爆 炸 与 冲 击
Explosion and Shock Waves
DOI：10.11883/bzycj-2026-0330

改进 PINN 方法研究碳化硅陶瓷球二维冲击破碎扩散特性*

熊颖，徐松林，张晓曼，冯浩然，王鹏飞

(中国科学技术大学 工程科学学院近代力学系，安徽 合肥 230027)

摘 要：碳化硅(silicon carbide, SiC)陶瓷冲击破碎特性的研究对于防护工程等领域有着重要的应用意义。冲击作用下，SiC 陶瓷球接触端易出现应变能集中、剪切激活和损伤局部化，失效区域随加载由接触端向内部推进。该过程受接触边界、应力偏量和应变能释放等因素共同影响。为连续描述这一过程，本文建立应变能场驱动的剪切激活异质扩散模型，并分别构建一维强形式物理信息神经网络(physics-informed neural network, PINN)和二维时间逐步变分 PINN 求解框架。针对一维场“两接触端局部高值—中部低值”的极端非均匀分布，在网络输入中引入双尺度指数衰减特征，并结合高峰－低谷复合加权损失和接触端聚焦采样，增强网络对局部尖峰、高梯度区域及失效阵面推进过程的解析能力。以有限元–离散元耦合方法(combined finite-discrete element method, FDEM)应变能场重构初始分布，构建高分辨率有限差分法基准解，并利用改进 PINN 求解失效变量沿冲击方向的时空演化。结果表明，PINN 与有限差分法(finite difference method, FDM)基准解整体吻合较好，全时空场相对 L_2误差为 1.97×10^{-2}，误差主要集中在接触端局部尖峰和后期高梯度区域。针对二维圆域，采用调和提升嵌入 Dirichlet 边界条件，并结合极坐标 Gauss–Legendre 积分构建逐时间步变分 PINN。在给定初始与边界条件下，模型预测左右接触端高值区逐步向圆域内部扩展，内部低幅失效水平随时间升高。所构建方法可作为 SiC 陶瓷球失效阵面演化分析的神经场计算补充手段，并为后续结合实验观测或 FDEM 数据开展损伤场反演提供计算基础。

关键词：冲击动力学；PINN；失效阵面；剪切激活扩散；应变能
中图分类号：O382 **国标学科代码：**13035 **文献标识码：**A

Two-dimensional impact fragmentation and diffusion characteristics of SiC spheres based on an improved PINN

XIONG Ying, XU Songlin, ZHANG Xiaoman, FENG Haoran, WANG Pengfei

(*Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, Anhui, China;*)

Abstract: Understanding the impact fragmentation of silicon carbide (SiC) ceramics is important for protective engineering and related applications. Under impact loading, strain-energy concentration, shear activation, and damage localization tend to occur near the contact ends of an SiC ceramic sphere, causing the failure regions to propagate inward as loading proceeds. This evolution is jointly governed by contact boundary conditions, deviatoric stress, and strain-energy release. To continuously describe this process continuously, a strain-energy-field-driven, shear-activated heterogeneous diffusion model was developed, together with a one-dimensional strong-form physics-informed neural network (PINN) and a two-dimensional time-marching variational PINN. For the highly nonuniform one-dimensional field, characterized by localized high values at both contact ends and low values in the interior, dual-scale exponentially decaying input features, a peak–valley composite weighted loss, and contact-end-focused sampling were introduced to improve the resolution of localized peaks, high-gradient regions, and failure-front propagation. The initial field was reconstructed from an FDEM strain-energy field, and a high-resolution finite-difference method (FDM) solution

*收稿日期：2026-10-12；修回日期：2026-11-19；
基金项目：国家自然科学基金(11872361)；安徽省自然科学基金(1708085MA05)；国家自然科学基金(12372372)；国家自然科学基金(12672514)；国家自然科学基金(W2542019)；
第一作者：熊颖(2000－)，女，博士生，E-mail: xy199912@mail.ustc.edu.cn;
通信作者：徐松林(1971－)，男，博士，研究员，博导. E-mail: slxu99@ustc.edu.cn。

录用稿件，非最终出版稿

was used as a benchmark to evaluate the improved PINN in predicting the spatiotemporal evolution of the equivalent failure variable along the impact direction. The PINN predictions agreed well with the FDM benchmark, with a relative L_2 error of 1.97 × 10^{-2} over the full spatiotemporal field. The remaining errors were concentrated near the localized contact-end peaks and in the late-stage high-gradient regions. For the two-dimensional circular domain, harmonic lifting was used to impose the Dirichlet boundary conditions, and polar-coordinate Gauss-Legendre quadrature was incorporated into the time-marching variational PINN. Under the prescribed initial and boundary conditions, the high-value regions at both contact ends gradually expanded into the domain, while the low-amplitude failure level in the interior increased over time. The proposed method provides a complementary neural-field approach for analyzing failure-front evolution in SiC ceramic spheres and a computational basis for future damage-field inversion using experimental observations or FDEM data.
Keywords: impact dynamics; PINN; failure front; shear-activated diffusion; strain energy

碳化硅陶瓷(SiC)因其高硬度、高弹性模量、低密度、耐高温、耐磨损和抗氧化等优异性能，广泛应用于航空航天、防护装甲、精密轴承和机械密封等极端服役结构[1]。在航空航天和防护领域，SiC 构件常承受高速冲击、局部接触压缩及压缩波传播形成的高应变率载荷；在轴承和密封结构中，陶瓷球还需承受长期局部接触及循环载荷。在冲击压缩作用下，SiC 陶瓷球接触端易发生应变能蓄积、剪切激活与损伤局部化，形成由破碎块体、颗粒和裂纹系组成、且具有一定承载与变形能力的破碎混合区，失效阵面向球体内部扩展，直至 SiC 陶瓷球完全破碎。其冲击破坏是由应变能场、应力偏量、接触边界等共同控制的破碎混合区演化主导的弛豫失效过程[2,3]。准确描述 SiC 陶瓷的冲击破碎过程，尤其是失效阵面的起始、扩展与局部阻滞规律，是开展冲击破碎预测和服役安全评估的重要基础。

SiC 陶瓷球在冲击压缩下呈现显著的空间非均匀变形[4-6]：接触端附近形成高压缩、高剪切和高应变梯度区域，球体内部变形相对较弱，并伴随泊松效应引起的拉伸变形。Shipway 和 Hutchings[7]的理论分析表明，球体内部应力分布具有明显非均匀性，接触区处于复杂多轴应力状态；Chau 等[8]和 Huang 等[9]进一步讨论了这种非均匀应力分布。Gorham 等[10]发现，静态压缩下球体以经向拉伸裂纹为主，而冲击加载下接触区更易出现 Hertz 环裂纹、锥形裂纹和局部剪切破碎。Potapov 等[11]将其归纳为由接触点萌生的径向拉伸裂纹，以及与之相交的横向和中间剪切裂纹；Paliwal 和 Ramesh[12]则指出，动态压缩破坏主要源于微观缺陷尖端的翼裂纹扩展，而非单一剪切滑移。Miao 等[4,13]研究表明，接触端局部应力状态决定失效区域的起始位置、扩展方向和最终形态，失效由接触区逐步向内部推进。Xiong 等[5]结合高速摄影、DIC 与 FEM-DEM 模拟发现，SiC 陶瓷球接触端的剪切变形和应变能集中显著高于中部区域；即使外部载荷下降，应变能释放仍可推动局部失效区向球心扩展，形成具有空间推进特征的失效阵面。由此可见，SiC 陶瓷球冲击破碎的关键在于非均匀变形场驱动下局部损伤与失效阵面的时空演化。

现有实验、网格方法与物理信息神经网络(PINN)为该问题研究提供了基础，但仍存在三方面不足。其一，高速摄影、DIC 和红外测温主要反映表面变形、局部温升及宏观破坏，难以连续获取球体内部等效失效变量，因而无法完整刻画失效阵面的传播过程。其二，有限差分法和有限元法在处理接触端局部尖峰、高梯度边界层及快速失效阵面推进时，通常需要较高的空间和时间分辨率，随着网格加密与时间步细化，计算规模相应增加，在高维问题中尤其明显；对于二维圆域问题，还需处理复杂边界的离散近似。其三，现有 PINN 方法多面向一般固体力学和断裂问题[14,15]。Bai 等[16]通过改进损失函数缓解残差尺度失衡，Zheng 等[17]引入能量最小化、损伤演化与不可逆约束，Eghbalpoor 和 Sheidaei[18]将近场动力学方程写入残差损失。然而，冲击作用下，SiC 陶瓷球在接触端存在局部高值的极端非均匀分布，其演化是应变能驱动、剪切激活和接触端边界强化等多种机制协同作用的结果。传统 PINN 通常采用时空坐标输入、常规残差损失及全域采样策略，在求解冲击破碎过程中的极端非均匀场时，容易受到大范围低值区域主导，出现梯度传播困难及训练失衡问题，使网络难以有效捕捉接触端局部尖峰和高梯度特征，导致局部峰值过度平滑，甚至出现失效阵面向内部传播受阻的现象[19-21]。同时，二维圆域的复杂边界及局部高梯度特征进一步增加了网络优化难度。针对上述问题，需要通过双尺度特征输入增强局部尖峰及多尺度衰减特征的表达能力，利用复合加权损失和时空聚焦采样改善高低值区域的训练平衡；对于二维圆域问题通过调和提升嵌入圆周边界条件，结合极坐标变分积分增强局部高梯度区域的数值解析能力，缓解复杂边界约束与高梯度特征带来的优化困难。

录用稿件，非最终出版稿

基于此，本文对冲击作用下 SiC 陶瓷球建立基于应变能场驱动的剪切激活异质扩散模型，改进 PINN 方法以描述相关失效变量由接触端向球体内部传播的过程。首先，基于 FDEM 数值方法重构应变能场初始分布，并构建高分辨率 FDM 基准解，建立融合双尺度指数衰减特征、复合加权损失、聚焦采样和单调性约束的强形式 PINN 解，通过与 FDM 数值分析结果对比来检验其计算精度。随后，针对圆域边界和局部高应变梯度的特征，构建随时间逐步变分的 PINN 方法，利用调和函数提升嵌入圆周 Dirichlet 边界条件，并采用极坐标 Gauss-Legendre 积分完成变分求解。由此，结合 FDM 方法与改进的 PINN 方法两种算法，比较接触端极端高值、中部低值背景及失效阵面扩散特征，进一步研究接触端激活、失效阵面扩展和内部失效演化规律，揭示 SiC 陶瓷球冲击破碎机理。

1 碳化硅陶瓷球冲击破碎特性

基于霍普金森杆(SHPB)设备进行 SiC 陶瓷球的冲击破碎特性的实验研究，其载荷-位移曲线，以及基于高速摄影的变形演化过程等结果可参见文献[5,13]。以应变率 1500s^{-1}下、直径 7.94mm 的 SiC 陶瓷球为例，图 1 给出了 0-40.02μs 的高速摄影结果(右侧)，以及基于 SHPB 冲击过程和高速摄影结果计算得到的应变能随时间的演化过程(左侧)。与准静态压缩下以径向拉伸裂纹为主的脆性劈裂破坏不同，冲击作用下陶瓷球的变形过程大致可分为准弹性变形、非线性局部变形和整体碎裂三个阶段。准弹性阶段球体内部主要产生可恢复的变形，接触端应变能逐渐积累，进入非线性阶段后，因入射端和透射端接触区应力集中及较高的局部应变梯度的出现，局部剪切破裂逐渐激活，局部微裂纹萌生，储存的应变能开始释放并驱动破碎区扩展；在最终的碎裂阶段，裂纹扩展、交汇并形成贯通裂纹链，导致陶瓷球宏观破碎，应变能快速释放并驱动破碎区迅速发展。值得注意的是：入射杆中储存的弹性应变能同时释放，对破碎混合区域进行二次压缩[5]。由此可见：陶瓷球后期的破碎主要源于这种储存应变能的释放[5,13]。

