

DOI: 10.11883/bzycj-2025-0103

# 基于 GNN/KAN 的高应变速率金属材料 本构关系的表征方法\*

袁基宸<sup>1</sup>, 黄夏旭<sup>1</sup>, 解国良<sup>2</sup>

(1. 北京科技大学机械工程学院, 北京 100083;

2. 北京科技大学新金属材料全国重点实验室, 北京 100083)

**摘要:** 为准确表征金属材料在高应变速率下的应力-应变本构关系, 提出了基于图神经网络 (graph neural networks, GNN) 和 KAN (Kolmogorov-Arnold networks) 的本构关系的高精度预测模型。为解决传统 Johnson-Cook (JC) 模型不考虑温度、应变速率与应变之间的耦合效应问题, 在 GNN 模型中构建图结构数据以描述多维参数的非线性关联, 在 KAN 模型中基于 Kolmogorov-Arnold 定理实现高维输入空间的非线性映射。基于 ODS (oxide dispersion strengthened) 铜合金的高应变速率压缩实验, 评估了 GNN、KAN 和 JC 的本构关系描述和预测精度。结果表明: GNN 与 KAN 模型在测试集中的平均相对误差分别为 8.0% 与 9.0%, 决定系数均高于 0.95, 显著优于 JC 模型 (平均相对误差为 38.0%, 决定系数为 0.75); 将所构建的本构关系模型应用在有限元仿真中, GNN 和 KAN 模型预测的等效塑性应变与应力分布更符合理论特征, 而 JC 模型无法准确描述材料的软化阶段, 仿真结果偏差较大。所构建的模型能有效捕捉高应变速率下材料的多场耦合特性, 为极端载荷条件下的应力-应变本构关系提供了新的预测方法。

**关键词:** 深度学习; 高应变速率; 本构关系; 图神经网络; KAN 网络; 动态力学性能预测

中图分类号: O347.3

国标学科代码: 13015

文献标志码: A

## Characterization method of material constitutive relationship at high strain rates based on GNN/KAN

YUAN Jichen<sup>1</sup>, HUANG Xiaxu<sup>1</sup>, XIE Guoliang<sup>2</sup>

(1. School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;

2. National Key Laboratory of New Metal Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

**Abstract:** To accurately characterize the stress-strain constitutive relationship of metal materials under high strain-rate conditions, a novel, high-precision constitutive-relationship-prediction model based on Graph Neural Networks (GNNs) and Kolmogorov-Arnold Networks (KANs) was developed. Traditional Johnson-Cook (JC) models often fail to account for the coupling effects among temperature, strain rate, and strain, all of which are crucial for describing the dynamic behavior of materials under extreme conditions. This limitation was addressed by constructing graph-structured data in the GNN model to capture the nonlinear correlations of multidimensional parameters and by leveraging the Kolmogorov-Arnold theorem in the KAN model to achieve precise mapping of high-dimensional input spaces. The research methodology involved several key steps. Experimental data from ODS copper subjected to high-strain-rate compression were collected using a split Hopkinson pressure bar (SHPB) system and subsequently preprocessed. The dataset included temperature, strain rate, strain, and stress. In the GNN model, when temperature and strain rate were held constant, nodes were connected sequentially based on strain values to form edges. When temperature was held constant, a reasonable threshold was established between nodes with

\* 收稿日期: 2025-04-02; 修回日期: 2025-07-01

基金项目: 国家重点研发计划 (2021YFB3700700)

第一作者: 袁基宸 (2002—), 男, 硕士, M202320731@xs.ustb.edu.cn

通信作者: 黄夏旭 (1985—), 男, 博士, 副教授, huangxx@ustb.edu.cn

adjacent strain rates, and nodes within this threshold were connected to form edges. The GNN employed a Message Passing Neural Network (MPNN) architecture to learn and predict material properties. Model parameters were optimized using the Adam optimizer, with the Root Mean Squared Error (RMSE) serving as the loss function. The KAN model was constructed based on the Kolmogorov-Arnold representation theorem and consisted of multiple KAN-Linear layers. Each KAN-Linear unit included base weights and spline weights. Base weights handled linear relationships through traditional linear transformations, while spline weights managed nonlinear mappings via B-spline interpolation. Both models were trained on the preprocessed dataset, and their performance was evaluated using metrics such as the Mean Relative Error (MRE), Root Mean Squared Error (RMSE), and the coefficient of determination ( $R^2$ ). The GNN model achieved an average MRE of 9.2% with an  $R^2$  value exceeding 0.95, while the KAN model recorded an MRE of 9.1% with a similar  $R^2$  value. Both models significantly outperformed the JC model, which had an MRE of 38% and an  $R^2$  value of 0.75. Furthermore, the predictive capabilities of the GNN and KAN models were validated through finite element simulations. The simulation results demonstrated that the stress-strain distributions predicted by the GNN and KAN models were more consistent with theoretical expectations compared to those predicted by the JC model, particularly in capturing the material's softening phase. The findings highlight the potential of integrating advanced machine-learning techniques, such as GNNs and KANs, into the field of materials science to enhance the accuracy and efficiency of constitutive modeling. These models offer a promising alternative to traditional empirical models and hold significant implications for engineering applications in aerospace, automotive, and other industries where materials are subjected to high strain rates.

**Keywords:** deep learning; high strain rate; constitutive relation; graph neural network; KAN; prediction of dynamic mechanical properties

在汽车、航空和航天等领域,材料在高速撞击、爆炸和超音速飞行等场景下通常处于高应变速率服役状态,此时材料的力学特性与低应变速率或准静态条件下的力学特性存在显著差异。

材料的本构方程是描述应力与温度、应变、应变速率之间关系的函数,表征了材料在受载荷后的动态响应特性。例如,Zerilli-Armstrong (ZA) 模型<sup>[1]</sup>、Viscoplastic 模型<sup>[2]</sup>等是适用于大多数金属材料的本构关系模型,可以描述大多数工程应用场景下材料的弹性、塑性响应趋势。Johnson-Cook(JC)模型<sup>[3]</sup>主要用于描述材料在高应变速率、大应变以及不同环境温度下的本构关系,该模型的构建拟合了大量实验数据,同时考虑了应变硬化、应变率强化以及温度软化效应的影响。然而,JC模型假设了温度、应变速率和应变参数相互独立,这与金属材料在实际变形过程中多物理场耦合的特性不一致,影响了JC模型的精度。另外,JC模型在描述材料的应力-应变关系时更侧重于材料的强化特性,对材料温度软化效应的描述较为简单,导致其在应变率、温度耦合作用条件下精度不足。为此,Liu等<sup>[4]</sup>提出了基于JC模型的修正模型,通过引入额外的参数提高了模型精度,但过多的参数降低了模型效率。因此,寻求高应变速率下能精确、高效地描述材料动态响应特性的方法具有重要的工程意义。

