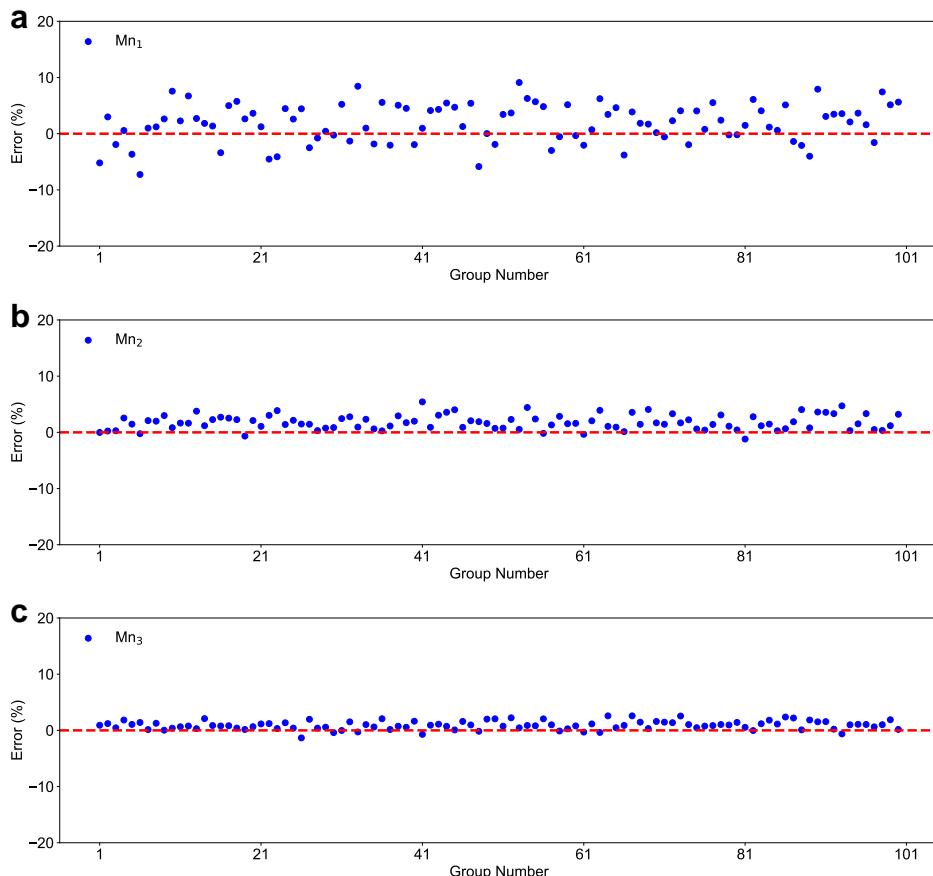


图 4-12 CVAE 生成的 100 组多模态解中不同分子量组分  $Mn_1$ 、 $Mn_2$ 、 $Mn_3$  的残差分布：(a)  $Mn_1$  残差分布；(b)  $Mn_2$  残差分布；(c)  $Mn_3$  残差分布

Figure 4-12 Residual distributions of 100 multimodal solutions generated by CVAE for different molecular weight components  $Mn_1$ ,  $Mn_2$ ,  $Mn_3$ : (a) Residual distribution of  $Mn_1$ ; (b) Residual distribution of  $Mn_2$ ; (c) Residual distribution of  $Mn_3$

本节探索了使用 CVAE 模型从材料的流变学性质反向预测其组分配比的可行性。基于训练完成的生成模型，我们输入目标流变学参数  $[\omega, G', G'', \tan\delta]$ ，生成 100 组多模态解，并对生成结果进行系统的残差分析。

图4-12展示了分子量参数  $Mn$  的残差分布。结果表明，三种分子量组分  $Mn_1$ 、 $Mn_2$ 、 $Mn_3$  的残差均呈现正态分布特征，最大偏差约为 10%，处于可接受范围内。残差大小依

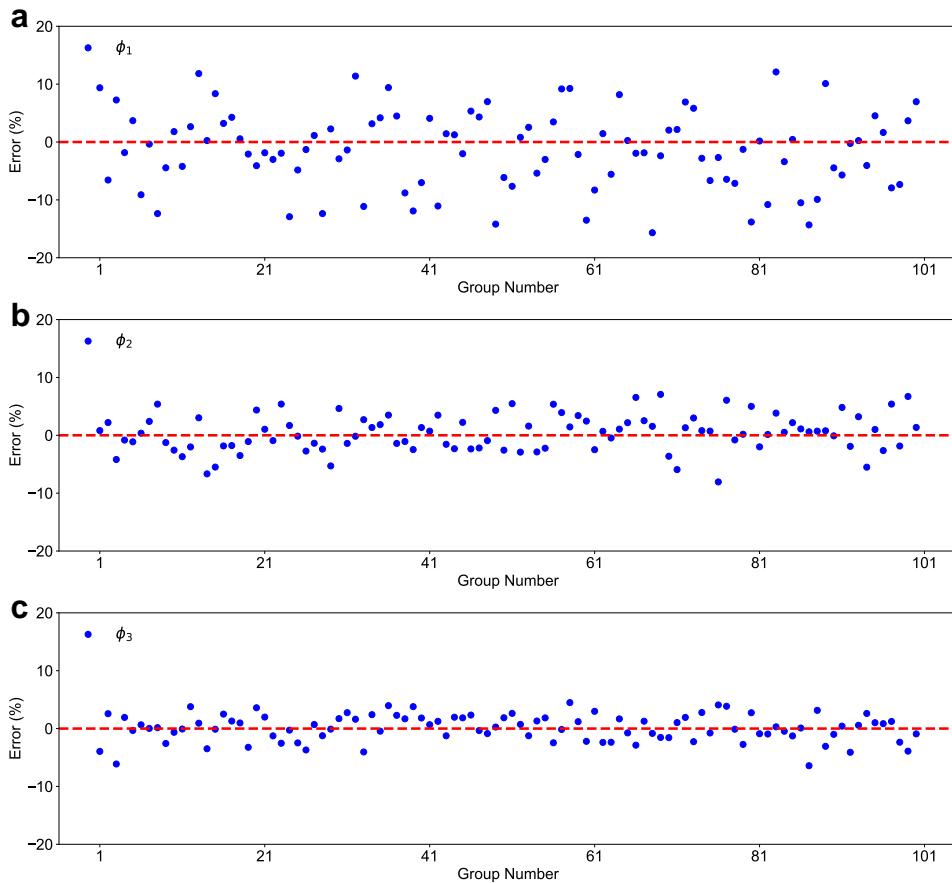


图 4-13 CVAE 生成的 100 组多模态解中不同组分含量  $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$  的残差分布: (a)  $\phi_1$  残差分布; (b)  $\phi_2$  残差分布; (c)  $\phi_3$  残差分布