此过程中，陶瓷球分别在入射杆和透射杆两个接触端处首先形成由破碎颗粒和微裂纹组成的局部破碎混合区。在冲击脉冲作用下，陶瓷球表现出弛豫响应和逐步破碎的特征。随着应变率升高，两个接触端产生明显的 Hertz 环裂纹、锥形裂纹及局部剪切破碎区，细小碎片的比例随之增加。沿冲击方向的应变能及失效状态呈现典型的“两接触端局部高值-陶瓷球中部大范围低值”的分布特征，其破碎演化具有明显的不可逆性和空间扩散特征[13,22-26]。陶瓷球的动态失效过程中，动态破碎机制由低应变率下的拉伸劈裂主导，逐渐向拉伸-剪切耦合转化，并在高应变率下演化为剪切破坏为主[4,5,9-12,24]。

下面的数值分析将应用 FDEM 数值方法计算应变能场，采用剪切激活异质扩散方程[13,26,27]描述应变能由接触端高值区向球体内部扩散的过程。

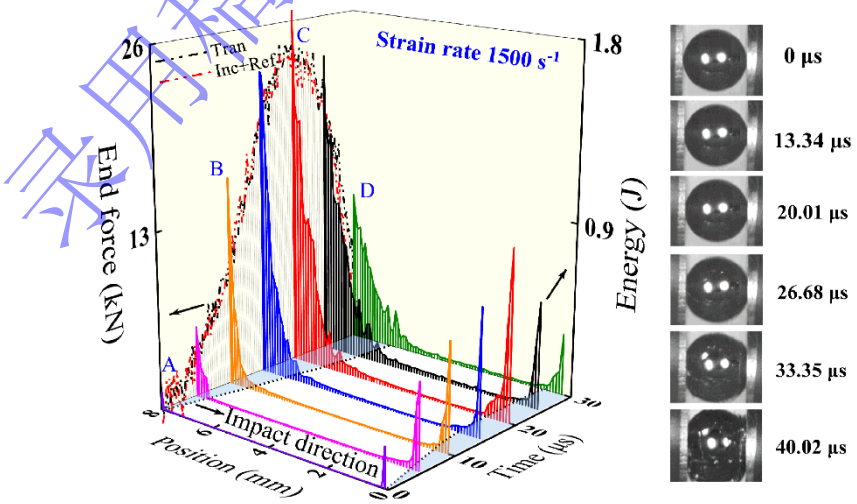


图 1 Φ7.94 mm SiC 陶瓷球在应变率 1500 s^{-1} 下应变能的演化(左)与高速摄影得到的破碎过程(右)

Fig. 1 Evolution of strain energy at the contact ends (left) and high-speed images of fragmentation (right) for the Φ7.94 mm SiC

录用稿件，非最终出版稿

ceramic sphere at a strain rate of 1500 s^{-1}

2 剪切激活异质扩散模型

采用剪切激活异质扩散模型[13,26,27]描述陶瓷球在冲击压缩下由应变能场蓄积、局部剪切激活和破碎混合区演化共同控制的等效失效阵面扩散过程。分析过程中，U 的初始值由 FDEM 计算的应变能场归一化得到；后续演化中，采用 U 表示由应变能驱动的等效失效变量。当局部应变能和应力状态达到临界阈值后，激活剪切驱动模式，等效失效变量 U 由局部高值区向其他区域扩散[13,26,27]，形成具有空间扩散特征的失效阵面。

图 2 所示为冲击作用下陶瓷球中剪切激活失效阵面扩散的示意图。应变能首先在接触端蓄积形成局部高能量区。当局部应变能和应力偏量达到临界状态后，该区域进入剪切激活状态，失效区域开始由两个接触端向陶瓷球内部传播，形成由接触边界向内部扩散的失效阵面。分析中，一维问题的空间坐标记为 x；二维圆域问题的空间坐标记为(x,y)。

剪切激活异质扩散模型可表述为[13,26,27]:

$$\text{一维情况：}\quad \frac{\partial U}{\partial t}=\frac{1}{A_{\mathrm{c}}}\frac{\partial}{\partial x}\left(D\left(x,t\right)A_{\mathrm{c}}\frac{\partial U}{\partial x}\right)+f_{E}\left(x,t\right) \tag{1a}$$

$$\text{二维情况：}\quad \frac{\partial U}{\partial t}=\frac{1}{A_{\mathrm{c}}}\frac{\partial}{\partial x}\left(D\left(x,y,t\right)A_{\mathrm{c}}\frac{\partial U}{\partial x}\right)+\frac{1}{A_{\mathrm{c}}}\frac{\partial}{\partial y}\left(D\left(x,y,t\right)A_{\mathrm{c}}\frac{\partial U}{\partial y}\right)+f_{E}\left(x,y,t\right) \tag{1b}$$

式中，U 为应变能驱动的等效失效变量。A_{c} 为 x 处的截面积，且：$A_{c}=2R_{sic}x-x^{2}$。其中，R_{sic} 为球形试样的半径。$D(\boldsymbol{x},t)$为广义扩散系数：$D\left(\boldsymbol{x},t\right)=D_{0}+\lambda_{1}\left[U\left(\boldsymbol{x},t\right)-U_{\mathrm{eTHD}}\right]_{+}$，$\lambda_{1}$ 为材料参数，U_{eTHD} 为剪切扩散被激活时的临界等效失效变量，当局部失效状态超过临界阈值 U_{eTHD} 时，状态相关扩散系数 $D(\boldsymbol{x},t)$随失效变量增大而提高，表征局部剪切激活后失效传播能力的增强；D_{0} 为基础扩散系数，用于维持低失效区域中的弱扩散能力；$f_{E}(\boldsymbol{x},t)$为失效阵面扩散的广义驱动力：

$f_{E}\left(\boldsymbol{x},t\right)=\dfrac{U\left(\boldsymbol{x},t\right)-U_{\mathrm{eTHD}}}{t_{\mathrm{d}}}\cdot\dfrac{Y\left(\boldsymbol{x},t\right)-Y_{\mathrm{THD}}}{Y_{\mathrm{M}}-Y_{\mathrm{THD}}}+f_{\mathrm{bg}}\left[1-\dfrac{U\left(\boldsymbol{x},t\right)}{\varepsilon_{\mathrm{THD}}}\right]_{+}$。其中，$t_{\mathrm{d}}$ 是材料参数，$Y(\boldsymbol{x},t)$为 t 时刻位置 $\boldsymbol{x}$ 的应力偏量，$f_{E}(\boldsymbol{x},t)$ 综合考虑等效失效状态和局部应力偏量的影响，表征应变能释放及剪切作用对失效演化的推动。Y_{M} 和 Y_{THD} 分别为极限强度和局部破坏临界状态对应的应力偏量。局部破碎区内部是由破碎颗粒和微裂纹构成的“破碎混合物”，仍然能够承受一定的载荷和变形，其局部压缩行为可以近似描述为:

$$U\left(\boldsymbol{x},t+\Delta t\right)=U\left(\boldsymbol{x},t\right)\cdot\left(1+\gamma\frac{\Delta t}{t_{\alpha}}\cdot\frac{U\left(\boldsymbol{x},t\right)-U_{\mathrm{eTHD}}}{U\left(\boldsymbol{x},t\right)}\right) \tag{2}$$

其中：Δt 为计算过程中的时间增量；t_{α} 是与冲击过程中的加载脉宽有关的时间参数；γ 为与应变能释放和接触类型有关的激活因子。公式(2) 可作为试样的接触边界条件。陶瓷球冲击破碎的发展主要包括接触区的局部剪切失效扩散和球体的拉伸破坏两种机制，因此临界等效失效变量 U_{eTHD} 和临界应力偏量 Y_{THD} 与破坏应变和压缩强度有关。

录用稿件，非最终出版稿

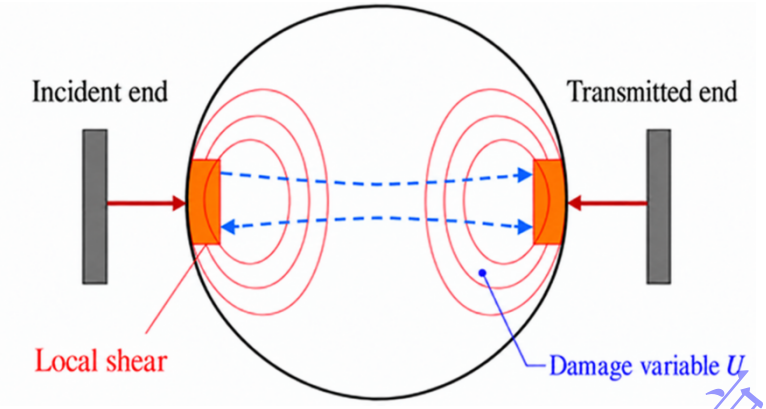


图 2 SiC 陶瓷球两接触端剪切激活与失效阵面扩散示意图

Fig. 2 Schematic of shear activation and failure-front diffusion at the contact ends of SiC ceramic sphere.

为系统概括碳化硅陶瓷球冲击破碎与损伤扩散问题的建模及求解过程，图 3 给出了本文的总体研究框架。首先，以 SHPB 冲击条件下陶瓷球内部的应变能非均匀分布为物理背景，结合 FDEM 计算结果重构初始应变能场，并建立剪切激活的损伤扩散控制模型。随后，针对一维和二维圆域分别构建一维强形式 PINN 和二维变分 PINN。其中，一维模型通过坐标归一化、双尺度指数特征、峰谷复合加权损失及时空聚焦采样等策略增强接触端高梯度区域的求解能力；二维模型则结合扩散势变换、调和提升、极坐标 Gauss-Legendre 积分和增量变分泛函，实现复杂边界条件下损伤场的逐时推进求解。最后，根据预测得到的损伤变量时空演化结果，提取失效前沿位置及传播速度，分析损伤区域扩展过程与冲击破碎机制。由此形成“物理问题与控制模型-PINN 数值求解-失效前沿与破碎机制分析”的完整技术路线，为后续模型验证和结果讨论奠定基础。

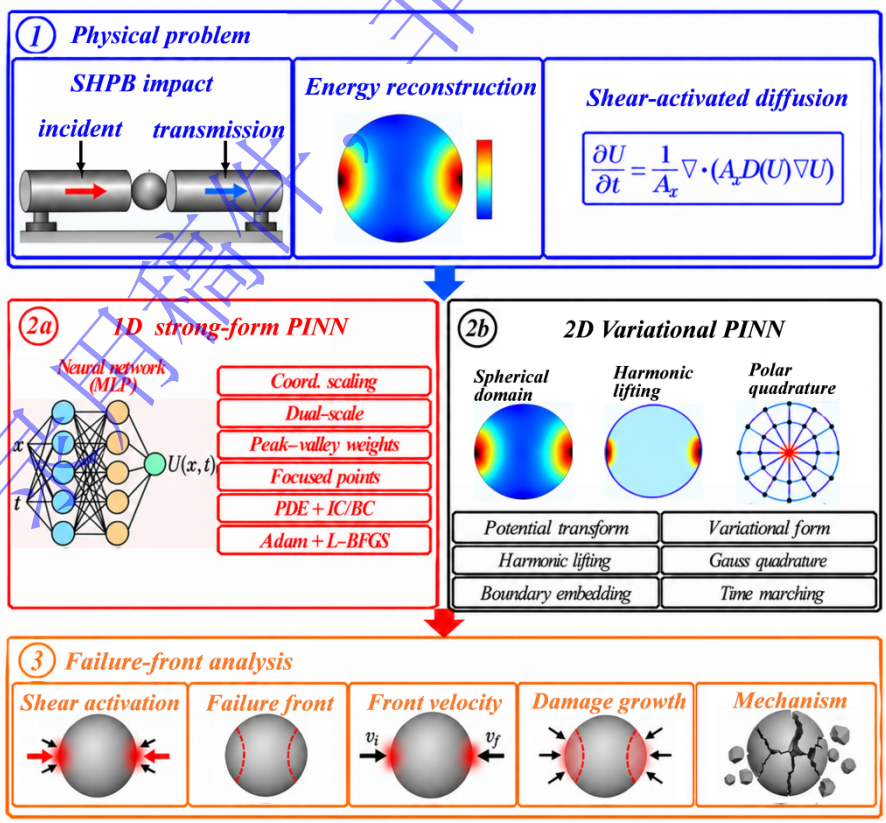


图 3 基于改进 PINN 的碳化硅陶瓷球损伤扩散分析框架

录用稿件，非最终出版稿

Fig. 3 Framework for damage diffusion analysis of SiC ceramic spheres based on improved PINNs.