本构方程本质上是多自变量(温度、应变、应变速率)函数关系的拟合问题,换言之,关于材料本构关系的描述问题可以转化为多输入、单输出的回归拟合问题。为提高回归预测的精度和效率,学者们采用机器学习算法(随机森林算法<sup>[5]</sup>、遗传算法<sup>[6]</sup>、支持向量机算法<sup>[7]</sup>、反向传播(back propagation, BP)神经网络算法<sup>[8]</sup>、卷积神经网络算法<sup>[9]</sup>等)来解决此类问题。初红艳等<sup>[10]</sup>建立了预测综合等效应力的BP人工神经网络模型,在锻件高温低应变速率的条件下证明了建立的BP神经网络模型可有效预测综合等效应力。林启权等<sup>[11]</sup>建立了DP980钢板流动应力的BP神经网络预测模型,在高温条件下较精确地预测了DP980钢板在不同温度和材料方向下的流动应力。魏令港等<sup>[12]</sup>提出了基于改进特征筛选的随机森林算法,在锂渣混凝土的28d抗压强度的预测中具有较为显著的优势。王彦磊等<sup>[13]</sup>提出了一种基于随机游走的随机森林算法,该算法以渡槽水位、气温及水温为输入,在较低温环境下能较准确地预测渡槽不同测点的位移及应力。丁军等<sup>[14]</sup>以304不锈钢为例,提出了一种基于改进遗传算法选择算子的优化人工神经网络,采用新模型能有效预测金属在高温低应变速率下的流变应力。黄俊杰等<sup>[15]</sup>提出一

种利用卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)对双层壁冷却结构外壁的三维热应力进行快速评估的方法,在较低温实验条件下解决了对双层壁冷却结构的热应力预测问题。

上述研究人员采用机器学习方法研究了材料力学性能的预测问题,但对高应变速率下材料动态力学性能的研究较少。传统 JC 模型虽然考虑了材料的高应变速率,但忽略了温度和应变速率之间的内在联系。应变速率不变时,温度、应变、应力三维数据能构成单个表征材料特性的曲面。考虑应变速率的连续变化,多个曲面会形成表征材料特性的包络三维空间。该空间由数据点和点之间的关系构成,可以视为图结构数据。图是由顶点的有穷非空集合和顶点之间的边集所构成的一种数据结构,将原始数据转换为图结构数据可以更好地研究温度、应变速率之间的关系。图神经网络(graph neural network, GNN)<sup>[16]</sup>是一种用于处理图结构数据的深度学习算法,研究人员采用 GNN 对材料性能的预测问题进行了研究。董志浩等<sup>[17]</sup>开发了一种基于图神经网络的材料性质预测框架,实现了对分子和晶体通用的、端到端的性质预测。Marco 等<sup>[18]</sup>提出了一个基于人工智能的通用框架,通过图神经网络从几百个数据中学习材料的复杂力学行为,预测了各种材料的变形、应力和应变场。郑哲等<sup>[19]</sup>提出了基于图神经网络的结构力学响应预测模型,用于构件轴力和节点位移的预测任务。KAN(Kolmogorov-Arnold networks)<sup>[20]</sup>是基于 Kolmogorov-Arnold 表示定理提出的神经网络模型,它通过组合多个一维非线性函数来逼近高维输入空间与输出之间的复杂关系,与本文中温度、应变速率、应变等因素与应力之间关系的研究核心相对应,本文尝试将 KAN 模型引入材料力学性能的预测方法中。与已有研究相比,本文首次将图神经网络和 KAN 应用于高应变速率下材料动态力学性能预测。

为提高金属材料在高应变速率下动态力学性能预测的精度,基于 GNN 和 KAN 分别构建本构关系模型。在 GNN 模型中,以消息传递神经网络为基础,对图结构数据的边连接方式进行优化,在相邻节点和处于阈值内的节点之间设置边连接。在 KAN 模型中,基于 KAN 定理构建 KAN-Linear 多层叠加的模型。最后,将两种模型与传统 JC 模型在测试数据下的实验结果进行对比,并在有限元分析软件中进行仿真验证。

## 1 研究方法

本文基于 GNN 和 KAN 分别建立高应变速率下材料动态力学性能的预测模型,研究思路如图 1 所示,其中  $V$  为节点,  $E$  为节点之间相连的边。首先,对原始数据进行数据预处理工作并将其划分为训练集和测试集;然后,基于训练集预测结果误差对 GNN 和 KAN 模型进行参数调优;最后,评估 GNN、KAN 和 JC 模型在测试集上的应力预测结果,并讨论 3 种模型在材料高应变速率下的动态力学性能表征能力。

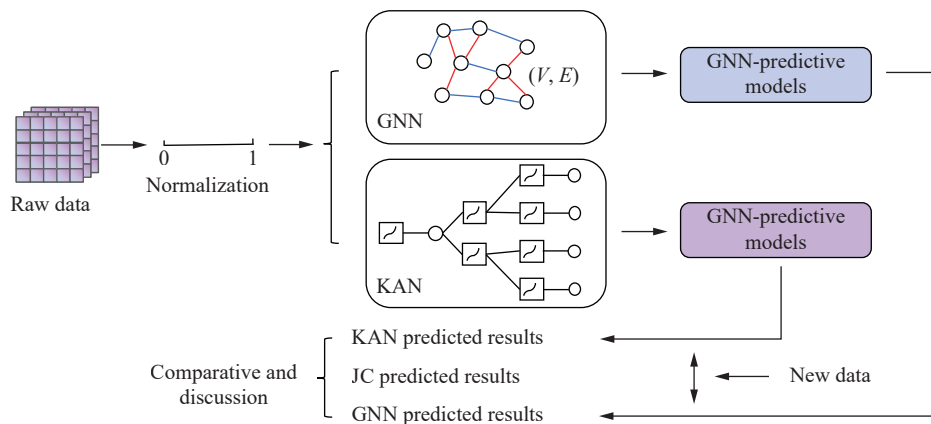


图 1 研究思路

Fig. 1 Research methodology

## 1.1 数据集

本文以氧化物弥散型强化 (oxide dispersion strengthened, ODS) 铜合金作为实验对象。在实际应用中, ODS 铜合金所承载荷多为压缩状态, 且在高应变速率的拉伸实验中获得准确数据的难度较高, 采用其压缩试验数据作为数据集。采用电火花加工技术对退火 ODS 铜合金试样进行加工得到 ODS 铜合金柱, 利用霍普金森压杆 (split Hopkinson pressure bar, SHPB) 进行动态压缩试验。利用非接触式电阻加热箱对样品进行加热从而控制样品温度, 并采用垫圈控制试样的应变以限制位移。SHPB 由入射杆、透射杆和撞击杆组成, 入射杆、透射杆和撞击杆的直径均为 14.5 mm, 由密度为  $8.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$  的高强度 18Ni 马氏体不锈钢制成。整理压缩试验数据得到原始数据集, 有温度、应变速率、应变和应力 4 个维度。其中, 温度为 20 (常温)、200、400、600  $^\circ\text{C}$ , 应变速率分为准静态和动态两种, 准静态应变速率为  $0.001 \text{ s}^{-1}$ , 动态应变速率分布在  $1\,000 \sim 10\,000 \text{ s}^{-1}$ 。

## 1.2 JC 模型

JC 模型适用于预测材料在大变形、高应变速率以及高温等情况下的行为<sup>[21]</sup>, 符合本研究的工况, 所以选取 JC 模型作为本文的对比模型, 可表示为<sup>[3]</sup>:

$$\sigma = (A + B\varepsilon^n)(1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*)(1 - T^{*m}) \quad (1)$$