Figure 4-13 Residual distributions of 100 multimodal solutions generated by CVAE for different component contents  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$ : (a) Residual distribution of  $\phi_1$ ; (b) Residual distribution of  $\phi_2$ ; (c) Residual distribution of  $\phi_3$

次为  $Mn_1 > Mn_2 > Mn_3$ 。图4-13则显示了组分含量参数  $\phi$  的残差分布。 $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$  同样呈现正态分布特征，最大偏差约为 20%，残差大小顺序为  $\phi_1 > \phi_2 > \phi_3$ 。

值得注意的是，在测试集中  $Mn_1 < Mn_2 < Mn_3$ ， $\phi_1 < \phi_2 < \phi_3$ ，由此观察到残差大小与参数实际值呈现负相关关系 - 即参数绝对值越小，其预测误差反而越大。这一现象揭示了模型在预测较小数值参数时的精度局限性，实际应用时，可以通过调整量纲一定程度缓解这一问题。

图4-14为生成数据的 violin 图。(a-f) 分别展示了分子量参数  $Mn_1$ 、 $Mn_2$ 、 $Mn_3$  和组分含量参数  $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$  的多模态解分布情况。由图可见，真实分子量数据 ( $Mn$ ) 在生成分子量数据的下四分位数附近，总体生成偏大，大部分数据分布在中位数附近，真实

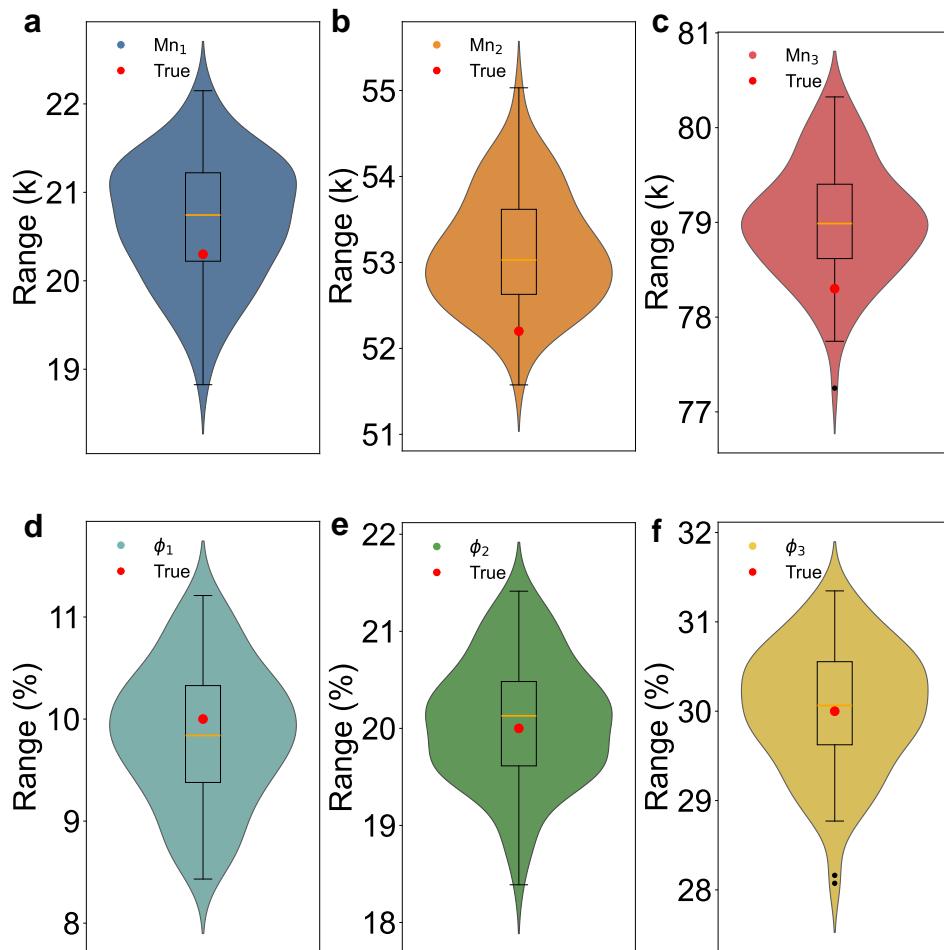


图 4-14 CVAE 生成的 100 组多模态解的 violin 图: (a) 分子量参数  $Mn_1$  的多模态解分布; (b) 分子量参数  $Mn_2$  的多模态解分布; (c) 分子量参数  $Mn_3$  的多模态解分布; (d) 组分含量参数  $\phi_1$  的多模态解分布; (e) 组分含量参数  $\phi_2$  的多模态解分布; (f) 组分含量参数  $\phi_3$  的多模态解分布

Figure 4-14 Violin plots of 100 multimodal solutions generated by CVAE: (a) Distribution of multimodal solutions for molecular weight parameter  $Mn_1$ ; (b) Distribution of multimodal solutions for molecular weight parameter  $Mn_2$ ; (c) Distribution of multimodal solutions for molecular weight parameter  $Mn_3$ ; (d) Distribution of multimodal solutions for component content parameter  $\phi_1$ ; (e) Distribution of multimodal solutions for component content parameter  $\phi_2$ ; (f) Distribution of multimodal solutions for component content parameter  $\phi_3$

组分含量数据 ( $\phi$ ) 在生成组分含量数据中位数附近，总体生成效果良好。从核密度曲线的形态来看，所有参数的分布均呈现出中间宽、两端窄的典型小提琴形状，表明数据分布较为集中。整体数据分布服从正态分布，无明显多峰值特征。具体分析各参数的核密度曲线最宽处（即数据最集中处）与中位数线的相对位置： $Mn_1$  的核密度曲线最宽处位于中位数线上方，表明生成数据相对真实值略有高估； $Mn_2$  的核密度曲线最宽处位于中位数线下方，显示生成数据略低于中位数水平；而其余各参数 ( $Mn_3$ 、 $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$ ) 的核密度曲线最宽处与中位数线基本重合，说明这些参数的生成分布更为准确。异常点分析结果显示，所有参数的异常点数量均较少，表明生成数据整体质量较高。