3 一维强形式 PINN 方法求解与验证

3.1 一维有限差分(FDM) 基准离散格式

一维 FDM 基准解用于模拟 SiC 陶瓷球沿冲击方向上的等效失效阵面扩散过程。由于控制方程中的扩散系数 D 和源项 f_E 均与局部应变能状态、应力偏量和剪切激活阈值有关，其离散过程不同于常系数热扩散方程。在每个时间步内先根据当前状态变量更新局部激活扩散系数和源项，再通过显式有限差分格式计算失效变量，从而获得可与 PINN 预测结果对比的一维高分辨率基准场。

一维计算区域为：$x\in[0,L_d]$，L_d=7.94mm。第 i 个空间节点和第 n 个时间层分别表示为：$x_i=i\Delta x$，$t^n=n\Delta t$。状态变量记为：$u_i^n\approx u\left(x_i,t^n\right)$。对式 (1) 中的扩散通量项，基于有限体积方法在半节点处进行离散。位置 x_i 处的截面积记为 $A_i=A_c\left(x_i\right)$，定义复合扩散通量系数 K=$A_c D$，直接对 K 进行半节点离散。一维问题中仅使用 x 方向半节点 K；后续二维问题中须使用在 x、y 两个方向的半节点 K。具体 FDM 格式表达如下：

$$\begin{gathered}D_{i,j}^n=D_0+\lambda_1\left[U_{i,j}^n-U_{\varepsilon\mathrm{THD}}\right]_+,\quad K_{i,j}^n=A_{ci}D_{i,j}^n\\K_{i+\frac{1}{2},j}^n=\frac{K_{i,j}^n+K_{i+1,j}^n}{2},\quad K_{i,j+\frac{1}{2}}^n=\frac{K_{i,j}^n+K_{i,j+1}^n}{2}\\K_{i-\frac{1}{2},j}^n=\frac{K_{i-1,j}^n+K_{i,j}^n}{2},\quad K_{i,j-\frac{1}{2}}^n=\frac{K_{i,j-1}^n+K_{i,j1}^n}{2}\end{gathered}\tag{3}$$

固定 j 后仅保留 x 方向，对应一维问题。根据式(3)的半节点 K 系数，节点 i 的离散扩散项可写为：

$$\left(L_x^nU\right)_{i,j}=\frac{K_{i+\frac{1}{2},j}^n\left(U_{i+1,j}-U_{i,j}\right)-K_{i-\frac{1}{2},j}^n\left(U_{i,j}-U_{i-1,j}\right)}{A_i\Delta x^2}\tag{4}$$

内部节点 i 的显式格式为：

$$U_i^{n+1}=U_i^n+\Delta t\left[\left(L_x^nU\right)_i+f_{E,i}^n\right]\tag{5}$$

3.2 一维时空网络架构与输入

采用时空整体训练的强形式 PINN 方法。对空间坐标和时间坐标归一化得到计算网络，由此输出等效失效变量 $U_\theta(x,t)$。通过自动微分计算时间导数和空间导数，在时空配点处构造控制方程强残差[14,15]，并用初始条件和边界条件共同训练网络。网络预测结果统一表示为：

$$U_\theta(x,t)=\mathrm{N}\left(\phi_d(x,t);\theta\right)\tag{6}$$

式中，ϕ_d 为经过坐标归一化和特征扩展后的网络输入向量；$\theta=\left\{W^l,b^l\right\}_{l=1}^L$，表示网络参数集合，包括各层权重矩阵 W^l 和偏置向量 b^l；L 为网络总层数。

考虑到空间坐标、时间坐标及状态变量幅值之间存在明显的尺度差异，直接将物理坐标输入网络容易造成各方向梯度尺度失衡，降低网络训练的稳定性[19,20]。因此，首先对时空坐标分量进行线性归一化处理：

录用稿件，非最终出版稿

$$\tilde{q}=2\frac{q-q_{\min}}{q_{\max}-q_{\min}}-1,\quad q\in\{x,t\} \tag{7}$$

SiC 陶瓷球在冲击压缩过程中，等效失效变量主要在左右接触端附近形成局部高值区，并由接触端向试样内部快速衰减。标准多层感知机具有一定的低频拟合倾向，仅采用时空坐标作为输入时，容易对接触端附近的窄边界层和高梯度响应产生过度平滑[20,21]。为提高网络对上述局部特征的表达能力，引入时间二次特征以及左右接触端的双尺度指数衰减特征，则有：

$$\phi(x,t)=(\tilde{x},\tilde{t},s_t^2,\mathrm{e}^{-\kappa_1 s_x},\mathrm{e}^{-\kappa_2 s_x},\mathrm{e}^{-\kappa_1(1-s_x)},\mathrm{e}^{-\kappa_2(1-s_x)}) \tag{8}$$

其中，$s_x=(\tilde{x}+1)/2$，$s_t=(\tilde{t}+1)/2$；k_1 和 k_2 为指数特征的衰减系数，采用双指数函数 $U_0(s_x)=C+A_{L1}e^{-k_1 s_x}+A_{L2}e^{-k_2 s_x}+A_{R1}e^{-k_1(1-s_x)}+A_{R2}e^{-k_2(1-s_x)}$ 对 FDEM 初始场拟合得到。其中，A_{L1}、A_{L2}、A_{R1} 和 A_{R2} 分别控制左右接触端两种空间尺度的幅值。较小的衰减系数 k_1 用于表征接触端附近相对宽缓的影响区域，较大的衰减系数 k_2 用于增强网络对接触端窄边界层和局部高梯度响应的解析能力，本次取：k_1=4，k_2=12。时间二次项 s_t^2 用于提高网络对失效变量非线性时间演化过程的表征能力。

网络主体采用多层感知机(Multi-Layer Perceptron，MLP)结构。令扩展输入为 $\boldsymbol{a}^0=\phi_d(x,t)$，则第 l 个隐藏层的计算方程为：$\boldsymbol{a}^l=\sigma\left(W^l\boldsymbol{a}^{l-1}+\boldsymbol{b}^l\right),\ l=1,2,\mathrm{L}\ ,L-1$。

隐藏层采用双曲正切激活函数：

$$\sigma(\cdot)=\tanh(\cdot)=\frac{e^{(\cdot)}-e^{-(\cdot)}}{e^{(\cdot)}+e^{-(\cdot)}} \tag{9}$$

同时，对网络输出采用标准化恢复策略：

$$U_\theta=\mu_U+\sigma_U\tilde{U}_\theta \tag{10}$$

其中，μ_u 和 σ_u 分别表示训练数据的均值与标准差。

根据问题维度的不同，网络结构中一维算例输入层包含 7 个节点，其中，5 个隐藏层每层 128 个神经元，1 个输出层含 1 个节点，即：网络结构为[7,128,128,128,128,128,1]。

3.3 极端非均匀分布下的复合加权损失

PINN 方法的损失函数用于衡量神经网络预测解与控制方程、初始条件和边界条件之间的偏差。对于 SiC 陶瓷球冲击问题，初始应变能场呈现明显的极端非均匀分布，即两个接触端附近存在局部高值尖峰，而内部大部分区域接近低值背景。若直接采用等权均方误差，训练过程容易被大量低值样本主导，导致网络对接触端尖峰和失效阵面推进区域的学习不足[16]。

进一步，为使 PDE 残差约束能够反映场变量的空间非均衡分布特征，将残差区域划分为高值控制区 Ω_{H} 和低值控制区 Ω_{L} 即：

$$\Omega_H=\{(x,t)|\ U_{ref}(x,t)\geq\tau\},\quad \Omega_L=\{(x,t)\ \ U_{ref}(x,t)\quad\tau\} \tag{11}$$

录用稿件，非最终出版稿

总损失函数定义为：$\mathcal{L}_{Total}(\theta)=\omega_{PD}^{k}\mathcal{L}_{PD}+\omega_{IC}\mathcal{L}_{IC}+\omega_{BC}\mathcal{L}_{BC}$。式中，$\mathcal{L}_{PD}$、$\mathcal{L}_{IC}$和$\mathcal{L}_{BC}$分别表示控制方程残差损失、初始条件损失和边界条件损失。各损失项采用样本均值形式的均方误差，可写为：

$$\mathcal{L}_{PD}=\mathcal{L}_{PD,H}+\mathcal{L}_{PD,L}=\frac{1}{N_{PD}^{H}}\sum_{i=1}^{N_{PD}^{H}}r^{2}\left(x^{H,i},t^{H,i};\theta\right)+\frac{1}{N_{PD}^{L}}\sum_{i=1}^{N_{PD}^{L}}r^{2}\left(x^{L,i},t^{L,i};\theta\right) \tag{12}$$

其中，$r(x,t;\theta)=U_{\theta,t}-\frac{1}{A_c}\nabla\cdot\left[D(x,t)A_c\nabla U_{\theta}\right]-f_E(x,t)$。$\omega_{PD}^{(k)}$采用渐增策略，即：

$\omega_{PD}^{(k)}=\omega_{MAX}\left[0.05+0.95\min\left(1,\frac{k}{3000}\right)\right]$。

$$\mathcal{L}_{BC}=\frac{1}{N_{BC}}\sum_{i=1}^{N_{BC}}\left|U_{\theta}(x^{i},t^{i})-U_{BC}^{i}\right|^{2} \tag{13}$$

$$\mathcal{L}_{IC,w}=\frac{1}{N_{IC}}\sum_{i=1}^{N_{IC}}w_i\left|U_{\theta}(x^{i},0)-U_{IC}^{i}\right|^{2} \tag{14}$$

由于真值尖峰区域样本相对稀疏，为增强模型对尖峰区域与低值区域的同时表征能力，初始条件项引入了高峰-低谷复合样本权重策略。其中，$w_i=1+\kappa_0\left[\alpha\frac{U^i}{U_{\max}}+(1-\alpha)\eta_i\right]$，$\eta_i=\frac{(U^i+\varepsilon_w)^{-1}}{\max_j(U^j+\varepsilon_w)^{-1}}$，$\kappa_0=50,\quad\alpha=0.9,\quad\varepsilon_w=10^{-3}$。

采用 Adam 与 L-BFGS 的两阶段混合优化机制[28,29]。首先利用 Adam 进行前期随机梯度优化，以实现较快的损失下降；随后采用 L-BFGS 进行全批次精细优化，以进一步提高收敛精度。

3.4 时空聚焦采样策略

针对一维等效失效变量在左右接触端附近具有局部高值和高空间梯度、区间内部大部分区域处于低值背景的特点，采用全局覆盖与局部聚焦相结合的时空采样。该策略在保证整个时空域覆盖的同时，增加接触端边界层和早期快速演化区的 PDE 残差配点密度[30,31]。