式中:  $\sigma$  为塑性应力;  $\varepsilon$  为等效塑性应变;  $\dot{\varepsilon}^*$  为无量纲塑性应变率,  $\dot{\varepsilon}^* = \dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0$ , 其中  $\dot{\varepsilon}$  为应变速率,  $\dot{\varepsilon}_0$  为参考应变速率;  $T^*$  为同源温度,  $T^* = (T - T_0)/(T_M - T_0)$ , 其中  $T$  为绝对温度,  $T_M$  为熔化温度,  $T_0$  为参考温度;  $A$  为屈服应力、 $B$  为硬化模量、 $C$  应变率敏感系数、 $m$  为硬化指数和  $n$  为热软化指数, 均为材料参数。本文基于 ODS 铜合金压缩试验对式 (1) 中的参数进行拟合, 得到  $A = -204.65 \text{ MPa}$ 、 $B = 866.96 \text{ MPa}$ 、 $C = 0.04$ 、 $m = 1.12$ 、 $n = 0.15$ 。

## 1.3 图神经网络模型

### 1.3.1 图构建

在利用原始实验数据构建图结构数据时, 不同的数据和节点特征属性需要采用不同的边连接方式。本文中, 原始数据如图 2 所示。实验数据表明: 在恒定温度下, 相邻应变速率对应的应力-应变曲线呈现显著相关性; 当温度和应变速率恒定时, 相邻点之间呈现显著相关性。根据上述节点特征以及 GNN 中节点之间消息传递的基本思想, GNN 模型的图节点的连接方式设计为: 当温度和应变速率恒定时, 按照应变大小将节点进行顺序连接得到边; 当温度恒定时, 在相邻应变速率的节点之间设置合理阈值, 在阈值之内的节点相互连接得到边。

### 1.3.2 图神经网络模型构建

图神经网络 (GNN) 的核心是通过学习来优化图中的属性向量, 包括节点信息、边信息和图的体信息, 这些信息通常用向量表示。消息传递神经网络<sup>[22]</sup> (message passing neural network, MPNN) 是图神经网络的一种常用架构, 用于在图结构数据上进行学习和预测, 它通过节点之间的信息传递和聚合来实现节点特征的更新和图结构信息的学习。本文基于 MPNN 设计模型以预测材料的动态力学性能, 模型结构如图 3 所示。

首先, 输入层接收原始数据经预处理后得到温度、应变速率、应变等节点特征, 并将其传输给隐藏层。隐藏层收到节点特征后, 基于 1.3.1 中边连接的方法将原始数据转化为图结构数据。然后, 基于消息

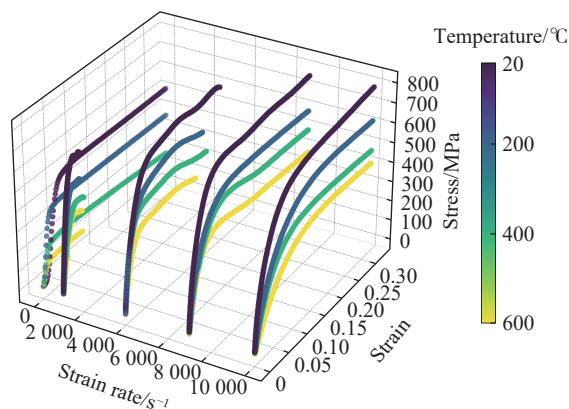


图 2 ODS-铜合金的动态力学性能原始数据

Fig. 2 Raw data of dynamic mechanical properties of ODS-copper alloys

传递机制在图结构数据中传播消息,即每个数据节点向其邻居节点发送其温度、应变速率、应变等特征属性消息。每个节点将自身特征向量、所有相邻节点的特征向量和节点之间的边特征进行信息汇总,再以此作为输入通过节点更新函数对每个节点进行状态更新。更新后,所有节点的温度、应变速率、应变等特征组成图结构数据的图特征,通过图特征可以对测试数据进行应力预测。

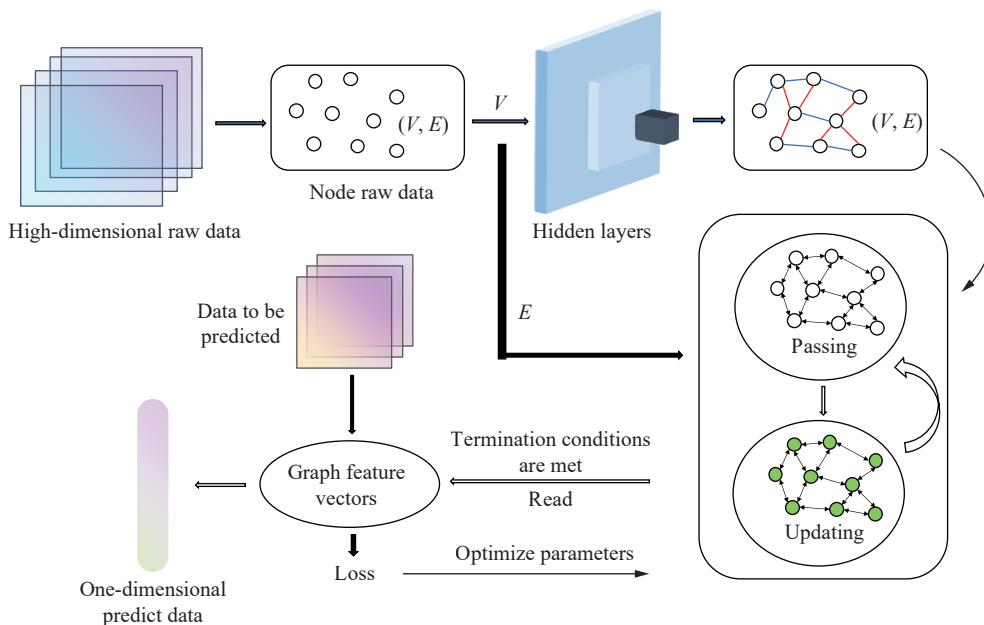


图 3 GNN 模型结构图

Fig. 3 Structure of the GNN model

### 1.4 KAN 网络模型

基于 Kolmogorov-Arnold networks 基本原理构建 KAN 模型,模型结构如图 4 所示,其中  $d \times k$  为输入数据的维度,  $y$  为权重值,  $N$  为模型中 KAN-Linear 线形层的层数。

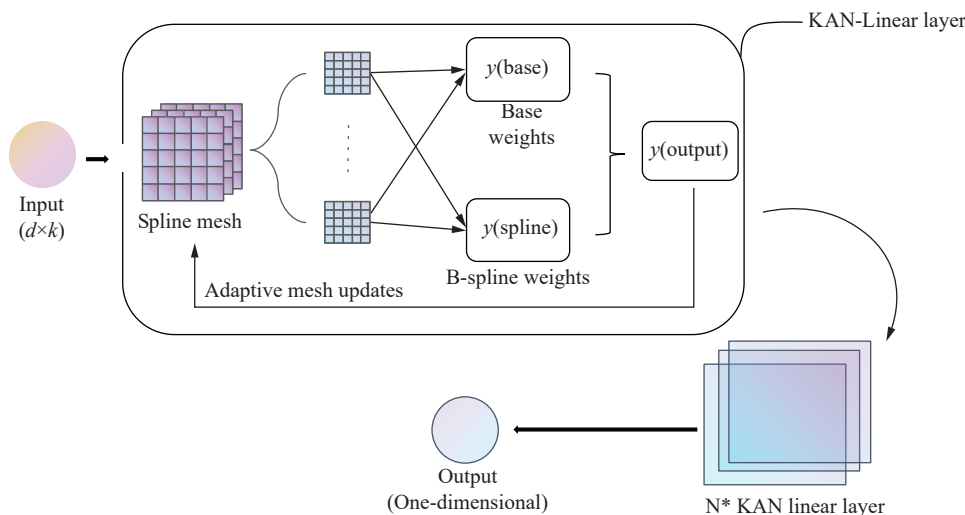


图 4 KAN 模型结构图

Fig. 4 Structural diagram of the KAN model

模型的主要结构为多层 KAN-Linear 层组成的神经网络,它在输入特征与输出之间构建了一个灵活的非线性映射,每一层由基础权重 (base weight) 和样条权重 (spline weight) 组成。首先,将需要训练的原