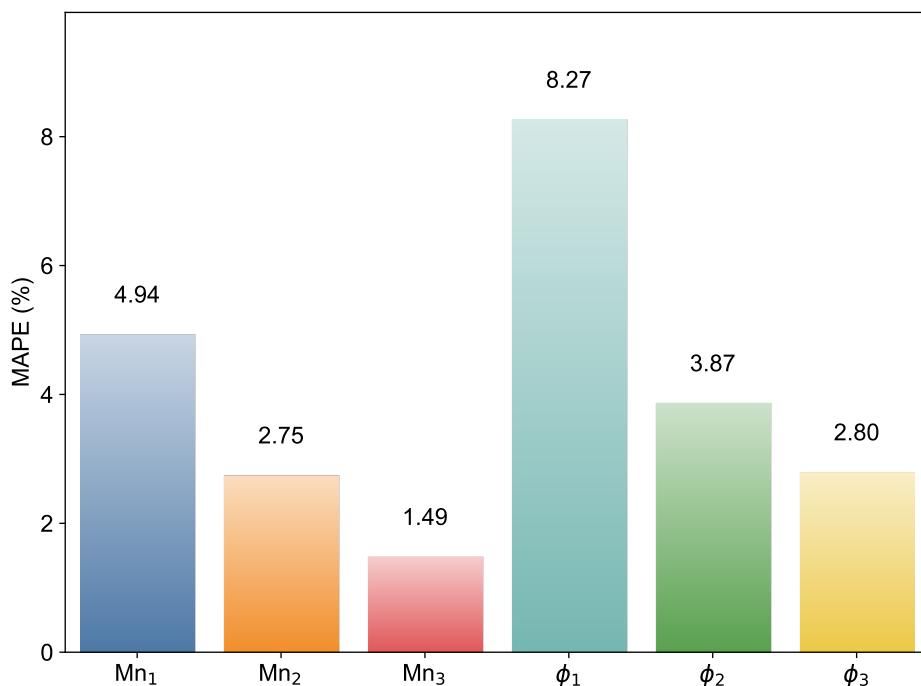


图 4-15 CVAE 生成的 100 组多模态解中分子量参数  $Mn_1$ 、 $Mn_2$ 、 $Mn_3$  和组分含量参数  $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$  的 MAPE 图

Figure 4-15 MAPE chart of molecular weight parameters  $Mn_1$ ,  $Mn_2$ ,  $Mn_3$  and component content parameters  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$  of 100 multimodal solutions generated by CVAE

图4-15为MAPE的条形图。从图中可以看出，分子量参数  $Mn_1$ 、 $Mn_2$ 、 $Mn_3$  的 MAPE 值分别为 4.94%、2.75%、1.49%，组分含量参数  $\phi_1$ 、 $\phi_2$ 、 $\phi_3$  的 MAPE 值分别为 8.27%、3.87%、2.80%。这些数据揭示了几个重要的趋势：首先，分子量参数的预测总体优于组分含量参数，这表明模型在预测分子量特征时具有更好的准确性；其次，无论是分子量还是组分含量参数，都呈现出随着数值增大（即  $Mn_1 < Mn_2 < Mn_3$  和  $\phi_1 < \phi_2 < \phi_3$ ）预测

误差逐渐减小的规律，这与之前残差分析的结果相一致。特别值得注意的是，即使是预测误差最大的  $\phi_1$ ，其 MAPE 值也仅为 8.27%，而其他参数的 MAPE 值都控制在 5% 以内，这说明模型整体的预测精度达到了较高水平，具有良好的实用价值。

综合以上分析结果，CVAE 模型在从流变学性质反向预测组分配比的任务中展现出了良好的性能。通过残差分析、violin 图分析和 MAPE 定量分析，我们可以得出以下主要结论：首先，模型生成的组分配比数据整体呈现正态分布特征，预测结果的分布集中且稳定，异常值较少；其次，预测误差随着参数数值的增大而减小，这一特征在分子量和组分含量两类参数中均有体现。这种误差分布特征可能源于在数据标准化过程中，较小数值参数更容易受到数值舍入和归一化误差的影响。第三，从 MAPE 指标来看，分子量参数的预测精度普遍优于组分含量参数，但两类参数的预测误差均控制在可接受范围内（最大 MAPE 为 8.27%）。这些结果表明，CVAE 模型能够有效地实现从材料性质到材料制备参数的反向设计，为高分子材料配方开发提供了一种可靠的数据驱动方法。

#### 4.3.6 正逆向联合建模分析

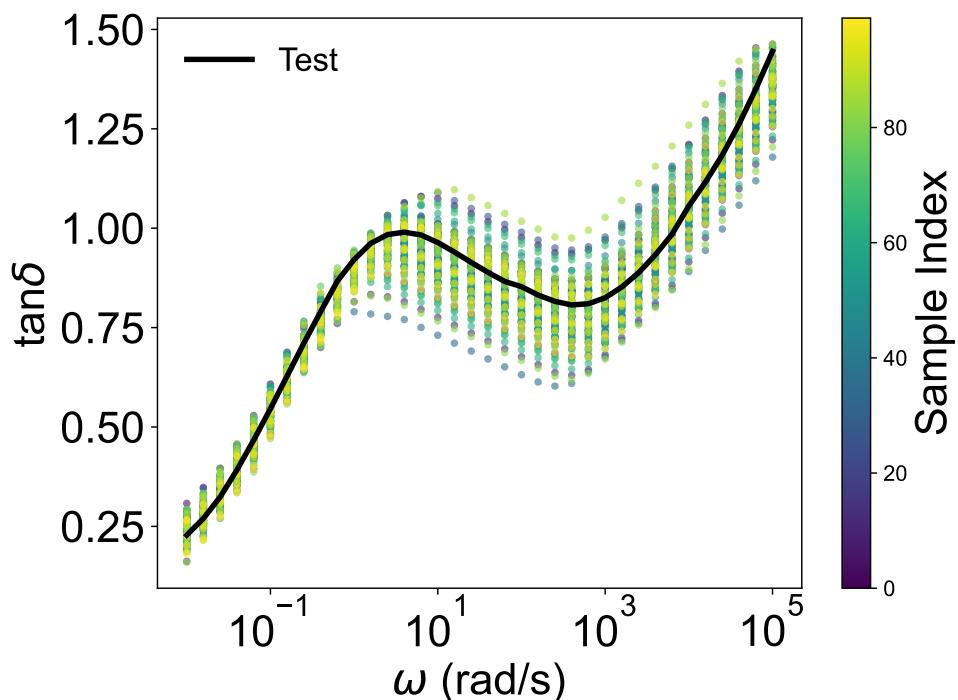


图 4-16 100 组 CVAE 生成的多模态解输入 PINN 模型后的预测值曲线

Figure 4-16 Prediction curves of 100 multimodal solutions generated by CVAE after input into PINN model

上一节通过分析 CVAE 生成的 100 组生成组分数据与真实组分数据的误差来确定

CVAE 模型的生成效果，但是这种分析方法存在一定的局限性。首先，组分数据与频率-损耗角正切曲线之间存在多对一的映射关系，即理论上可能存在多种不同的组分配比，制备出来的材料具有相同或近似的频率-损耗角正切曲线。这种多解性是高分子材料设计中的一个普遍现象，源于不同分子量组分之间复杂的相互作用。其次，组分配比的微小变化可能导致材料性能的显著差异，这种非线性关系使得仅通过比较组分数据的误差来评估模型效果是不够全面的。