一维控制方程残差训练集由全局覆盖点、边界聚焦点和早期时刻聚焦点三部分组成：$S_f^{1\mathrm{D}}=S_f^{G}\cup S_f^{E}\cup S_f^{T}$。$N_f^G$个全局残差点采用拉丁超立方采样(LHS)[32]覆盖时空域：

$$S_f^{G}=\left\{\boldsymbol{n}+(\boldsymbol{m}-\boldsymbol{n})\odot\boldsymbol{\xi}_f^{(i)}\right\}_{i=1}^{N_f^G},\quad\boldsymbol{\xi}_f^{(i)}\sim\mathrm{LHS}(d) \tag{15}$$

其中，$\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{m}$ 分别表示时空域的下、上界，d 表示维度。

为增加左右接触端附近的配点密度，边界聚焦点的空间坐标采用两端高、中部低的 Beta 分布：

$$\begin{aligned}x_i^{E}&=L\eta_i,\quad\eta_i\sim\mathrm{Beta}(0.35,0.35)\\t_i^{E}&=T\xi_i,\quad\xi_i\sim U(0,1)\end{aligned} \tag{16}$$

考虑到失效变量在加载早期变化较快，进一步构造早期时刻聚焦点：

$$x_i^{T}=L\xi_{x,i},\quad t_i^{T}=T\xi_{t,i}^{2},\quad\xi_{x,i},\xi_{t,i}\sim U(0,1). \tag{17}$$

平方映射使时间配点向 t=0 附近集中，从而增强网络对早期边界层形成和快速扩散阶段的解析能力。

为量化时空聚焦采样策略的增益，在总配点数固定为 30000、接触端与早期时刻聚焦点数量之比为 2:1 的条件下，将聚焦点占比分别设置为 0%、20%、40%、60%和 80%。由表 1 可知，随着聚焦点占比增加，接触端局部误差和早期相对误差逐渐降低；当占比超过 60%时，局部精度提升趋于有限，全场相对L_2误差反而增大。综合考虑全场预测精度与局部高梯度区域的刻画能力，本文最终采用全局点、接触端聚焦点和早期时刻聚焦点 40:40:20 的配点比例，以兼顾全时空域覆盖与局部预测精度。一维算例中各类残差点数量取为：$N_f^G=12000,N_f^E=12000,N_f^T=6000$。

录用稿件，非最终出版稿

表 1 不同时空聚焦采样比例下的配点分布与预测误差

Table 1 Collocation-point distributions and prediction errors under different spatiotemporal focused-sampling ratios

聚焦点占比	全局点 N_f^G	边界聚焦点 N_f^E	早期聚焦点 N_f^T	全场相对 L_2 误差	接触端局部相对误差	早期相对误差
0%	30000	0	0	3.46×10^{-2}	6.82×10^{-2}	5.91×10^{-2}
20%	24000	4000	2000	2.88×10^{-2}	5.34×10^{-2}	4.71×10^{-2}
40%	18000	8000	4000	2.31×10^{-2}	4.12×10^{-2}	3.68×10^{-2}
60%	12000	12000	6000	1.97×10^{-2}	3.21×10^{-2}	3.05×10^{-2}
80%	6000	16000	8000	2.15×10^{-2}	2.89×10^{-2}	2.76×10^{-2}

3.5 一维异质扩散方程求解及与 FDM 基准解的对比

以一维冲击方向上的失效变量扩散为算例，验证改进 PINN 方法对剪切激活异质扩散过程的求解能力。有限差分法(FDM)结果作为高分辨率基准场，PINN 预测结果用于考察无网格模型对接触端高值尖峰、完整区低值背景和阵面推进趋势的复现能力。

3.5.1 计算参数与物理场景

一维区域取 $x\in[0,7.94]$ mm，对应 SiC 陶瓷球沿冲击方向的等效扩散路径；时间区间取 $t\in[0,20]$μs。FDM 基准计算采用空间步长 d_x=0.02 mm、时间步长 d_t=0.0001 μs。材料参数采用 λ_1=0.18m²/s、$U_{\varepsilon\mathrm{THD}}$=0.07、$t_d$=80 μs、$Y_M$=75 GPa、$Y_{THD}$=25 GPa、$D_0$=0.02，边界激活参数取 γ=6.71、t_α=86 μs。更多细节参见表 2。

表 2 一维和二维异质扩散模型的主要计算参数

Table 2 Main computational parameters of the one- and two-dimensional heterogeneous diffusion models

参数	一维模型	二维模型
计算域/mm	$x\in[0,7.94]$	圆形域,L=7.94
时间/μs	$t\in[0,20]$	$t\in[0,20]$
λ_1/(m²/s)	0.18	0.18
$U_{\varepsilon THD}$	0.07	0.07
t_d/μs	80	80
Y_M/GPa	75	75
Y_{THD}/GPa	25	25
D_0/(m²/s)	0.02	0.02
γ	6.71	6.71
t_α/μs	86	86
FDM 格式	显式有限差分	一阶 Lie 分裂与 Thomas 算法
空间离散	Δx=0.02	901×901
时间离散/μs	$\Delta t=1\times10^{-4}$	$\Delta t=3.125\times10^{-4}$

3.5.2 PINN 方法与 FDM 方法基准解的对比

图 4 给出了应变率为 1500 s^{-1} 时剪切异质扩散方程的 FDM 方法基准解、改进 PINN 方法预测解及绝对误差分布。图 4(a, d) 为 FDM 热力图，颜色表示失效变量幅值。整体上，失效变量在两端接触区保持较高水平，并随时间推进逐渐向试样内部扩散；中部完整区则长期维持低失效水平。图 4(b, e) 为 PINN 预测场，其整体颜色分布与图 4(a, d) 保持一致，说明网络在初始条件、边界条件和 PDE 残差共同约束下捕捉到了“两端强化-中部低值”的主导结构。图 4(c, f) 为绝对误差热力图，误差主要集中在接触端附近，尤其是早期左端和后期边界高梯度区域；这一分布与局部尖峰宽度窄、曲率变化快以及边界激活项持续增长有关。

对比结果表明，改进 PINN 方法对全时空场的相对 L_2 误差为 1.97×10^{-2}。左右边界上的最大绝对误差分别为 5.43×10^{-3} 和 3.48×10^{-3}，初始条件截面上的最大绝对误差为 1.27×10^{-2}。在 t=20 μs 时，空间剖面的相对 L_2 误差为 1.04×10^{-2}，最大绝对误差为 2.54×10^{-2}。表明，网络能够较好保持整体场分布和边界演化趋势，较明显的局部误差仍主要出现在接触端尖峰及高梯度边界层附近。

录用稿件，非最终出版稿

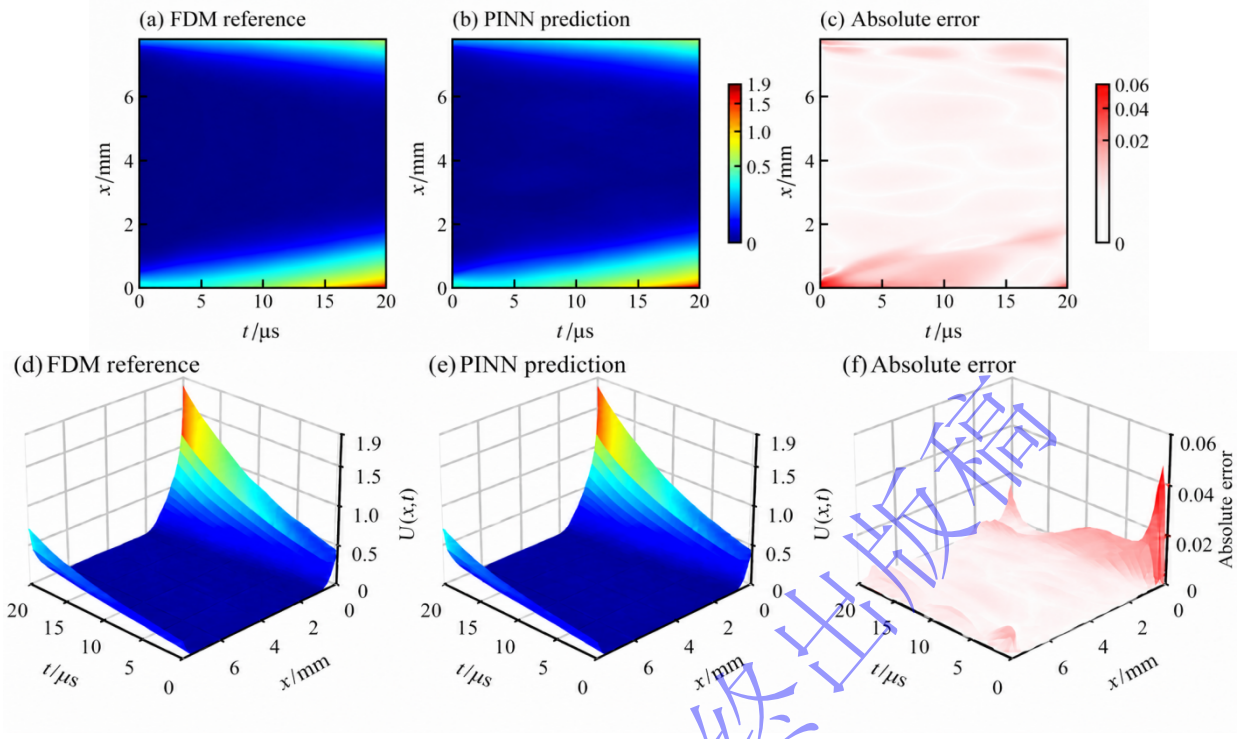


图 4 应变率为 1500 s^{-1}时,一维失效变量的时空演化及预测误差：(a,d) FDM 基准解；(b,e) PINN 预测解；(c,f) 绝对误差。

Fig. 4 Spatiotemporal evolution and prediction error of the one-dimensional failure variable at 1500 s^{-1}: (a, d) FDM benchmark solution; (b, e) PINN prediction; (c, f) absolute error.