始数据分成多个样条网格, 每一个网格都做基础权重和样条权重的计算。基础权重通过传统的线性变换来处理输入特征的线性关系, 采用 Kaiming 均匀初始化方法。样条权重则通过 B 样条 (B-spline) 插值方法实现输入空间的非线性映射, 样条插值的控制点在训练过程中会自适应地调整以优化样条函数的逼近能力。另外, 训练过程中根据输入数据分布自适应调整网格点位置。最后, 原始数据经过 KAN-Linear 层处理后得到最终输出, 它是基础权重和样条输出之和。

KAN-Linear 构建完成后, 将多个 KAN-Linear 层堆叠以构成多层神经网络。每一层的输出作为下一层的输入, 逐层提取和组合输入特征的线性及非线性信息。本文构建的 KAN 模型包含一个输入层、若干个隐藏层和一个输出层。输入层将输入特征映射到隐藏层, 输入维度为 3, 包括温度、应变速率、应力。隐藏层中每个隐藏层包含若干个神经元, 由 KAN-Linear 层构成, 非线性激活函数为 SiLU (sigmoid linear unit) 函数。最后, 输出层通过一个线性 KAN-Linear 层将隐藏层的输出映射为预测应力, 输出维度为 1, 即材料应力。

## 1.5 模型训练

### 1.5.1 数据预处理

在 ODS 铜合金的多组压缩试验数据中随机选取两组作为训练集和测试集, 为消除量纲和数量级影响, 对数据进行归一化和反归一化处理, 归一化公式为:

$$x_n = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (2)$$

$$y = y_n \times (y_{\max} - y_{\min}) + y_{\min} \quad (3)$$

式中:  $x_n$  为输入或输出参数的归一化值,  $x$  为输入参数的原始值,  $x_{\max}$  和  $x_{\min}$  为输入参数的最大值和最小值,  $y$  为预测的真实应力值,  $y_n$  为输出参数的归一化值,  $y_{\min}$  和  $y_{\max}$  输出参数的最大值和最小值。

### 1.5.2 模型设置

GNN 模型训练过程中的优化器采用 Adam 优化器, 迭代周期 (epoch) 初始设置为 1500, 损失函数通过计算最终预测输出值和标签值的均方根误差  $\sigma_{\text{RMSE}}$  (root mean squared error, RMSE) 获得, 通过 Pytorch 平台进行训练计算。

KAN 模型的训练采用 Adam 优化器, 并结合均方误差  $\sigma_{\text{MSE}}$  (mean squared error, MSE) 的损失函数来更新模型参数。为防止模型过拟合, 还引入了激活正则化和熵正则化项, 分别约束样条权重的幅度和分布的熵值。迭代周期初始设置为 1500, 通过 Pytorch 平台进行训练计算。

### 1.5.3 评价指标

为了客观评估所设计模型的性能, 本文采用选择决定系数 ( $R^2$ )、均方根误差  $\sigma_{\text{RMSE}}$ , 平均相对误差  $\sigma_{\text{MRE}}$  (mean relative error, MRE) 等指标作为主要的评判标准。 $R^2$  可衡量模型预测的曲线拟合度,  $\sigma_{\text{RMSE}}$  和  $\sigma_{\text{MRE}}$  可衡量模型预测值的准确性。相关公式如下:

$$\sigma_{\text{MSE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4)$$

$$\sigma_{\text{RMSE}} = \sqrt{\sigma_{\text{MSE}}} \quad (5)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (6)$$

$$\sigma_{\text{MRE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (7)$$

## 2 实 验

### 2.1 参数优化

模型训练完成后,通过测试集结果对模型参数进行调优。本文的模型超参数包括学习率、隐藏层节点数、隐藏层数、批量大小等,以预测结果的  $\sigma_{\text{RMSE}}$  作为评判标准对超参数进行优化,结果如图 5 所示。