从实验验证的角度来看，最准确的分析方法应该是按照生成的组分配比分别制备材料样品，通过 DMA 频率扫描实验测试其损耗角正切，并与目标曲线进行对比。然而，考虑到实验成本和时间效率，这种方法在实际操作中并不现实。为了在保证验证可靠性的同时提高效率，本节采用了一种替代方案：将 CVAE 模型生成的 100 组组分特征输入到已训练好的 PINN 模型中，通过 PINN 的预测结果来评估 CVAE 生成结果的质量。这种方法虽然不能完全替代实验验证，但可以在一定程度上反映生成组分的合理性。

图4-16展示了这 100 组特征输入 PINN 后得到的频率-损耗角正切曲线，其中 Test 线代表原始真实特征对应的预测曲线。从图中可以观察到，这 100 组预测特征绘制的曲线形成了一个连续的曲线带，且具有以下特点：首先，曲线带的整体趋势与 Test 线高度一致，表明生成的组分特征能够较好地捕捉材料的主要流变学特性；其次，Test 线位于曲线带的中心区域，说明生成结果的分布是合理的；最后，曲线带的宽度随频率变化呈现出不均匀的特征，这反映了在不同频率区间，组分配比对材料性能的影响程度是不同的。这种曲线带的分布特征也从另一个角度验证了 CVAE 模型在材料组分反演任务中的有效性。

通过建立 PINN-CVAE 的联合建模，可以建立一个自适应增强的流变学机器学习系统。该系统的工作流程如下：首先，PINN 模型通过物理约束和特征融合机制对流变学数据进行正向建模，建立组分特征到流变学性质的映射关系。在实际应用过程中，通过真实实验获得的新数据可以不断补充到训练集中，进一步提升 PINN 模型的预测精度。与此同时，CVAE 模型负责从目标流变学性质反向生成可能的组分配比方案，为材料设计提供多样化的参考。这些由 CVAE 生成的组分方案可以输入到 PINN 模型中进行快速评估和筛选，通过比较预测曲线与目标曲线的吻合度，筛选出最具潜力的组分配比进行实验验证，从而大大减轻实验负担。最后，实验验证结果又可以作为新的训练数据反馈给两个模型，形成一个不断优化的闭环系统。这种联合建模方法充分发挥了两种模型的优势，既保证了预测的物理合理性，又提供了材料设计的多样化方案，同时通过数据驱

动和实验验证的结合，实现了系统性能的持续提升。

#### 4.4 本章小结

本章主要围绕 PINN 与 CVAE 两类深度学习模型在高分子流变学数据建模及组分反演中的应用进行了研究。本章首先对比了传统 DNN 模型与基于物理先验约束的 PINN 模型在处理高维数据与复杂特征时的性能差异。在 PINN 建模中使用自适应权重机制，首先对 PBA 流体和单 PBA 注入制备的 PFGs 流体进行建模，结果表明 PINN 相比 DNN 具有更好的泛化预测效果。实验结果显示，普通 PINN 模型在一定程度上能够提高预测精度，但其泛化能力在特征数量较多且分布稀疏场景时表现一般，具体为在预测多组分 PBA 注入制备的 PFGs 流体时，模型预测效果较差。为此，本章进一步提出了两种特征融合改进方案——哈达玛积特征融合（PINN-HP）和注意力特征融合（PINN-AFF），通过预设和学习输入特征之间的物理关联，有效地改善了模型对各类复杂非线性关系的捕捉能力，从而解决特征稀疏的问题。从  $R^2$ 、MAE、MAPE 多项评价指标来看，PINN-AFF 模型在预测准确性和稳定性上均明显优于传统 DNN 和普通 PINN 模型，尽管其训练时间略长，但整体优势十分明显，这为流变学数据的高精度预测提供了新思路。

在 PINN 模型取得显著进展的同时，本章还深入探讨了利用 CVAE 模型进行材料组分反演的可行性。该部分工作主要通过将目标流变学参数（如频率  $\omega$ 、 $G'$ 、 $G''$  和  $\tan\delta$ ）作为输入，生成多模态解，并对生成数据的残差分布、核密度及异常点进行了详细分析。结果表明，无论是分子量参数 ( $M_n$ ) 还是组分含量参数 ( $\phi$ )，生成数据均基本呈现正态分布特征，且随着参数数值的增大，预测误差逐步减小，MAPE 指标均控制在较低水平，验证了模型在反向预测材料配方比例方面的高精度和鲁棒性。这一研究内容解决了传统回归方法单一输出的问题，而且为基于数据驱动的材料设计提供了具有多解性的参考方案，在真实的实验应用中可以使用这些多模态解来辅助调整实验设计，从而提高实验效率。

此外，本章还对各模型在训练时间和资源消耗上的表现进行了比较和分析，指出尽管理论上 PINN 类模型由于引入了物理约束及复杂特征融合模块而导致训练时间较长，但其在捕捉复杂物理特性和有效泛化方面的优势足以弥补这一不足。同时，通过对比分析，可以发现深度学习模型在处理小数值参数时仍存在归一化误差，未来可通过调整量纲转换和数据预处理进一步优化模型效果。

最后，本章设计了 PINN-CVAE 联合建模方法，通过将 PINN 的正向预测能力与

CVAE 的反向生成能力相结合，构建了一个自适应增强的流变学机器学习系统。该系统利用 PINN 模型进行正向建模，通过物理约束和特征融合机制建立组分特征到流变学性质的映射关系；同时利用 CVAE 模型进行反向生成，从目标流变学性质生成多种可能的组分配比方案。两个模型相互配合，形成闭环优化系统：CVAE 生成的组分方案可通过 PINN 快速评估筛选，实验验证结果又可作为新数据反馈给模型进行训练。这种联合建模方法既保证了预测的物理合理性，又提供了材料设计的多样化方案，为高分子材料的智能设计提供了新思路。

综合来看，本章对 PINN 系列模型和 CVAE 模型进行了初步构建、改进与验证，展示了深度学习在流变学数据预测和材料组分反演中的应用潜力。虽然目前的结果仍存在不足，但实验数据为后续高分子材料设计和流变特性模拟提供了一定的理论依据和参考。总体而言，本章工作初步验证了结合物理信息与深度学习方法的思路，并为未来进一步改进材料配方设计提出了一些启示。

## 总结与展望

本文以流变学本构模型为研究对象，系统探索了深度学习方法在流变学本构模型中的应用前景。研究内容主要包含两个方面：第一个方面聚焦于深度学习模型结构对流变学本构模型的适用性研究。考虑到黏弹性材料流变特性中的应变历史依赖性，本文创新性地引入了天然适合处理时序数据的循环神经网络，特别是采用了门控循环单元（GRU），并与传统深度神经网络（DNN）进行了系统对比分析。第二个方面是在真实实验数据上，使用物理信息神经网络（PINN）和条件变分自编码器（CVAE）两种方法对流变学本构模型分别进行正逆向训练，通过引入注意力特征融合机制，探讨了在实验数据有限，特征信息稀疏的情况下使用 PINN 建模以预测材料流变学性质的可行性。而 CVAE 的引入则探讨了另一个材料科研中的重要问题，即如何通过期望的流变学性质反推出材料的制备参数来辅助材料设计。