图 5 比较了 t=0、4、8、12、16 和 20 μs 时刻应变率为 1500 s^{-1}的失效变量的空间分布。图 5(a) 中，早期尖峰宽度窄、梯度大，FDM 与 PINN 在接触端附近高度重合，但由于峰值区域尺度很小，任何轻微位置偏差都会放大为相对误差。图 5(b) 显示 t=4 μs 时尖峰开始向内部扩散，PINN 能跟随 FDM 的衰减包络，说明复合损失已经约束住主要剖面形态。图 5(c) 中 t=8 μs 的中部低值区仍保持接近零的状态，表明网络没有因高值区加权而将内部背景整体抬高。图 5(d) 显示 t=12 μs 时扩散前沿更加平滑，FDM 与 PINN 在大部分空间位置几乎重合，说明网络对中期阵面扩散具有较好稳定性。图 5(e) 中 t=16 μs 的边界峰值继续增长，局部曲率差异开始增大；图 5(f) 中 t=20 μs 的边界强化更明显，PINN 对峰顶可能存在轻微低估或平滑化。误差源从早期尖峰形态保持问题逐渐转变为后期边界强化问题。

录用稿件，非最终出版稿

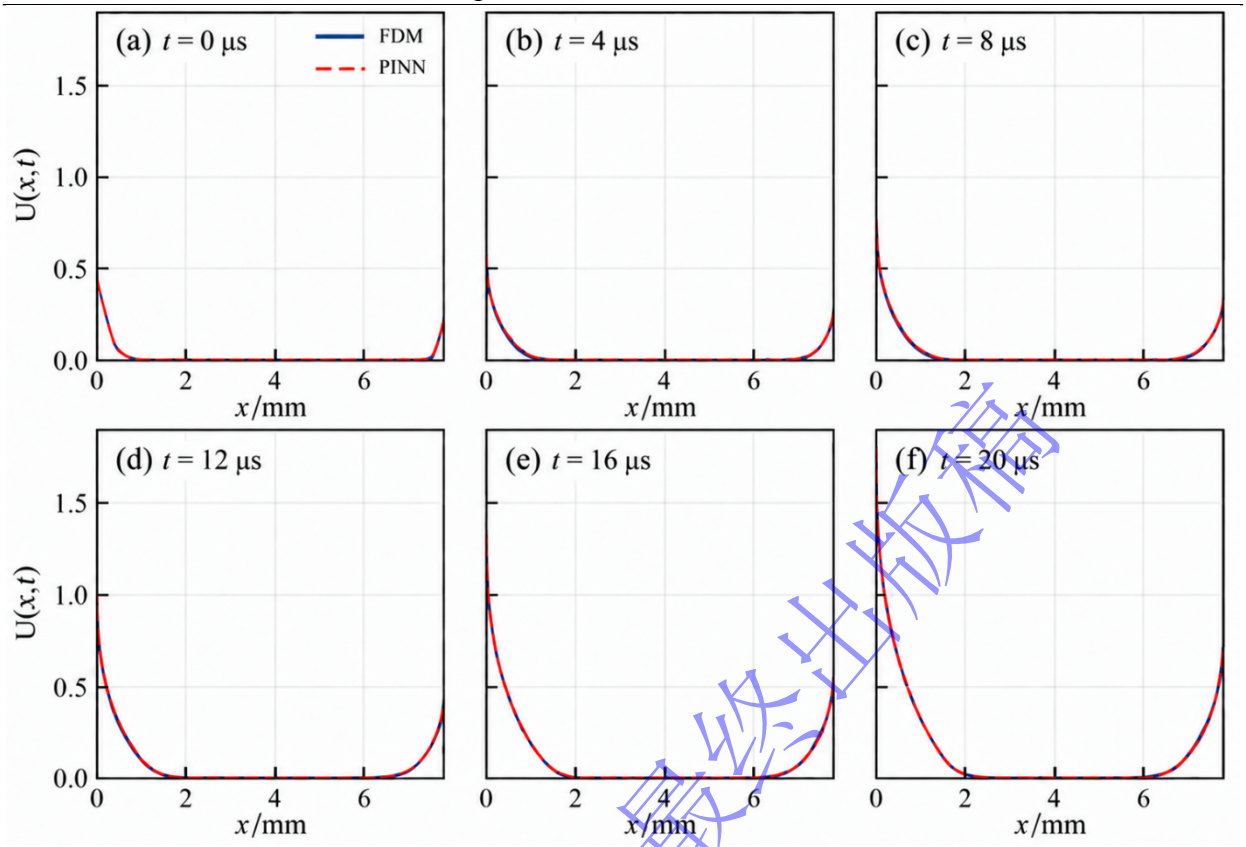


图 5 不同时刻失效变量的 FDM 与 PINN 预测结果对比：(a) t=0 μs；(b) t=4 μs；(c) t=8 μs；(d) t=12 μs；(e) t=16 μs；(f) t=20 μs。

Fig. 5 Comparison of FDM and PINN of failure variable at different times: (a) t=0 μs; (b) t=4 μs; (c) t=8 μs; (d) t=12 μs; (e) t=16 μs; (f) t=20 μs.

3.5.3 预测误差与训练收敛性分析

为了进一步评价预测质量，图 6 给出了应变率为 1500 s^{-1}时峰值失效变量和各时刻误差的演化。图 6(a) 中，FDM 方法与 PINN 方法的峰值曲线总体保持一致，说明改进 PINN 方法能够追踪接触端破碎区的强化过程。随着时间增加，峰值失效变量持续升高，反映边界激活项和扩散项共同推动接触端附近失效变量累积。

图 6(b) 同时给出了相对 L_2误差和最大绝对误差随时间的演化规律。在 t=0.5、4、8、12、16 和 20 μs 时，相对 L_2 误差分别为 1.25×10^{-1}、4.80×10^{-2}、3.20×10^{-2}、2.10×10^{-2}、9.50×10^{-3}和 1.04×10^{-2}，整体呈现初期快速下降、中后期趋于稳定的变化趋势。这主要是由于初始阶段参考场整体幅值较小、峰值分布范围较窄，局部峰值位置或形态的微小偏差容易产生较大的相对误差；随着失效变量场逐渐扩展，PINN 预测结果与 FDM 基准解的整体一致性不断提高，相对 L_2误差逐渐降低。相比之下，最大绝对误差在中期较小，但在后期随接触端局部峰值增强而有所上升，表明 PINN 方法在高梯度边界层及局部尖峰区域仍存在一定幅值偏差。接触端局部尖峰及高梯度特征增加了神经网络的逼近难度，随着后期边界持续强化，局部梯度进一步增大，使峰值附近的预测偏差有所增加。总体而言，改进 PINN 方法能够保持较低的中后期相对 L_2 误差，较准确地描述失效变量的时空演化过程，但对接触端局部高梯度区域的预测精度仍有进一步提升空间。

录用稿件，非最终出版稿

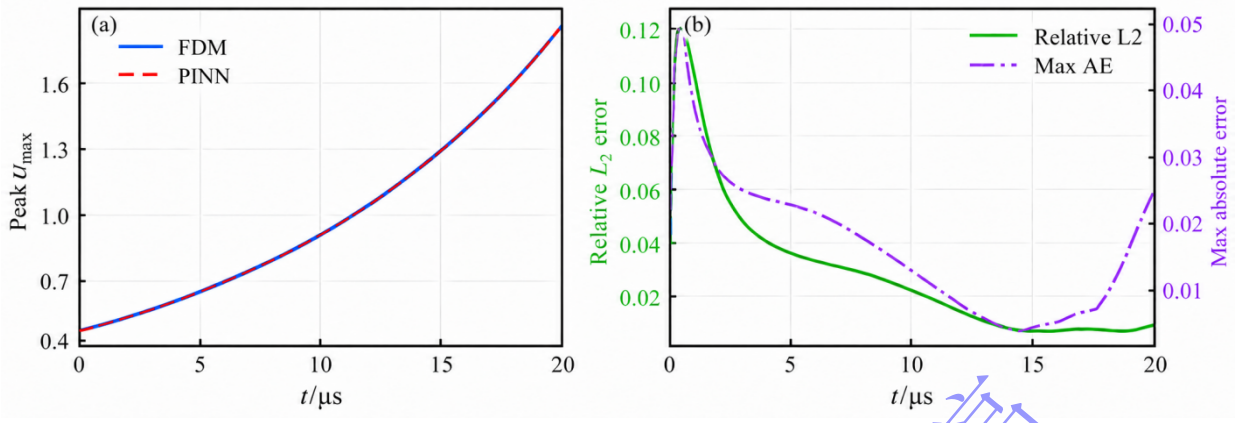


图 6 失效变量预测误差分析：(a) 峰值演化；(b) 误差演化。
Fig. 6 Prediction-error analysis of failure variable: (a) peak-value evolution; (b) error evolution.

图 7 进一步给出了各项未加权残差均方误差、加权阶段目标以及 PDE 权重的演化。前 3500 次迭代仅优化初始条件和边界条件，二者残差迅速下降。进入物理训练阶段后，PDE 权重在前 3000 次物理迭代中由 0.05 逐步增加至 25，因此加权阶段目标在权重开启初期可能短暂升高，该现象来源于优化目标的改变，并不表示网络发生发散。PDE 权重完全开启后，未加权 PDE 残差均方误差由约 7.46×10^{-1} 持续降低；经过 Adam 阶段的充分训练后，进一步采用 L-BFGS 进行全批次精细优化，使 PDE 残差继续下降并稳定至约 2.87×10^{-4}。随后进行的 300 次锚定晚期修正用于进一步稳定高梯度区域的预测结果，同时通过锚定点限制全局预测场发生明显漂移。

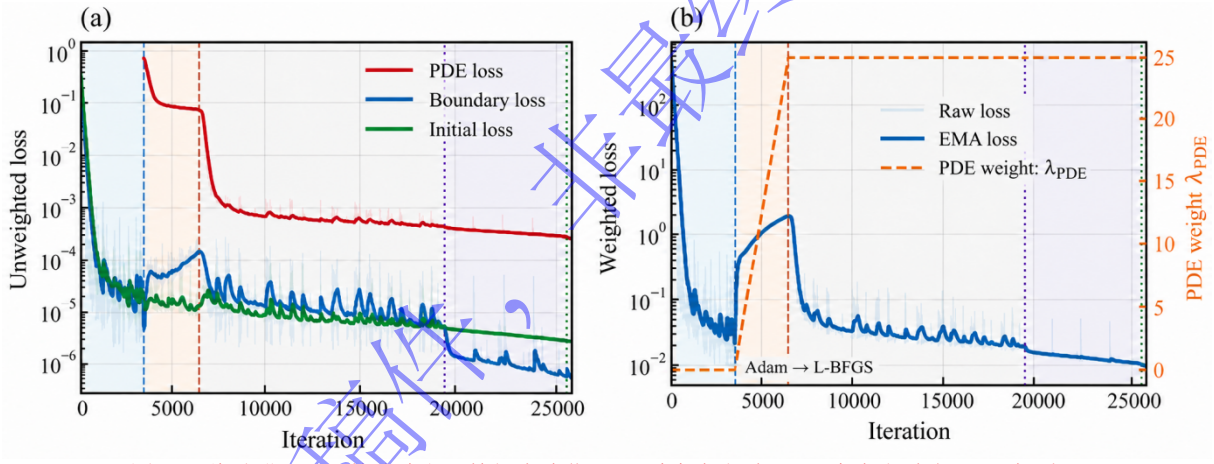


图 7 一维改进 PINN 的分阶段训练损失演化：(a) 未加权损失；(b) 加权损失与 PDE 权重。
Fig. 7 Evolution of training losses during staged training of the improved one-dimensional PINN: (a) unweighted losses; (b) weighted loss and PDE weight.