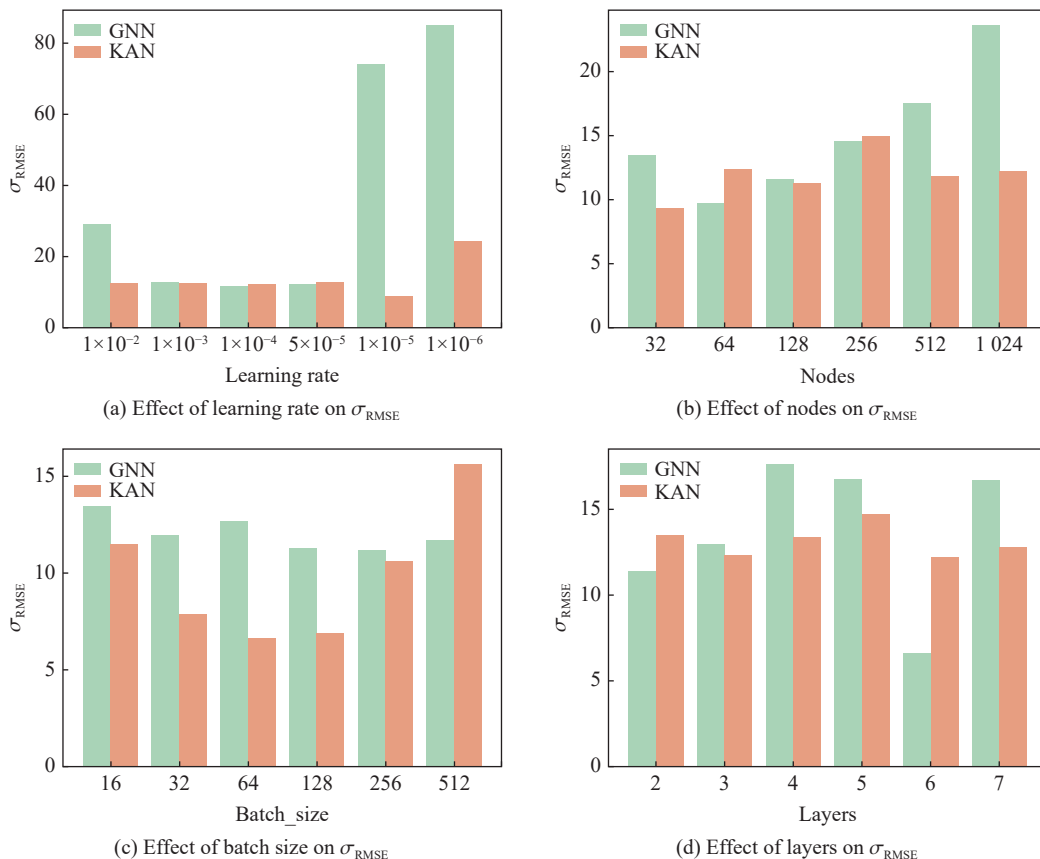


图 5 超参数对  $\sigma_{\text{RMSE}}$  的影响

Fig. 5 Effect of hyperparameters on  $\sigma_{\text{RMSE}}$

较低的学习率虽然可以更好地找到全局最优解,但会导致模型收敛过慢;而较高的学习率则可能导致模型在收敛过程中出现振荡或不稳定现象。对同一组数据设置不同的学习率进行测试,结果如图 5(a) 所示,学习率为  $10^{-4}$  时, GNN 模型的均方根误差  $\sigma_{\text{RMSE}}$  最低;学习率为  $10^{-5} \sim 5 \times 10^{-5}$  时, KAN 模型的均方根误差  $\sigma_{\text{RMSE}}$  最低。

当节点数较少时,模型的表现趋于欠拟合,无法有效捕捉输入数据的复杂特征;当节点数过多时,模型容易发生过拟合。如图 5(b) 所示, KAN 模型对于节点数的变化并不敏感,节点数设置合理即可,本文设为 128。对于 GNN 模型,随着节点数的增加,精度降低;但是在节点数小于 512 时,预测数据的曲线呈现多段折线型,不符合材料的应力-应变曲线应平滑的实际结果;当节点数为 512 时,预测曲线趋于平滑。因此, GNN 模型的节点数设为 512。

小批量有助于模型在训练过程中的微调,从而提高模型的准确性;较大的批量能够提升训练速度,但容易导致模型陷入局部最优。如图 5(c) 所示,批大小(batch size)对于 GNN 模型的影响不大,其值为 32 时最优;批大小对 KAN 模型的影响较大,其值为 64 时最优。

低隐藏层数的模型在处理简单或低维数据时,通常表现出良好的泛化能力;增加隐藏层的数量能显

著提高模型的非线性拟合能力,但模型的训练效率下降且可能导致过拟合现象。如图 5(d) 所示,隐藏层为 6(3)层时,GNN(KAN)模型在准确性和训练效率之间取得最佳平衡。

## 2.2 实验结果

根据 2.1,两个模型的最优超参数为:(1)GNN 模型,节点数为 512、学习率为  $10^{-4}$ 、隐藏层数为 6、批量数为 32;(2)KAN 模型,节点数为 128、学习率为  $10^{-5}$ 、隐藏层数为 3、批量数为 64。基于最优超参数对两个模型训练完成后,GNN、KAN 和 JC 模型在测试集上的评估结果如图 6 所示。GNN 和 KAN 两种模型预测结果的  $\sigma_{\text{MRE}}$  范围分别为 0.05~0.17 和 0.03~0.16,平均值分别为 0.08(8%)和 0.09(9%),JC 模型的  $\sigma_{\text{MRE}}$  范围为 0.2~0.52,平均值为 0.38(38%)。GNN 和 KAN 的  $\sigma_{\text{MRE}}$  最大值均小于 JC 模型的  $\sigma_{\text{MRE}}$  最小值。另外,GNN 和 KAN 的预测值决定系数均在 0.95 以上,而 JC 模型的预测值决定系数的平均值为 0.75,表明相较于 JC 模型,两种模型在高应变速率下的 ODS 铜合金应力预测中均具有更高的精度。

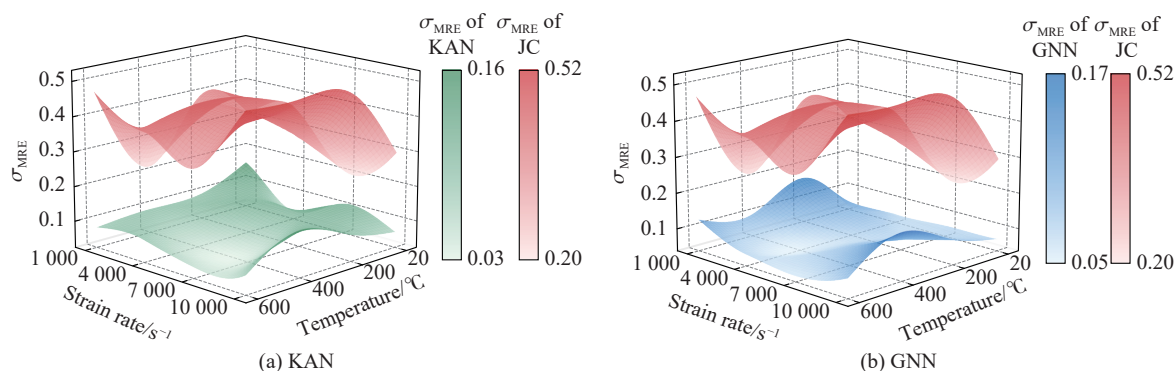


图 6 GNN、KAN 模型与 JC 模型的预测精度对比

Fig. 6 Comparison of the prediction accuracy of GNN and KAN models with JC models

在数据集内和数据集外选取 4 组工况:  $20\text{ }^{\circ}\text{C}/4\text{ }000\text{ s}^{-1}$ 、 $20\text{ }^{\circ}\text{C}/4\text{ }500\text{ s}^{-1}$ 、 $400\text{ }^{\circ}\text{C}/6\text{ }500\text{ s}^{-1}$  和  $400\text{ }^{\circ}\text{C}/7\text{ }000\text{ s}^{-1}$ 。将 GNN、KAN、JC 模型在上述工况下应力的预测数据与真实数据(图 7)进行对比,以验证模型的有效性和内推能力。预测数据的  $R^2$  和  $\sigma_{\text{MRE}}$  如表 1 所示。

如表 1 所示,在  $20\text{ }^{\circ}\text{C}/4\text{ }000\text{ s}^{-1}$  和  $400\text{ }^{\circ}\text{C}/7\text{ }000\text{ s}^{-1}$ (数据集内)工况下,GNN(KAN)模型的平均相对误差  $\sigma_{\text{MRE}}$  均为 10% 以下,精度为 93.5% 和 91%(96.0% 和 90.8%)。两种模型  $R^2$  的平均值均达到了 0.97 以上,而 JC 模型中这两项指标均低于 GNN 和 KAN 模型。另外,由图 7(a)~(b) 可知,GNN 和 KAN 模型的应力-应变曲线和实际曲线基本一致,而 JC 模型无法体现材料达到屈服状态后发生的软化现象,说明 GNN 和 KAN 模型在高应变速率下对应力以及应力变化趋势的预测良好,相较于传统 JC 模型能更好地描述材料的动态力学性能。

如表 1 所示,在  $20\text{ }^{\circ}\text{C}/4\text{ }500\text{ s}^{-1}$  和  $400\text{ }^{\circ}\text{C}/6\text{ }500\text{ s}^{-1}$ (数据集外)工况下,GNN(KAN)模型的预测精度分别为 98.5% 和 97%(91.7% 和 95.2%), $R^2$  值均在 0.97 以上。由图 7(c)~(d) 可知,相较于 JC 模型,两种模型预测的应力-应变曲线更符合实际,且预测精度在 90% 以上,证明了两种模型良好的内推能力,能较准确地预测处于数据集内但数据集中未出现的实验工况。另外,该工况下 GNN 模型比 KAN 模型的精度更高,说明 GNN 模型的内推能力更强。