在第一部分的研究工作中，本文首先采用了数值模拟与深度学习相结合的方式。首先通过数值模拟生成了包括 Herschel-Bulkley 模型、Maxwell 模型、Doi-Edwards 模型和 Giesekus 模型在内的多种典型流变学模型的数据。这些模型涵盖了从简单到复杂、从线性到非线性的不同类型本构关系，为深度学习方法的验证提供了全面的数据基础。在深度学习方面，本文重点比较了传统深度神经网络（DNN）和门控循环单元（GRU）两种算法的建模效果。研究发现，GRU 算法凭借其独特的门控机制，在处理具有时间依赖性的流变学数据时展现出显著优势。在模型泛化能力方面，本文通过交变应变预测和线性应变预测两类任务进行了验证。之后本文对一类阻尼黏弹性材料的应力应变数据进行本构建模，在 GRU 模型中引入物理本构残差，构建物理信息门控循环单元（PI-GRU）模型，通过物理约束来增强模型的泛化能力，同时保持对材料动态行为的准确描述。

结果显示，PI-GRU 模型表现出更强的泛化能力，能够准确预测不同应变条件下的材料响应。这一发现对于实际应用具有重要意义，说明深度学习模型不仅能够进行简单的数据拟合，还能够捕捉材料本构关系的本质特征。然而，研究也发现 GRU 模型的优势是以更高的计算成本为代价的，其训练时间和资源消耗都显著高于 DNN。

第二部分的研究工作中，本文以高分子流变学数据建模及组分反演为研究对象，分别使用 PINN 和 CVAE 两类深度学习模型进行正逆向建模。在正向建模方面，研究发现普通 PINN 模型虽然相比传统 DNN 具有更好的泛化预测效果，但在特征数量较多且分布稀疏的场景下表现一般。为此，本文提出了哈达玛积特征融合（PINN-HP）和注

意力特征融合（PINN-AFF）两种改进方案，通过预设和学习输入特征之间的物理关联，有效改善了模型对复杂非线性关系的捕捉能力。从  $R^2$ 、MAE、MAPE 等评价指标来看，PINN-AFF 模型在预测准确性和稳定性上均明显优于传统 DNN 和普通 PINN 模型。在逆向建模方面，本文利用 CVAE 模型从目标流变学参数反向生成材料组分配比，结果表明生成的分子量参数和组分含量参数均呈现正态分布特征，最大误差控制在 10% 以内。最后，本文设计了 PINN-CVAE 联合建模方法，通过将 PINN 的正向预测能力与 CVAE 的反向生成能力相结合，构建了一个自适应增强的流变学机器学习系统，为高分子材料的智能设计提供了新思路。

总的来说，本文的研究工作为深度学习方法在流变学本构建模中的应用提供了创新性的探索。在时间域流变学数据（应力、应变率-应力）的研究中，本文创新性地引入了更擅长处理时序数据的 GRU 模型，在频率域流变学数据（频率-储存模量、损耗模量、损耗角正切）的研究中，本文在传统 PINN 的基础上提出了注意力特征融合的优化方案，并首次尝试了基于 CVAE 的逆向训练来辅助材料设计。基于本文的研究成果，未来还可以在以下几个方向进行深入研究：

- (1) 针对黏弹性流体的非线性本构关系，本文采用的 GRU 模型在处理长时间尺度的非线性本构关系时存在长期依赖问题。在实验条件允许且具备充足高质量流变学数据的情况下，可以考虑引入基于自注意力机制的 Transformer 架构。该架构通过多头注意力机制和位置编码，能够更好地处理长序列数据，有望捕捉材料在更长时间尺度下的流变学特性，尤其是在应力松弛和蠕变等长期行为的建模中具有潜在优势。此外，还可以探索将 Transformer 与物理约束相结合的方法，通过在注意力层中引入物理先验知识来增强模型对材料本构关系的理解。
- (2) 可以考虑引入多尺度建模方法，将分子动力学模拟与宏观流变学行为建模相结合。通过分子动力学模拟获取材料微观结构演化信息，结合宏观流变实验数据，构建跨尺度的深度学习模型。这种多模态数据训练方式不仅可以从理论和实验两个角度提高模型的泛化能力，还能帮助揭示材料微观结构与宏观流变性质之间的关联机制。同时，可以探索使用图神经网络等新型架构来处理分子结构数据，进一步提升模型对材料结构-性能关系的表征能力。
- (3) 在 PINN-CVAE 联合建模框架的基础上，可以进一步探索引入强化学习方法，构建端到端的材料配方优化系统。通过将 PINN 的物理约束预测能力、CVAE 的多模态生成能力与强化学习的决策优化能力相结合，可以实现从目标性能出

发，自动搜索和优化材料配方的智能设计流程。这种方法有望大幅提高材料开发效率，减少试错成本。同时，还可以考虑在优化过程中引入多目标约束，平衡材料性能、成本和工艺等多个维度的需求。

## 参考文献

- [1] Dealy J M, Wissbrun K F. Introduction to Rheology[M]//Melt Rheology and Its Role in Plastics Processing: Theory and Applications. Boston, MA: Springer US, 1990: 1-41.
- [2] Ellero M, Housiadas K D, Phan-Thien N. Tanner: 90 Years of Rheology[J]. Physics Of Fluids, 2024, 36(11): 110401.
- [3] Ewoldt R H, Saengow C. Designing Complex Fluids[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2022, 54(1): 413-441.
- [4] Barnes H A. Thixotropy—a Review[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1997, 70(1): 1-33.
- [5] Banerjee R, Ray S S. Role of Rheology in Morphology Development and Advanced Processing of Thermoplastic Polymer Materials: A Review[J]. ACS Omega, 2023, 8(31): 27969-28001.
- [6] Zener C M, Siegel S. Elasticity and Anelasticity of Metals.[J]. The Journal of Physical and Colloid Chemistry, 1949, 53(9): 1468-1468.
- [7] Hajikarimi P, Sadat Hosseini A. Viscoelasticity Theoretical Background[M]//Constructional Viscoelastic Composite Materials: Theory and Application. Singapore: Springer Nature Singapore, 2023: 9-41.
- [8] Sun H, Jiang Y, Zhang Y, et al. A Review of Constitutive Models for Non-Newtonian Fluids[J]. Fractional Calculus and Applied Analysis, 2024, 27(4): 1483-1526.
- [9] Kuschel S, Ho P J, Al Haddad A, et al. Non-Linear Enhancement of Ultrafast X-ray Diffraction through Transient Resonances[J]. Nature Communications, 2025, 16(1): 847.
- [10] Sun R, Yang J, Patil S, et al. Relaxation dynamics of deformed polymer nanocomposites as revealed by small-angle scattering and rheology[J]. Soft Matter, 2022, 18(46): 8867-8884.
- [11] Ling S, Wu Z, Mei J. Comparison and Review of Classical and Machine Learning-Based Constitutive Models for Polymers Used in Aeronautical Thermoplastic Composites[J]. Reviews On Advanced Materials Science 2023, 62(1): 20230107.
- [12] Martín-Roca J, Bianco V, Alarcón F, et al. Rheology of *Pseudomonas fluorescens* biofilms: From experiments to predictive DPD mesoscopic modeling[J]. The Journal of

Chemical Physics, 2023, 158(7): 074902.