4 二维圆域异质扩散求解与失效阵面演化

上述一维算例验证了控制方程和强形式 PINN 在简单几何构型下的可行性。下面将考虑较为复杂的二维圆域问题。此时，改进的 PINN 方法采用时间逐步变分求解[33]。二维结果用于研究复杂圆周边界、局部尖峰和内部扩散条件下的连续神经场表征能力。

4.1 二维 FDM 基准离散格式

二维 FDM 基准解用于检验改进 PINN 方法在圆形区域内对接触端局部高值、内部低值背景及失效阵面推进过程的解析能力。二维圆域嵌入正方形笛卡尔网格 $[0,2R_{sic}]\times[0,2R_{sic}]$ 中，圆心位于 (R_{sic},R_{sic})。设 x、y 方向节点数分别为 N_x 和 N_y，则离散节点及圆域掩码表示为：

$$x_i=i\Delta x,\quad y_j=j\Delta y,\quad \Omega=\left\{(x_i,y_j):\sqrt{\left(x_i-\frac{L}{2}\right)^2+\left(y_j-\frac{L}{2}\right)^2}\le R_{sic}\right\} \tag{18}$$

圆域内四个正交相邻节点均位于计算域中的节点定义为内部节点，其余位于圆域内的节点作为离

散圆周边界。为减小阶梯边界对边界初值的影响，离散边界节点沿径向投影至理论圆周，再由同一初始应变能场插值得到相应的初始边值。令 $U(i,j,n)$ 表示第 n 个内部时间层上节点 (x_i,y_j) 处的等效失效变量。其中，x 方向离散算子与式(4)完全一致，二维新增的 y 方向离散算子为：

$$(L_y^n U)_{i,j}=\frac{K^n_{i,j+\frac{1}{2}}(U_{i,j+1}-U_{i,j})-K^n_{i,j-\frac{1}{2}}(U_{i,j}-U_{i,j-1})}{A_i\Delta y^2} \tag{19}$$

时间离散采用冻结非线性系数的一阶 Lie 方向分裂。在每个子步中，先沿 x 方向求得中间场 U^*，再沿 y 方向推进到下一内部时间层：

$$(I-\Delta tL_x^n)U^*=U^n+\Delta tf_E^n,\quad (I-\Delta tL_y^n)U^{n+1}=U^* \tag{20}$$

其中 I 表示单位矩阵，δt 表示时间步长。上述两个方向的隐式离散均形成三对角线性方程组，采用 Thomas 算法求解。

为检验离散结果对时间步和空间网格的依赖性，本文分别进行时间步细化与空间网格细化计算。在相同物理时刻采用全场相对 L_2 误差进行评价，结合全场误差与经过圆心的水平剖面对比，选取误差稳定且计算代价可接受的网格和内部时间步，作为后续二维 PINN 结果验证所用的 FDM 基准配置。

4.2 二维 FDM 结果

基于上述收敛性分析，二维圆域 FDM 方法计算统一采用 901×901 网格和 64000 个内部子步，计算时间范围为 $t\in[0,20]$ μs，并输出 t=0、4、8、12、16 和 20 μs 时的失效变量场，如图 8 所示。初始时刻的高值区主要位于左右接触端附近，圆域内部大部分区域保持低值，呈现出典型的“两接触端局部高值-内部大范围低值”分布。

随着时间推移，两个接触端附近的高值区逐渐增宽，并沿冲击方向和圆域内部径向扩展。t=4～8 μs 时，失效变量主要在接触端邻域内累积，扩散前沿仍靠近边界；t=12～20 μs 时，高值区进一步向圆域内部推进，接触端与内部低值区之间形成连续的过渡带。圆域中心区域的失效变量虽逐步抬升，但其幅值仍明显低于接触端局部高值，表明该阶段的演化仍主要受接触端剪切激活和局部应变能释放控制。总体上，FDM 方法的结果再现了“接触端局部激活-高值区增宽-失效阵面向内部推进”的演化过程，并作为后续二维 PINN 方法预测结果的独立数值基准。

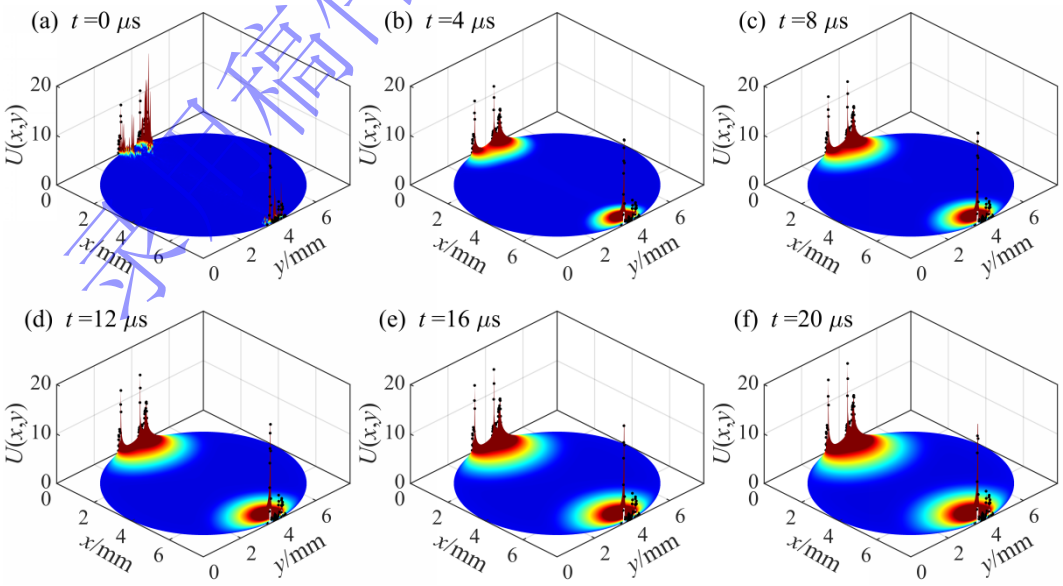


图 8 不同时刻二维圆域失效变量的 FDM 计算结果：(a) t=0 μs；(b) t=4 μs；(c)t=8 μs；(d)t=12 μs；(e)t=16 μs；(f)t=20 μs。

录用稿件，非最终出版稿

Fig. 8 FDM results of the failure-variable field in the two-dimensional circular domain at different times: (a) t=0 μs; (b) t=4 μs; (c)t=8 μs; (d)t=12 μs; (e)t=16 μs; (f)t=20 μs.

4.3 二维圆域变分 PINN 方法构建与求解

二维计算区域取直径 L=7.94 mm 的圆域。二维圆域同时具有接触端局部尖峰、圆周复杂边界以及较大的空间非均匀性。网络需要同时解析时间传播、接触端窄高值区和圆域边界，容易出现局部高梯度被大范围低值区域掩盖的问题。为此，采用时间逐步变分 PINN 方法，将时间演化转化为一系列相邻时间层之间的增量极小化问题[33]。

根据前文建立的剪切激活异质扩散模型，二维失效变量的扩散系数随局部失效状态变化。

为避免变分过程中直接处理状态相关扩散系数 $D(U)$，定义广义扩散势：$w=F(U)=D_0U+\dfrac{\lambda_1}{2}\langle U-U_{THD}\rangle_+^2$，由此有 $\nabla w=D(U)\nabla U$ 因此，原控制方程中的非线性扩散通量可以直接写为 ∇w。二维扩散方程可相应表示为 $\dfrac{\partial U}{\partial t}=\dfrac{1}{A_c}\nabla\cdot\left(A_c\nabla w\right)+f_E(x,y,t)$。由于神经网络实际预测变量为 w，最终失效变量 U 由广义扩散势反演得到：

$$U=\begin{cases}\dfrac{w}{D_0}, & w\le D_0U_{\mathrm{eTHD}}\\[2ex] U_{\mathrm{eTHD}}+\dfrac{\sqrt{D_0^2+2\lambda_1\left(w-D_0U_{\mathrm{eTHD}}\right)}-D_0}{\lambda_1}, & w>D_0U_{\mathrm{eTHD}}\end{cases}\tag{21}$$

二维圆域的失效演化具有明显的接触端局部强化特征，圆周边界随极角呈非均匀分布。若将边界条件作为损失项参与训练，需要额外协调边界约束与内部变分泛函之间的权重。为避免这一问题，采用基于快速 Fourier 变换的调和提升方法，将给定圆周边界直接嵌入神经网络试探解。对于任一时间层 t_n，首先将圆周边界上的失效变量 $U_b(\theta,t_n)$ 转换为扩散势 $w_b(\theta,t_n)=F\left[U_b(\theta,t_n)\right]$。由于圆周边界关于极角 θ 具有周期性，对离散边界值进行 FFT，提取其 Fourier 系数，并采用有限阶 Fourier 展开描述边界分布。为减弱接触端局部尖峰引起的高频振荡，对截断后的频谱系数进行平滑处理。对于圆周上的第 k 阶 Fourier 模态，其在圆域内部对应的调和延拓形式为 $\rho^k\cos(k\theta)$ 和 $\rho^k\sin(k\theta)$，其中 $\rho=r/R$。由此构造圆域内的调和提升场：

$$H(\rho,\theta,t_n)=a_0(t_n)+\sum_{k=1}^{K}\rho^k\left[a_k(t_n)\cos(k\theta)+b_k(t_n)\sin(k\theta)\right]\tag{22}$$

该函数满足 $\nabla^2H=0$，$H\big|_{\partial\Omega}=w_b(\theta,t_n)$。

定义归一化径向函数：$h(x,y)=1-\dfrac{(x-x_c)^2+(y-y_c)^2}{R^2}$。采用如下乘积型试探函数：

$$w_\theta(x,y,t_n)=H(x,y,t_n)\left[\exp\left(-h\exp(\eta_{1,\theta})\right)+h\,\mathrm{softplus}(\eta_{2,\theta})\right]\tag{23}$$

因此，在任意网络参数下均有 $H\big|_{\partial\Omega}=w_b$。从而将圆周 Dirichlet 边界条件以硬约束形式严格嵌入网络结构。该处理使后续变分优化主要作用于圆域内部的可调场，避免边界条件作为惩罚项引入额外权重参数。

二维 PDE 网络以归一化坐标 $z_x=(x-x_c)/R$、$z_y=(y-y_c)/R$ 及圆域内部距离因子 $h=1-z_x^2-z_y^2$ 为输入，采用 6 个宽度为 64 的全连接隐藏层和残差连接，输出两个潜变量 $\eta_{1,\theta}$ 与 $\eta_{2,\theta}$。并通过前述乘积型硬边界表达式构造扩散势 w_b。随后利用 $U=F^{-1}(w)$ 恢复当前时间层的等效失效变量。

录用稿件，非最终出版稿

二维演化过程采用时间逐步推进方式。时间项采用后向欧拉离散，可写为 $\frac{U^n-U^{n-1}}{\Delta t_n}=\frac{1}{A_c}\nabla\cdot\left(A_c\nabla w_\theta^n\right)+f_E^{n-1}$。由于 U 与 w 之间满足单调映射关系 $w=F(U)$，定义势函数：

$$\Psi(w)=Uw-\frac{D_0}{2}U^2-\frac{\lambda_1}{6}\langle U-U_{\mathrm{THD}}\rangle_+^3 \tag{24}$$

由此，PDE 方程可以转化为如下增量泛函的驻值问题：

$$\mathrm{J}_n(\theta)=\int_\Omega A_c(x)\left[\Psi\left(w_\theta^n\right)-U^{n-1}w_\theta^n+\frac{\Delta t_n}{2}\left|\nabla w_\theta^n\right|^2-\Delta t_n f_E^{n-1}w_\theta^n\right]d\Omega \tag{25}$$

令网络内部修正场为 $v_\theta^n=w_\theta^n-H_n$，同时，$H_n$ 为调和函数，满足 $\nabla^2H_n=0$。将 $w_\theta^n=H_n+v_\theta^n$ 代入梯度能量项，对交叉项进行分部积分，并去除与网络参数无关的纯边界提升能量，可得第 n 个时间步实际使用的增量泛函：

$$\mathrm{J}_n(\theta)=\int_\Omega A_c(x)\begin{bmatrix}\Psi(w_\theta^n)-U^{n-1}w_\theta^n+\dfrac{\Delta t_n}{2}\left|\nabla\left(w_\theta^n-H_n\right)\right|^2-\Delta t_n f_E^{n-1}w_\theta^n\\-\Delta t_n\dfrac{A_{c'}(x)}{A_c(x)}H_{n,x}\left(w_\theta^n-H_n\right)\end{bmatrix}\mathrm{d}\Omega \tag{26}$$

对式 (25) 进行一阶变分可重新得到二维扩散 PDE。因此，控制方程求解转化为一个等价的能量极小化问题[17,33]。与强形式 PINN 方法的直接最小化点态 PDE 残差不同，式 (26) 在整个圆域上随约束失效场的增量演化。网络训练只涉及状态量及其一阶空间梯度，无需进一步计算二阶空间导数，对于接触端存在窄高梯度区的二维问题具有更好的数值适应性。