同时,由图 2 可知,随着应变率、温度的变化,ODS 铜合金的应变强化-软化行为发生了明显变化。在高温高应变率条件下,应变强化随着应变的增加而逐渐减弱,甚至出现应变软化现象。这表明,应力-应变之间的本构关系,是应变率、温度效应共同耦合作用的结果。采用 JC 模型描述应力-应变关系时,往往通过特征应变率(一般是准静态条件下)的应力-应变行为去求解 JC 模型中的参数。因此,传统 JC 模型无法准确描述复杂条件下应变强化和软化同时存在的情况,导致图 7 中 JC 模型的预测值与实验值在高应变段的相差较大。相比之下,GNN 和 KAN 模型能更准确地表征材料的动态变化过程。

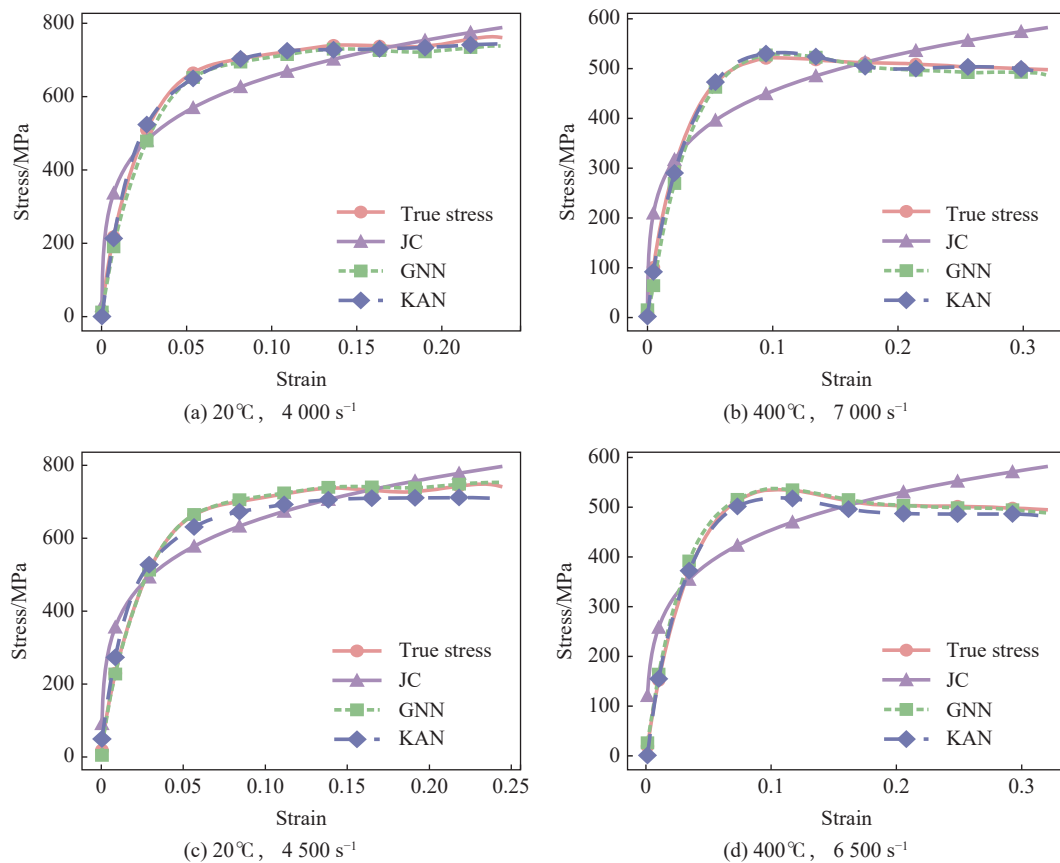


图 7 不同工况下 JC 模型、GNN 模型、KAN 模型的预测值与真实值对比

Fig. 7 Comparison of the predicted values of the JC model, GNN model, and KAN model under different working conditions

表 1 模型预测结果的精度对比

Table 1 Comparison of the prediction accuracy of different models

工况	$\sigma_{MRE}$			$R^2$		
	GNN/%	KAN/%	JC/%	GNN	KAN	JC
20 °C/4 000 s <sup>-1</sup>	6.5	<b>4.0</b>	36.0	0.9927	<b>0.9972</b>	0.9073
20 °C/4 500 s <sup>-1</sup>	<b>1.5</b>	8.3	24.2	<b>0.9993</b>	0.9785	0.8978
400 °C/6 500 s <sup>-1</sup>	<b>3.0</b>	4.8	38.1	<b>0.9970</b>	0.9929	0.7975
400 °C/7 000 s <sup>-1</sup>	9.0	<b>9.2</b>	42.7	0.9896	<b>0.9980</b>	0.8590

ODS 铜合金在工程应用中的温度一般不超过 600 °C 且应变速率在 7000~8000 s<sup>-1</sup> 时已处于较高水平, 数据集内的工况已涵盖 ODS 铜合金的实际应用工况。另外, 在数据集内工况的预测误差方面, GNN 模型略低于 KAN 模型, 但在数据集外的工况下, GNN 模型的预测误差低于 KAN 模型, 说明 GNN 模型的整体预测能力优于 KAN 模型。在实际应用中, 对正常工程范围内的工况, 使用 GNN 模型进行预测的效果更佳。综上, 本文建立的两种模型, 在高应变速率下材料动态力学性能的预测问题中, 优于传统的 JC 模型。

### 2.3 仿真验证

采用有限元软件对 ODS 铜合金的压缩过程进行模拟, 以 GNN、KAN、JC 模型在 400 °C/7000 s<sup>-1</sup> 工况下的应力预测结果(图 7(b))作为输入。几何模型为直径 8 mm、高度 12 mm 的压缩铜柱, 下端为固定面, 上端施加外部载荷( $F$ )以模拟试件的压缩过程, 得到的模拟结果如图 8~10 所示, 并与同尺寸 ODS 铜合金真实压缩试验结果图和金属圆柱镦粗过程中的应力应变理论<sup>[23]</sup> 进行对比。

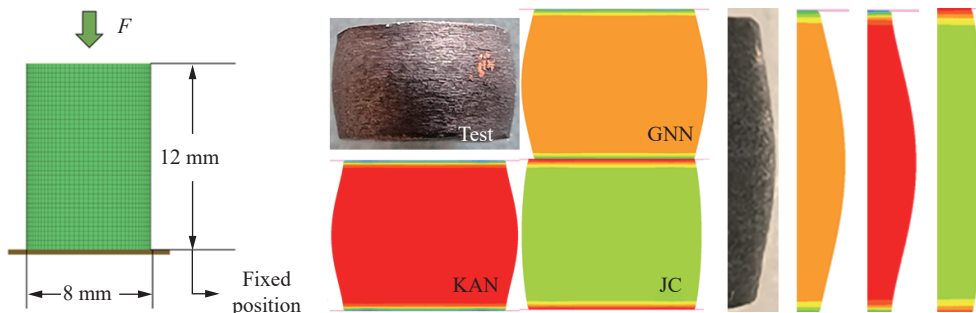


图 8 试样墩粗变形结果与仿真变形结果

Fig. 8 The rough deformation results of the specimen pier and the simulation deformation results