- [13] Jeon E, Kim H, Kim G, et al. A review of bacterial biofilm formation and growth: rheological characterization, techniques, and applications[J]. Korea-Australia Rheology Journal, 2023, 35(4): 267-278.
- [14] Campbell G A, Zak M E, Wetzel M D. Newtonian, Power Law, and Infinite Shear Flow Characteristics of Concentrated Slurries Using Percolation Theory Concepts[J]. Rheologica Acta, 2018, 57(3): 197-216.
- [15] Schreuders F K, Sagis L M, Bodnár I, et al. Non-linear rheology reveals the importance of elasticity in meat and meat analogues[J]. Scientific reports, 2022, 12(1): 1334.
- [16] Kim J, Jeong E H, Baik J H, et al. The Role of Rheology in Cosmetics Research: A Review [J]. Korea-Australia Rheology Journal, 2024, 36(4): 271-282.
- [17] Murch W L, Spiridigliozi J, Heller A, et al. Non-invasive, continuous oral delivery of solid levodopa-carbidopa for management of Parkinson's disease[J]. Scientific Reports, 2024, 14(1): 26826.
- [18] Zhang H, Li A, Su Y, et al. Modification Technologies and Constitutive Models of Viscoelastic Damping Materials: Progress and Future Trends[J]. Construction and Building Materials, 2024, 441: 137406.
- [19] Wang L, Martínez J A I, Ulliac G, et al. Non-reciprocal and non-Newtonian mechanical metamaterials[J]. Nature Communications, 2023, 14(1): 4778.
- [20] Lowe G D, Forbes C. Rheology of cardiovascular disease[J]. Clinical blood rheology, 2019: 113-140.
- [21] Ricarte R G, Shanbhag S. A Tutorial Review of Linear Rheology for Polymer Chemists: Basics and Best Practices for Covalent Adaptable Networks[J]. Polymer Chemistry, 2024, 15(9): 815-846.
- [22] Yao D, Zatloukal M. Inelastic Fluid Models with an Objective Stretch Rate Parameter[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2024, 334: 105320.
- [23] Song J K, Holten-Andersen N, McKinley G H. Non-Maxwellian Viscoelastic Stress Relaxations in Soft Matter[J]. Soft Matter, 2023, 19(41): 7885-7906.
- [24] Maxwell J C. IV. On the dynamical theory of gases[J]. Philosophical transactions of the Royal Society of London, 1867(157): 49-88.

- [25] Voigt W. Ueber Innere Reibung Fester Körper, Insbesondere Der Metalle[J]. Annalen der Physik, 1892, 283(12): 671-693.
- [26] Bagley R L, Torvik P J. On the fractional calculus model of viscoelastic behavior[J]. Journal of Rheology, 1986, 30(1): 133-155.
- [27] Boltzmann L. Zur Theorie Der Elastischen Nachwirkung[J]. Annalen der Physik, 1878, 241(11): 430-432.
- [28] Fedorowicz K, Prosser R. The Elastic Perfectly Plastic Constitutive Equation for Yield Stress Fluids[J]. Journal Of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2024, 325: 105201.
- [29] Bingham E C. An investigation of the laws of plastic flow[J]. Bulletin of the Bureau of Standards, 1916, 13: 309-353.
- [30] Herschel W H, Bulkley R. Konsistenzmessungen von gummi-benzollösungen[J]. Kolloid-Zeitschrift, 1926, 39: 291-300.
- [31] Magnon E, Cayeux E. Precise method to estimate the herschel-bulkley parameters from pipe rheometer measurements[J]. Fluids, 2021, 6(4): 157.
- [32] Papanastasiou T C. Flows of materials with yield[J]. Journal of rheology, 1987, 31(5): 385-404.
- [33] Oldroyd J. Non-Newtonian effects in steady motion of some idealized elastico-viscous liquids[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 1958, 245(1241): 278-297.
- [34] Giesekus H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1982, 11(1-2): 69-109.
- [35] Peng S, Li J y, Xiong Y l, et al. Numerical simulation of two-dimensional unsteady Giesekus flow over a circular cylinder[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2021, 294: 104571.
- [36] Kim S K. Viscosity model based on Giesekus equation[J]. Applied Rheology, 2024, 34(1): 20240004.
- [37] Fattal R, Kupferman R. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2004, 123(2-3): 281-285.
- [38] Thien N P, Tanner R I. A new constitutive equation derived from network theory[J].

- Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1977, 2(4): 353-365.
- [39] Bird R B, Dotson P J, Johnson N. Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead—spring chain model[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1980, 7(2-3): 213-235.
- [40] Qi H, Xu M. Stokes' first problem for a viscoelastic fluid with the generalized Oldroyd-B model[J]. Acta Mechanica Sinica, 2007, 23(5): 463-469.
- [41] Kaye A. Non-Newtonian flow in incompressible fluids[J]. College of Aeronautics Note 134 & 149, 1962.
- [42] Bernstein B, Kearsley E, Zapas L. A study of stress relaxation with finite strain[J]. Transactions of the Society of Rheology, 1963, 7(1): 391-410.
- [43] Mitsoulis E, Hatzikiriakos S G. 60 Years of the Kaye-Bernstein, Kearsley, Zapas Rheological Constitutive Law for Polymers[J]. Physics Of Flow, 2023, 35(10): 103111.
- [44] Doi M, Edwards S. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 1.—Brownian motion in the equilibrium state[J]. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics, 1978, 74: 1789-1801.
- [45] Doi M, Edwards S. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 2.—Molecular motion under flow[J]. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics, 1978, 74: 1802-1817.
- [46] Doi M, Edwards S. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 3.—The constitutive equation[J]. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics, 1978, 74: 1818-1832.
- [47] Doi M, Edwards S. Dynamics of concentrated polymer systems. Part 4.—Rheological properties[J]. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics, 1979, 75: 38-54.
- [48] O'Connor N P T, Ball R C. Confirmation of the Doi-Edwards model[J]. Macromolecules, 1992, 25: 5677-5682.
- [49] Hassager O, Hansen R. Constitutive equations for the Doi-Edwards model without independent alignment[J]. Rheologica acta, 2010, 49: 555-562.
- [50] Chupin L. Mathematical Existence Results for the Doi-Edwards Polymer Model[J]. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 2017, 223: 1-55.