变分泛函中的区域积分采用极坐标 Gauss-Legendre 数值积分。圆域在径向和角向进行分区，如图 9 所示，以兼顾全域积分精度和局部尖峰解析能力。最终使用 148224 个高斯积分点。每个积分点对应一个几何积分权重，其归一化积分权重为 $q_k=\dfrac{\omega_k A_c(x_k)}{\pi R^2}$。离散后的泛函可表示为：

$$\mathrm{J}_n^h(\theta)=\sum_{k=1}^{N_q}q_k\begin{bmatrix}\Psi\left(w_{\theta,k}^n\right)-U_k^{n-1}w_{\theta,k}^n+\dfrac{\Delta t_n}{2}\left|\nabla\left(w_{\theta,k}^n-H_{n,k}\right)\right|^2-\Delta t_n f_{E,k}^{n-1}w_{\theta,k}^n\\-\Delta t_n\dfrac{A_{c,k'}}{A_{c,k}}H_{n,x,k}\left(w_{\theta,k}^n-H_{n,k}\right)\end{bmatrix} \tag{27}$$

与传统 PINN 通过边界损失项施加约束、利用均匀配点计算控制方程残差的方式不同，本文采用调和提升将圆周 Dirichlet 边界条件直接嵌入网络结构，避免边界损失与内部残差之间的权重协调问题；同时，通过极坐标 Gauss-Legendre 积分及接触端局部加密，提高高梯度区域的积分精度。上述改进使二维变分 PINN 能够更好地适应圆域边界及接触端局部强化的失效场特征。

录用稿件，非最终出版稿

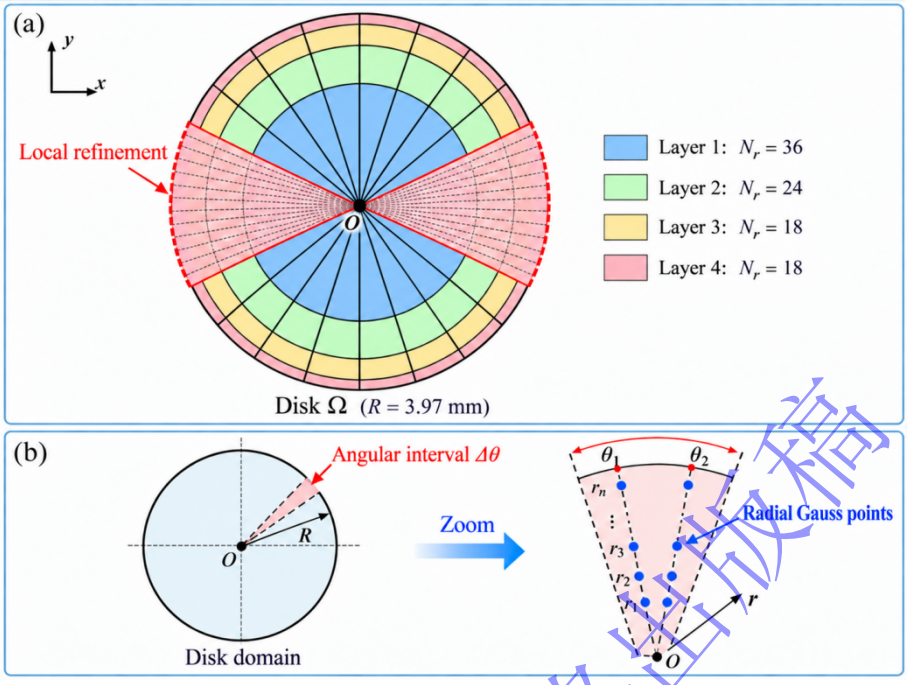


图 9 二维圆域极坐标 Gauss-Legendre 积分点及接触端局部加密分布

Fig. 9 Distribution of polar Gauss–Legendre quadrature points with local refinement near the contact regions in the two-dimensional circular domain.

4.4 二维失效变量时空演化

图 10 给出了采用变分 PINN 方法预测的应变率为 1500 s^{-1} 二维圆域内等效失效变量 U 演化。初始时刻，失效主要集中于两个接触端附近，圆域内部大部分区域维持较低水平，整体呈现明显的“两端局部高值-内部低值”非均匀分布。随着时间推进，接触端附近的高值区域逐渐增宽，并由圆周边界向圆域内部扩展，形成连续推进的失效阵面。t=4~8 μs 时，失效演化主要局限于接触端邻域；进入 t=12~20 μs 后，高值区域进一步向内部扩展，接触端与内部低值区域之间逐渐形成较为连续的过渡区。

右侧接触端在后期表现出更高的局部失效水平，左侧接触端也保持明显的扩散趋势。圆域中心区域虽随时间出现失效变量抬升，但其幅值远低于边界局部高值区，说明破碎扩散在计算时间内仍主要受接触端剪切激活控制，而不是在全圆域内均匀增长[27,34]。

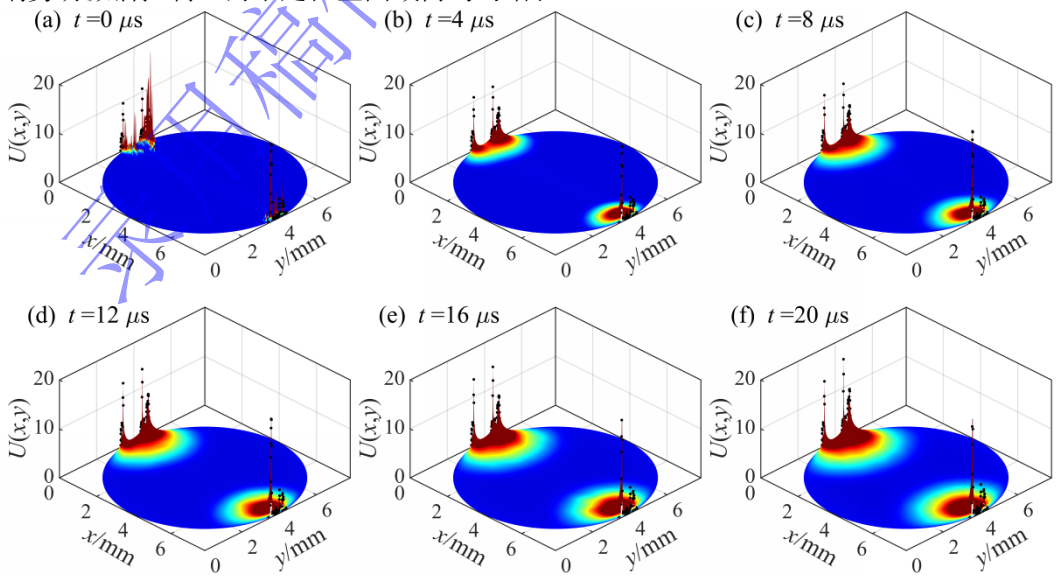


图 10 不同时刻二维圆域失效变量的变分 PINN 预测结果：(a) t=0 μs；(b) t=4 μs；(c) t=8 μs；(d) t=12 μs；(e) t=16 μs；(f) t=20 μs。

Fig. 10 Variational-PINN predictions of the failure-variable field in the two-dimensional circular domain at different times: (a) t=0 μs; (b) t=4 μs; (c)t=8 μs; (d)t=12 μs; (e)t=16 μs; (f)t=20 μs.

图 11　进一步给出了变分 PINN 与二维 FDM 基准解之间的空间绝对误差分布。整体来看，大部分圆域内部误差维持在较低水平，较明显的误差主要集中于左右接触端及失效阵面附近。在 t=4、8、12、16 和 20 μs 时，全场相对 L_2误差分别为 5.14×10⁻²、4.36×10⁻²、3.75×10⁻²、3.42×10⁻²和 3.58×10⁻²，整体呈现先降低后趋于稳定的变化趋势。随着失效阵面向内部推进，误差区域也随高梯度过渡带向圆域内部扩展，而远离接触端的低值区域仍保持较好的一致性。这主要是由于接触端局部尖峰及较大的空间梯度增加了神经网络的逼近难度，同时逐时间步优化产生的局部偏差可能随边界持续强化而有所累积；相比之下，圆域内部低值区域变化较为平缓，因此 PINN 与 FDM 的计算结果更容易保持一致。

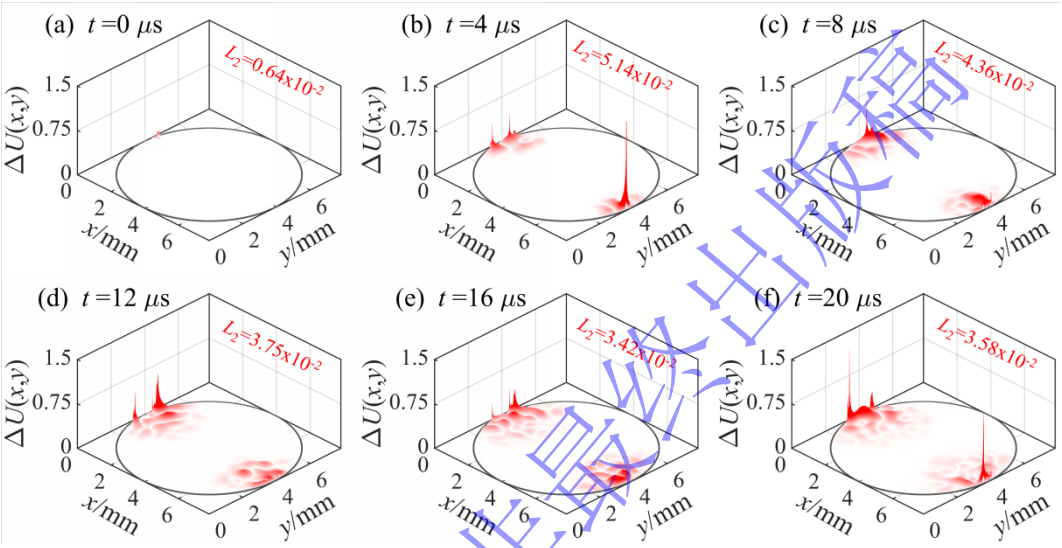


图 11 二维圆域变分 PINN 与 FDM 之间的失效变量绝对误差分布：(a) t=0 μs；(b) t=4 μs；(c) t=8 μs；(d) t=12 μs；(e) t=16 μs；(f) t=20 μs。

Fig. 11 Spatial distribution of the absolute error in the failure variable between the variational-PINN and FDM : (a) t=0 μs; (b) t=4 μs; (c)t=8 μs; (d)t=12 μs; (e)t=16 μs; (f)t=20 μs.