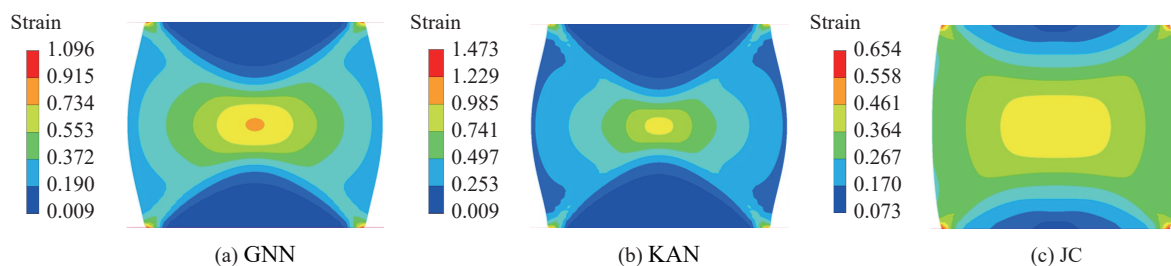


图 9 仿真应变云图

Fig. 9 Comparison of the strain diagrams of the three models

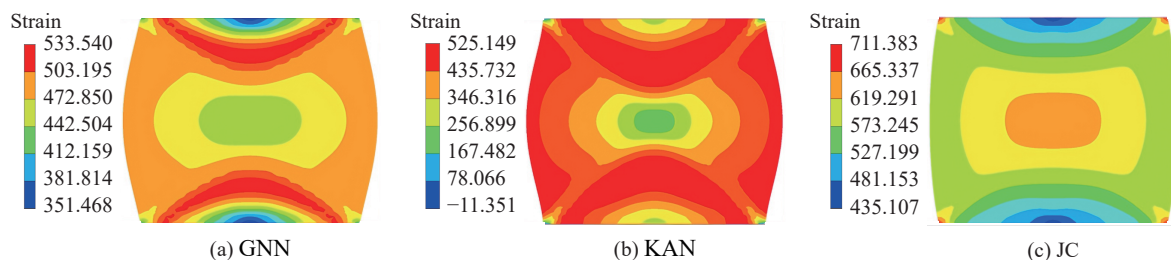


图 10 仿真应力云图

Fig. 10 Comparison of stress diagrams of the three models

图 8 为 3 种模型模拟的试样墩粗变形结果。在压缩过程中, 圆柱上、下接触面受到限制, 抑制了材料的轴向变形, 材料倾向于径向扩展, 从而在侧面产生膨胀。由于压缩过程中体积保持不变, 圆柱体需要通过径向膨胀来补偿体积变化, 但圆柱体的接触面存在摩擦力抑制了径向膨胀, 使得两端膨胀速度小于中部区域。综合上述因素, 金属圆柱压缩后的外形呈现如图 8 所示的“鼓形”。GNN 和 KAN 模型的模拟形变结果与试样的墩粗变形结果基本一致, 均呈“鼓形”, 且 GNN 模型的侧面形变与理论情况最为接近, 而 JC 模型在圆柱中部没有明显的突起, 与试样相差较大, 说明 GNN 和 KAN 模型能更准确地描述材料力学性能的变化特征。

图 9 为 3 种模型对应的等效塑性应变云图。圆柱在墩粗过程中, 应变最小值发生在接触端面附近的一个较小区域, 应变最大值出现在中心对称面轴心部位的一个球形区域内, 变形区域大致可分为 3 个区域: 难变形区、大变形区和小变形区。在两端接触面称为难变形区, 呈对称圆锥体形状, 此处的应变最小。小变形区位于圆柱外侧鼓形处, 呈凸起状, 应变略大于难变形区。易变形区介于难变形区与小变形区之间, 呈“X”形状。基于文献 [23] 中的理论应变分布, GNN 和 KAN 模型所呈现的应变分布与理论情况接近, 3 种分区清晰且形状大体一致; 而 JC 模型呈现的应变分布分区界限模糊, 与理论分区形状相差较大, 说明 JC 模型不能准确描述圆柱压缩过程中的形变过程。

图 10 为 3 种模型对应的等效塑性应力云图。圆柱在镦粗过程中, 由于接触表面的摩擦力影响, 应力分布不均匀。通常情况下, 外表面区域的等效塑性应力较大, 而内部区域的应力较小。施加载荷后, 金属向外侧流动, 使得两侧鼓形处应力较大, 而中心部位的应力变小, 应力整体呈现从外向内逐渐减小的梯度分布。GNN 和 KAN 模型模拟的应力分布与理论分布基本一致, 而 JC 模型所呈现的应力分布在中心部位大于附近及外侧, 未能准确描述金属圆柱在镦粗过程中的应力分布。

综上所述, 在高应变速率下金属动态力学性能的预测中, 与实验相比, JC 模型预测的应力-应变曲线在早期应变强化和后期应变软化部分的误差较大; 本文采用的 GNN 和 KAN 模型, 能更准确地描述应力-应变关系。其次, 从金属圆柱镦粗过程的模拟结果来看, JC 模型所呈现的应变分布未能准确描述圆柱压缩过程中的 3 个变形区域和形状, 其模拟的中心区域等位置的应力大小和分布与理论结果偏差较大; 而本文的两种模型所呈现的应力和应变分布与理论结果基本一致。因此, 相较于 JC 模型, GNN 和 KAN 模型在高应变速率下材料的动态力学性能预测方面具有显著优势。

### 3 结 论

本文引入 GNN 和 KAN 两种深度学习模型, 构建了适用于描述高应变速率下材料动态力学性能的本构关系模型。其中, GNN 模型将数据转化为图结构数据来描述温度、应变速率之间的关系, 并通过消息传递的方式构建特征向量。KAN 模型通过多个一维非线性函数来逼近高维输入空间与输出之间的复杂关系, 模拟了材料温度、应变速率、应变与应力之间的关系。通过测试集数据的预测结果和对 ODS 铜合金柱镦粗过程进行数值模拟, 验证了模型的有效性, 并得到以下主要结论。

(1) 基于 GNN 模型, 提出基于数据特点构建的边连接方式, 将材料的应力预测转化为模型的图特征预测。在 KAN 模型中, 基于 KAN 定理构建 KAN-Linear 多层叠加的模型。

(2) 通过测试集结果和有限元仿真实验证明了模型的有效性和内推能力。两种模型的预测精度均值达到了 90% 以上, 明显高于传统的 JC 模型, 证明了模型良好的预测能力。模型的  $R^2$  均处于较高水平, 证明两种模型均能准确描述材料地应力变化趋势。有限元仿真结果证明了相较于 JC 模型, 两种模型能更准确地表征材料在高应变速率下的动态力学性能。