- [51] Alves M, Oliveira P, Pinho F. Numerical Methods for Viscoelastic Fluid Flows[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2021, 53(1): 509-541.
- [52] Stadler F J. What Are Typical Sources of Error in Rotational Rheometry of Polymer Melts?[J]. Korea-Australia Rheology Journal, 2014, 26(3): 277-291.
- [53] Zhai X, Chen Z M. Global Well-Posedness to the n-Dimensional Compressible Oldroyd-B Model Without Damping Mechanism[J]. Journal of Dynamics and Differential Equations, 2024, 36(2): 1405-1433.
- [54] Li J, Si Z, Shang K, et al. Coupling effect of LDPE molecular chain structure and additives on the rheological behaviors of cable insulating materials[J]. Polymers, 2023, 15(8): 1883.
- [55] Sgouros A, Megariotis G, Theodorou D. Slip-spring model for the linear and nonlinear viscoelastic properties of molten polyethylene derived from atomistic simulations[J]. Macromolecules, 2017, 50(11): 4524-4541.
- [56] Sato T, Yoshimoto K. Recent Developments on Multiscale Simulations for Rheology and Complex Flow of Polymers[J]. Korea-Australia Rheology Journal, 2024, 36(4): 253-269.
- [57] Webb M A, Delannoy J Y, De Pablo J J. Graph-based approach to systematic molecular coarse-graining[J]. Journal of chemical theory and computation, 2018, 15(2): 1199-1208.
- [58] Behbahani A F, Schneider L, Rissanou A, et al. Dynamics and rheology of polymer melts via hierarchical atomistic, coarse-grained, and slip-spring simulations[J]. Macromolecules, 2021, 54(6): 2740-2762.
- [59] Morii Y, Kawakatsu T. Lagrangian multiscale simulation of complex flows[J]. Physics of Fluids, 2021, 33(9).
- [60] Amamoto Y. Data-Driven Approaches for Structure-Property Relationships in Polymer Science for Prediction and Understanding[J]. Polymer Journal, 2022, 54(8): 957-967.
- [61] Wang H, Fu T, Du Y, et al. Scientific discovery in the age of artificial intelligence[J]. Nature, 2023, 620(7972): 47-60.
- [62] Uesaka Y, Aizawa T, Ebara T, et al. A theory of learnability[J]. Kybernetik, 1973, 13: 123-131.
- [63] Liu X, Zhang F, Hou Z, et al. Self-supervised learning: Generative or contrastive[J]. IEEE transactions on knowledge and data engineering, 2021, 35(1): 857-876.
- [64] Quinlan J R. Induction of decision trees[J]. Machine learning, 1986, 1: 81-106.

- [65] Breiman L. Random forests[J]. Machine learning, 2001, 45: 5-32.
- [66] Cortes C. Support-Vector Networks[J]. Machine Learning, 1995, 20: 273-297.
- [67] Cover T, Hart P. Nearest neighbor pattern classification[J]. IEEE transactions on information theory, 1967, 13(1): 21-27.
- [68] Yang L, Zhang Z, Song Y, et al. Diffusion models: A comprehensive survey of methods and applications[J]. ACM Computing Surveys, 2023, 56(4): 1-39.
- [69] Xu P, Zhu X, Clifton D A. Multimodal learning with transformers: A survey[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 45(10): 12113-12132.
- [70] Xie Y, Xu Z, Zhang J, et al. Self-Supervised Learning of Graph Neural Networks: A Unified Review[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 45(2): 2412-2429.
- [71] Zhu Y, Wu Y, Sebe N, et al. Vision + X: A Survey on Multimodal Learning in the Light of Data[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2024, 46(12): 9102-9122.
- [72] Choudhary K, DeCost B, Chen C, et al. Recent advances and applications of deep learning methods in materials science[J]. npj Computational Materials, 2022, 8(1): 59.
- [73] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, et al. Quantum machine learning[J]. Nature, 2017, 549(7671): 195-202.
- [74] Bufano F, Riggi S, Sciacca E, et al. Machine Learning for Astrophysics: Proceedings of the ML4Astro International Conference 30 May-1 Jun 2022[M]. Springer Nature, 2023.
- [75] Brunton S L, Noack B R, Koumoutsakos P. Machine Learning for Fluid Mechanics[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2020, 52(1): 477-508.
- [76] Udrescu S M, Tegmark M. AI Feynman: A Physics-Inspired Method for Symbolic Regression[J]. Science Advances, 2020, 6(16): eaay2631.
- [77] Colen J, Han M, Zhang R, et al. Machine Learning Active-Nematic Hydrodynamics[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2021, 118(10): e2016708118.
- [78] Bahiuddin I, Mazlan S A, Imaduddin F, et al. Review of Modeling Schemes and Machine Learning Algorithms for Fluid Rheological Behavior Analysis[J]. Journal of the Mechanical Behavior of Materials, 2024, 33(1): 20220309.

- [79] Mangal D, Jha A, Dabiri D, et al. Data-Driven Techniques in Rheology: Developments, Challenges and Perspective[J]. Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2025, 75: 101873.
- [80] Alsabaa A, Gamal H, Elkataatny S, et al. Machine Learning Model for Monitoring Rheological Properties of Synthetic Oil-Based Mud[J]. ACS Omega, 2022, 7(18): 15603-15614.
- [81] Shakeel M, Pourafshary P, Hashmet M R, et al. Application of machine learning techniques to predict viscosity of polymer solutions for enhanced oil recovery[J]. Energy Systems, 2023: 1-24.
- [82] Mustafa A, Haider D, Barua A, et al. Machine Learning Based Microfluidic Sensing Device for Viscosity Measurements[J]. Sensors & Diagnostics, 2023, 2(6): 1509-1520.
- [83] Ponick A, Langer A, Beyer D, et al. Image-Based Deep Learning for Rheology Determination of Bingham Fluids[J]. The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, 2022, 43: 711-720.
- [84] Chen Y, Peng B, Kontogeorgis G M, et al. Machine learning for the prediction of viscosity of ionic liquid–water mixtures[J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 350: 118546.
- [85] Zhang Y, Jin H, Liu H, et al. Deep Semi-Supervised Just-in-Time Learning Based Soft Sensor for Mooney Viscosity Estimation in Industrial Rubber Mixing Process[J]. Polymers, 2022, 14(5): 1018.
- [86] Zhang L, Shao S. Image-based machine learning for materials science[J]. Journal of Applied Physics, 2022, 132(10): 100701.
- [87] Zhang J, Liu Y, Chandra Sekhar.P D, et al. Rapid, Autonomous High-Throughput Characterization of Hydrogel Rheological Properties via Automated Sensing and Physics-Guided Machine Learning[J]. Applied Materials Today, 2023, 30: 101720.
- [88] Verheyen C A, Uzel S G, Kurum A, et al. Integrated Data-Driven Modeling and Experimental Optimization of Granular Hydrogel Matrices[J]. Matter, 2023, 6(3): 1015-1036.
- [89] Martineau R L, Bayles A V, Hung C S, et al. Engineering Gelation Kinetics in Living Silk Hydrogels by Differential Dynamic Microscopy Microrheology and Machine Learning [J]. Advanced Biology, 2022, 6(1): 2101070.
- [90] Lee S, Kim S R, Lee H J, et al. Predictive model for the spreadability of cosmetic for-

- mulations based on large amplitude oscillatory shear (LAOS) and machine learning[J]. Physics of Fluids, 2022, 34(10): 103109.
- [91] Lu L, Gao X, Dietiker J F, et al. Machine learning accelerated discrete element modeling of granular flows[J]. Chemical Engineering Science, 2021, 245: 116832.
- [92] Seryo N, Sato T, Molina J J, et al. Learning the Constitutive Relation of Polymeric Flows with Memory[J]. Physical Review Research, 2020, 2(3): 033107.
- [93] Bai J, Zhou Y, Rathnayaka C M, et al. A Data-Driven Smoothed Particle Hydrodynamics Method for Fluids[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2021, 132: 12-32.
- [94] Li W, Burkhart C, Polinska P, et al. Backmapping Coarse-Grained Macromolecules: An Efficient and Versatile Machine Learning Approach[J]. The Journal Of Chemical Physics, 2020, 153(4): 041101.
- [95] Zhao L, Li Z, Caswell B, et al. Active Learning of Constitutive Relation from Mesoscopic Dynamics for Macroscopic Modeling of Non-Newtonian Flows[J]. Journal of Computational Physics, 2018, 363: 116-127.
- [96] Saadat M, Mangal D, Jamali S. A Rheologist's Guideline to Data-Driven Recovery of Complex Fluids' Parameters from Constitutive Models[J]. Digital Discovery, 2023, 2(4): 915-928.
- [97] Reyes B, Howard A, Perdikaris P, et al. Learning Unknown Physics of Non-Newtonian Fluids[J]. Physical Review Fluids, 2021, 6(7): 073301.
- [98] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-Informed Machine Learning[J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(6): 422-440.
- [99] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G. Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 378: 686-707.
- [100] Mahmoudabadbozchelou M, Jamali S. Rheology-Informed Neural Networks (RhINNs) for Forward and Inverse Metamodelling of Complex Fluids[J]. Scientific Reports, 2021, 11(1): 12015.
- [101] Dabiri D, Saadat M, Mangal D, et al. Fractional Rheology-Informed Neural Networks for Data-Driven Identification of Viscoelastic Constitutive Models[J]. Rheologica Acta, 2023, 62(10): 557-568.

- [102] Zhang T, Wang D, Lu Y. RheologyNet: A Physics-Informed Neural Network Solution to Evaluate the Thixotropic Properties of Cementitious Materials[J]. *Cement and Concrete Research*, 2023, 168: 107157.
- [103] Nagrani P P, Kulkarni R V, Kelkar P U, et al. Data-Driven Rheological Characterization of Stress Buildup and Relaxation in Thermal Greases[J]. *Journal of Rheology*, 2023, 67(6): 1129-1140.
- [104] Tucny J M, Durve M, Montessori A, et al. Learning of Viscosity Functions in Rarefied Gas Flows with Physics-Informed Neural Networks[J]. *Computers and Fluids*, 2024, 269: 106114.
- [105] Howard A, Dong J, Patel R, et al. Machine Learning Methods for Particle Stress Development in Suspension Poiseuille Flows[J]. *Rheologica Acta*, 2023, 62(10): 507-534.
- [106] Mahmoudabadbozchelou M, Caggioni M, Shahsavari S, et al. Data-Driven Physics-Informed Constitutive Metamodeling of Complex Fluids: A Multifidelity Neural Network (MFNN) Framework[J]. *Journal of Rheology*, 2021, 65(2): 179-198.
- [107] Mahmoudabadbozchelou M, Kamani K M, Rogers S A, et al. Digital Rheometer Twins: Learning the Hidden Rheology of Complex Fluids through Rheology-Informed Graph Neural Networks[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2022, 119(20): e2202234119.
- [108] Sato T, Miyamoto S, Kato S. Rheo-SINDy: Finding a Constitutive Model from Rheological Data for Complex Fluids Using Sparse Identification for Nonlinear Dynamics [J]. *Journal of Rheology*, 2025, 69(1): 15-34.
- [109] Lennon K R, McKinley G H, Swan J W. Scientific Machine Learning for Modeling and Simulating Complex Fluids[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2023, 120(27): e2304669120.
- [110] Mahmoudabadbozchelou M, Kamani K M, Rogers S A, et al. Unbiased Construction of Constitutive Relations for Soft Materials from Experiments via Rheology-Informed Neural Networks[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2024, 121(2): e2313658121.
- [111] Lu L, Jin P, Pang G, et al. Learning Nonlinear Operators via DeepONet Based on the Universal Approximation Theorem of Operators[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2021,

3(3): 218-229.

- [112] Rashid M M, Pittie T, Chakraborty S, et al. Learning the stress-strain fields in digital composites using Fourier neural operator[J]. *Iscience*, 2022, 25(11): 105452.
- [113] You H, Zhang Q, Ross C J, et al. Learning deep implicit Fourier neural operators (IFNOs) with applications to heterogeneous material modeling[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 398: 115296.
- [114] Elman J L. Finding Structure in Time[J]. *Cognitive Science*, 1990, 14(2): 179-211.
- [115] Schmidhuber J, Hochreiter S, et al. Long short-term memory[J]. *Neural Comput*, 1997, 9(8): 1735-1780.
- [116] Cho K, Van Merriënboer B, Gulcehre C, et al. Learning Phrase Representations Using RNN Encoder – Decoder for Statistical Machine Translation[C]//Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). Doha, Qatar: Association for Computational Linguistics, 2014: 1724-1734.
- [117] Huang J, Xu Y, Qi S, et al. Ultrahigh Energy-Dissipation Elastomers by Precisely Tailoring the Relaxation of Confined Polymer Fluids[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 3610.

## 攻读博士/硕士学位期间取得的研究成果

一、已发表（包括已接受待发表）的论文，以及已投稿、或已成文打算投稿、或拟成文投稿的论文情况（只填写与学位论文内容相关的一部分）：

序号	作者（全体作者，按顺序排列）	题 目	发表或投稿刊物名称、级别	发表的卷期、年月、页码	与学位论文哪一部分（章、节）相关	被索引收录情况
1	redfu、Mahmoudabad-bozchelou、Lennon	Dissipative particle dynamics simulations of self-assembly in solution of bottlebrush copolymers with different topologies	ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS)	2024.04 100(10)	第三章	
2						

注：在“发表的卷期、年月、页码”栏：

1. 如果论文已发表，请填写发表的卷期、年月、页码；
2. 如果论文已被接受，填写将要发表的卷期、年月；
3. 以上都不是，请据实填写“已投稿”，“拟投稿”。

不够请另加页。

二、与学位内容相关的其它成果（包括专利、著作、获奖项目等）

## 致 谢