(3) 基于 GNN 和 KAN 建立的本构关系模型能满足性能评价、仿真计算等工程精度的需要, 在材料性能预测等领域具有良好的前景。

### 参考文献:

- [1] ZERILLI F J, ARMSTRONG R W. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations [J]. *Journal of Applied Physics*, 1987, 61(5): 1816–1825. DOI: 10.1063/1.338024.
- [2] PERZYNA P. Fundamental problems in viscoplasticity [J]. *Advances in Applied Mechanics*, 1966, 9: 243–377. DOI: 10.1016/S0065-2156(08)70009-7.
- [3] Johnson G R. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures[C]// *Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics*, The Hague, Netherlands, 1983.
- [4] LIU F X, WANG S J, XIE G L, et al. Microstructural evolution and modified constitutive model of nanoscale  $Al_2O_3$  dispersion-strengthened copper under high strain rate deformation [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2024, 913: 146997. DOI: 10.1016/j.msea.2024.146997.
- [5] BREIMAN L. Random forests [J]. *Machine Learning*, 2001, 45(1): 5–32. DOI: 10.1023/A:1010933404324.
- [6] MITCHELL M. An introduction to genetic algorithms [M]. Cambridge: The MIT Press, 1998. DOI: 10.7551/mitpress/3927.001.0001.
- [7] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks [J]. *Machine Learning*, 1995, 20(3): 273–297. DOI: 10.1007/bf00994018.
- [8] RUMELHART D E, HINTON G E, WILLIAMS R J. Learning representations by back-propagating errors [J]. *Nature*, 1986, 323(6088): 533–536. DOI: 10.1038/323533a0.
- [9] LECUN Y, BOSER B, DENKER J S, et al. Backpropagation applied to handwritten zip code recognition [J]. *Neural Computation*, 1989, 1(4): 541–551. DOI: 10.1162/neco.1989.1.4.541.

- [10] 初红艳, 赵凯林, 程强. 盘形锻件等效应力分析及神经网络预测 [J]. *北京工业大学学报*, 2021, 47(2): 103–111. DOI: 10.11936/bjtxb2019080014.  
CHU H Y, ZHAO K L, CHENG Q. Equivalent stress analysis and neural network prediction of disk forgings [J]. *Journal of Beijing University of Technology*, 2021, 47(2): 103–111. DOI: 10.11936/bjtxb2019080014.
- [11] 林启权, 卜根, 王镇柱, 等. 基于 BP 神经网络的 DP980 钢板本构关系 [J]. *塑性工程学报*, 2022, 29(8): 139–144. DOI: 10.3969/j.issn.1007-2012.2022.08.017.  
LIN Q Q, BU G, WANG Z, et al. Constitutive relationship of DP980 steel sheet based on BP neural network [J]. *Journal of Plasticity Engineering*, 2022, 29(8): 139–144. DOI: 10.3969/j.issn.1007-2012.2022.08.017.
- [12] 魏令港, 黄靓, 曾令宏. 基于改进特征筛选的随机森林算法对锂渣混凝土强度的预测研究 [J]. *材料导报*, 2024, 38(9): 22050319. DOI: 10.11896/cldb.22050319.  
WEI L G, HUANG L, ZENG L H. Using random forest with improved variable selection to predict the compressive strength of concrete with lithium slag [J]. *Materials Reports*, 2024, 38(9): 22050319. DOI: 10.11896/cldb.22050319.
- [13] 王彦磊, 王仁超, 龙益彬, 等. 基于改进随机森林算法的渡槽位移及应力预测模型 [J]. *水电能源科学*, 2020, 38(5): 122–124. DOI: 10.20040/j.cnki.1000-7709.2020.05.030.  
WANG Y L, WANG R C, LONG Y B, et al. Aqueduct displacement and stress prediction model based on improved random forest algorithm [J]. *Water Resources and Power*, 2020, 38(5): 122–124. DOI: 10.20040/j.cnki.1000-7709.2020.05.030.
- [14] 丁军, 古榆川, 黄霞, 等. 基于改进遗传算法优化人工神经网络的 304 不锈钢流变应力预测准确性研究 [J]. *机械工程学报*, 2022, 58(10): 78–86. DOI: 10.3901/JME.2022.10.078.  
DING J, GU Y C, HUANG X, et al. Research on prediction accuracy of flow stress of 304 stainless steel based on artificial neural network optimized by improved genetic algorithm [J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2022, 58(10): 78–86. DOI: 10.3901/JME.2022.10.078.
- [15] 黄俊杰, 朱剑琴, 程泽源. 基于卷积神经网络双层壁三维热应力预测方法 [J]. *航空动力学报*, 2023, 38(7): 1658–1667. DOI: 10.13224/j.cnki.jasp.20220754.  
HUANG J J, ZHU J Q, CHENG Z Y. Three-dimensional thermal stress prediction method in double-wall structure using convolutional neural networks [J]. *Journal of Aerospace Power*, 2023, 38(7): 1658–1667. DOI: 10.13224/j.cnki.jasp.20220754.
- [16] SCARSELLI F, GORI M, TSOI A C, et al. The graph neural network model [J]. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2009, 20(1): 61–80. DOI: 10.1109/TNN.2008.2005605.
- [17] 董志浩. 基于图神经网络的材料性质预测及其应用研究 [D]. 苏州: 苏州大学, 2023. DOI: 10.27351/d.cnki.gszhu.2023.000186.  
DONG Z H. Research and applications of material property prediction based on graph neural networks [D]. Suzhou: Soochow University, 2023. DOI: 10.27351/d.cnki.gszhu.2023.000186.
- [18] MAURIZI M, GAO C, BERTO F. Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks [J]. *Scientific Reports*, 2022, 12(1): 21834. DOI: 10.1038/s41598-022-26424-3.
- [19] 郑哲, 江文强, 王璋奇, 等. 基于图神经网络的结构力学响应预测模型研究 [J/OL]. *工程力学*, 1–11. [2024-12-09]. <https://engineeringmechanics.cn/cn/article/doi/10.6052/j.issn.1000-4750.2023.10.0801>. DOI: 10.6052/j.issn.1000-4750.2023.10.0801.  
ZHENG Z, JIANG W Q, WANG Z Q, et al. Research on the prediction model of mechanical response for structures based on graph neural network [J/OL]. *Engineering Mechanics*, 1–11 [2024-12-09]. <https://engineeringmechanics.cn/cn/article/doi/10.6052/j.issn.1000-4750.2023.10.0801>. DOI: 10.6052/j.issn.1000-4750.2023.10.0801.
- [20] LIU Z M, WANG Y X, VAIDYA S, et al. KAN: Kolmogorov-Arnold networks [C]//Proceedings of the 13th International Conference on Learning Representations. Singapore: ICLR, 2025: 1–47.
- [21] 夏天, 高志玉, 赵斐, 等. 金属材料塑性本构模型建立研究进展 [J]. *塑性工程学报*, 2024, 31(9): 23–35. DOI: 10.3969/j.issn.1007-2012.2024.09.002.  
XIA T, GAO Z Y, ZHAO F, et al. Research progress on establishing of plastic constitutive models for metal materials [J]. *Journal of Plasticity Engineering*, 2024, 31(9): 23–35. DOI: 10.3969/j.issn.1007-2012.2024.09.002.
- [22] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Neural message passing for quantum chemistry [C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. Sydney: PMLR, 2017: 1263–1272.
- [23] 王平. 金属塑性成型力学 [M]. 第 2 版. 北京: 冶金工业出版社, 2013.

(责任编辑 王晓双)