4.5 失效阵面演化特征

进一步表征二维失效区域由接触端向内部传播的过程，沿圆心所在冲击方向提取失效变量空间分布，根据给定失效阈值u□□=0.06 确定左右两侧失效阵面的位置。该阈值位于圆域内部近零背景区与接触端高值激活区之间，能够较稳定地区分未明显失效区与已激活失效区。以s□L/R表示第n个时刻左右阵面由边界向圆心传播的距离，则阵面传播速度采用中心差分计算：$v_{L/R}^{n}=\dfrac{s_{L/R}^{n+1}-s_{L/R}^{n-1}}{t_{n+1}-t_{n-1}}$。

图 12(a) 给出了 t=4、12 和 20 μs 时的分布结果，同时比较了变分 PINN、二维 FDM 以及 FDEM 数据。可以看出，三个时刻的失效变量均表现为接触端较高、圆域中心较低的基本分布。随着时间增加，两侧高值区不断向内部扩展，失效变量由接触端向圆心方向逐渐衰减，其与失效阈值的交点持续向内部移动，表明失效阵面不断向球体中心发展。

图 12(b) 给出了左右两侧失效阵面距离接触端的位置随时间的变化。初始阶段阵面主要位于接触端附近，随后快速向内部推进；随着传播距离增加，阵面位置仍持续增长，但曲线斜率逐渐减小，表明失效阵面的传播并非匀速过程。左右两侧前沿位置总体变化规律接近，仅在早期阶段存在一定差异，这与左右接触端初始失效状态和局部能量分布的不完全对称有关。

进一步对前沿位置随时间求导得到图 12(c) 所示的失效阵面传播速度。阵面速度在加载初期较高，随后迅速下降，并逐渐进入缓慢衰减阶段。该特征表明，失效传播在早期主要受到接触端局部高应变能和剪切激活的驱动；随着阵面向球体内部推进，局部失效变量梯度逐渐减弱，阵面的传播速度相应降低。左右两侧速度在初始阶段存在较明显差异，但随后逐渐接近，说明随着扩散过程的发展，两侧失效阵面的传播逐渐表现出相似的演化规律。

录用稿件，非最终出版稿

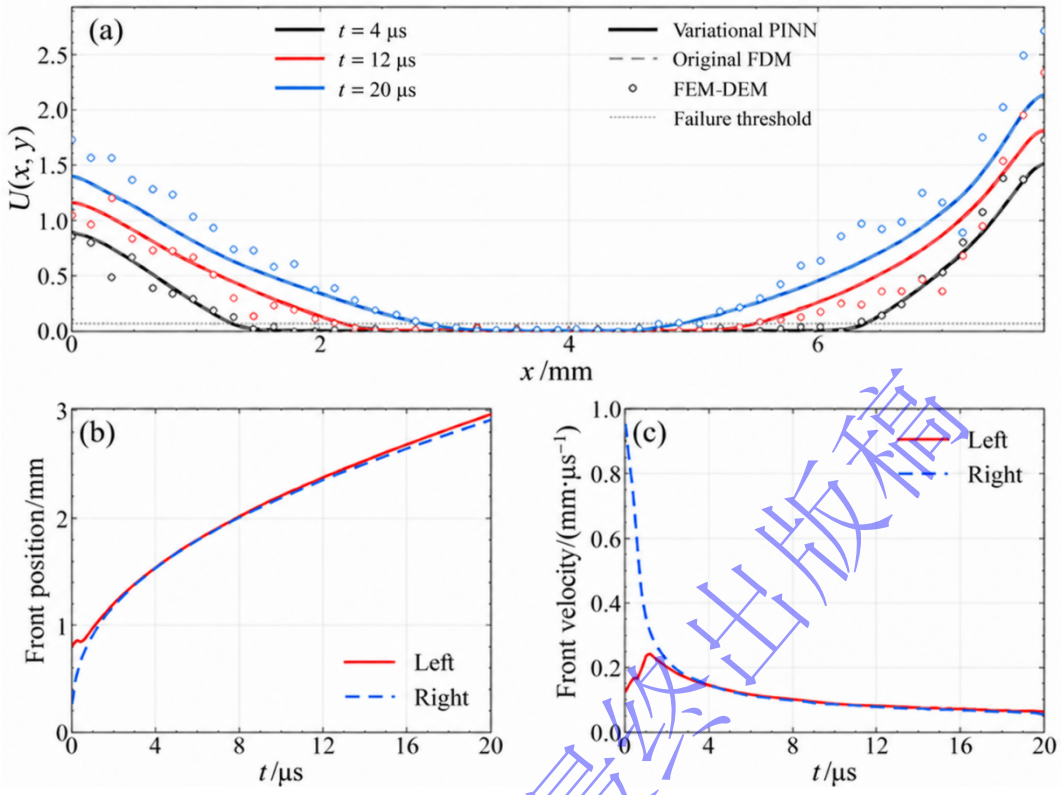


图 12 二维圆域失效阵面传播特征：(a) 圆心水平失效变量剖面；(b) 失效阵面位置；(c) 失效阵面速度。

Fig. 12 Failure-front propagation characteristics in the two-dimensional circular domain: (a) horizontal failure-variable profiles through the circle center; (b) failure-front position; (c) failure-front propagation velocity.

5 结 论

针对 SiC 陶瓷球冲击压缩下失效的弛豫演化问题，建立了应变能场驱动的剪切激活异质扩散模型，并构建了改进 PINN 方法求解框架。主要结论如下：

(1) 所建立的异质扩散模型能够将接触端应变能蓄积、剪切激活和失效阵面传播过程联系起来，可用于描述等效失效变量由局部高值区向试样内部扩展的时空演化。

(2) 双尺度指数特征、复合加权损失和聚焦采样提高了一维 PINN 对极端非均匀场的解析能力。全时空场相对 L_2 误差为 1.97×10^{-2}，误差主要集中在接触端尖峰和后期高梯度区域。

(3) 二维变分 PINN 方法通过调和提升嵌入圆周边界条件，并采用极坐标 Gauss- Legendre 积分处理圆域内的局部高梯度区域。其预测结果与 FDM 基准解整体一致，较明显的误差主要分布在接触端和失效阵面附近。

(4) 二维圆域的计算结果表明，左右接触端高值区随时间逐渐向圆域内部扩展，圆域中心的失效水平也随之升高。失效阵面在早期传播较快，随后逐渐减速，揭示出局部剪切激活是失效阵面演化的主要驱动机制。

参考文献

[1] SNEAD L L, NOZAWA T, KATOH Y, et al. Handbook of SiC properties for fuel performance modeling [J]. Journal of Nuclear Materials, 2007, 371(1-3): 329-377. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2007.05.016.

[2] 郭旭才, 陈美多, 熊颖, 等. 基于双相弛豫理论的碳化硼热力耦合响应研究 [J]. 爆炸与冲击, 2026. DOI: 10.11883/bzycj-2026-0115.

录用稿件，非最终出版稿

GUO X C, CHEN M D, XIONG Y, et al. Research on the Thermal-Mechanical Coupled Response of Boron Carbide Based on Two-Phase Relaxation Theory [J]. Explosion and Shock Waves, 2026. DOI: 10.11883/bzycj-2026-0115.

[3] 郭旭才，陈美多，谢雨珊，等. 基于双相弛豫理论的石墨烯中热波传播 [J]. 物理学报, 2026, 75(3): 030812. DOI: 10.7498/aps.75.20251335.

GUO X C, CHEN M D, XIE Y S, et al. Thermal wave propagation in graphene based on two-phase relaxation theory [J]. Acta Physica Sinica, 2026, 75(3): 030812. DOI: 10.7498/aps.75.20251335.

[4] MIAO C, XU S, SONG Y, et al. Influence of stress state on dynamic breakage of quartz glass spheres subjected to lower velocity impacting [J]. Powder Technology, 2022, 397: 117081. DOI: 10.1016/j.powtec.2021.117081.

[5] XIONG Y, XU S, CHEN M, et al. A self-similarity based approach to investigate tensile-shear effects in SiC ceramic sphere under impact [J]. Powder Technology, 2026, 484: 122916. DOI: 10.1016/j.powtec.2026.122916.

[6] XIE Y, XU S, HUANG J, et al. Dynamic compaction induced heterogeneity in boron carbide powder [J]. Ceramics International, 2022, 48(23): 34999-35010.

[7] SHIPWAY P H, HUTCHINGS I M. Fracture of brittle spheres under compression and impact loading. I. Elastic stress distributions [J]. Philosophical Magazine A, 1993, 67(6): 1389-1404. DOI: 10.1080/01418619308225362.

[8] WU S Z, CHAU K T. Dynamic response of an elastic sphere under diametral impacts [J]. Mechanics of Materials, 2006, 38(11): 1039-1060. DOI: 10.1016/j.mechmat.2005.08.005.

[9] HUANG J Y, XU S L, HU S S. Size effect on the compression breakage strengths of glass particles [J]. Powder Technology, 2014, 268: 86-94.

[10] SALMAN A D, GORHAM D A. The fracture of glass spheres [J]. Powder Technology, 2000, 107(1-2): 179-185. DOI: 10.1016/S0032-5910(99)00186-2.

[11] POTAPOV A V, CAMPBELL C S. The two mechanisms of particle impact breakage and the velocity effect [J]. Powder Technology, 1997, 93(1): 13-21. DOI: 10.1016/S0032-5910(97)03242-7.

[12] PALIWAL B, RAMESH K T. Effect of crack growth dynamics on the rate-sensitive behavior of hot-pressed boron carbide [J]. Scripta Materialia, 2007, 57(6): 481-484. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2007.05.028.

[13] MIAO C, XU S, YUAN L, et al. Experimental investigation of failure diffusion in brittle materials subjected to low-speed impact [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2023, 259: 108632.

[14] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. 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. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.

[15] KARNIADAKIS G E, KEVREKIDIS I G, LU L, et al. Physics-informed machine learning [J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(6): 422-440. DOI: 10.1038/s42254-021-00314-5.

[16] BAI J, RABCZUK T, GUPTA A, et al. A physics-informed neural network technique based on a modified loss function for computational 2D and 3D solid mechanics [J]. Computational Mechanics, 2023, 71(3): 543-562. DOI: 10.1007/s00466-022-02252-0.

[17] ZHENG B, LI T, QI H, et al. Physics-informed machine learning model for computational fracture of quasi-brittle materials without labelled data [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2022, 223: 107282. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2022.107282.

[18] EGHBALPOOR R, SHEIDAEI A. A peridynamic-informed deep learning model for brittle damage prediction [J]. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2024, 131: 104457. DOI: 10.1016/j.tafmec.2024.104457.

[19] WANG S, TENG Y, PERDIKARIS P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2021, 43(5): A3055-A3081. DOI: 10.1137/20M1318043.

[20] WANG S, YU X, PERDIKARIS P. When and why PINNs fail to train: A neural tangent kernel perspective [J]. Journal of Computational Physics, 2022, 449: 110768. DOI: 10.1016/j.jcp.2021.110768.

录用稿件，非最终出版稿

[21] MAO Z, JAGTAP A D, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks for high-speed flows [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 360: 112789. DOI: 10.1016/j.cma.2019.112789.

[22] SHAN J F, XU S L, LIU Y G, et al. Dynamic breakage of glass sphere subjected to impact loading [J]. Powder Technology, 2018, 330: 317-329.

[23] 简世豪, 苗春贺, 张磊, 等. 双石英玻璃珠的低速冲击破碎行为 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(2): 024202.
JIAN S H, MIAO C H, ZHANG L, et al. Low-speed impact fragmentation behavior of double quartz glass beads [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2021, 35(2): 024202.

[24] 易洪昇, 徐松林, 单俊芳, 等. 不同加载速度下脆性颗粒的破坏特性 [J]. 爆炸与冲击, 2017, 37(5): 913-922.
YI H S, XU S L, SHAN J F, et al. Failure characteristics of brittle particles under different loading velocities [J]. Explosion and Shock Waves, 2017, 37(5): 913-922.

[25] MIAO C, XU S, LU J, et al. Dynamic breakage of double glass spheres chain subjected to impacting loading [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2022, 232: 107610.

[26] 苗春贺, 袁良柱, 陆建华, 等. 聚甲基丙烯酸甲酯的冲击破碎扩散特性 [J]. 物理学报, 2022, 71(21): 216201.
MIAO C H, YUAN L Z, LU J H, et al. Impact fragmentation diffusion characteristics of polymethyl methacrylate [J]. Acta Physica Sinica, 2022, 71(21): 216201.

[27] 陈美多, 张祥林, 袁良柱, 等. 岩石界面的动态剪切扩散行为 [J]. 爆炸与冲击, 2024, 44(8): 46-61. DOI: 10.11883/bzycj-2023-0469.
CHEN M D, ZHANG X L, YUAN L Z, et al. Dynamic shear diffusion behavior of rock interfaces [J]. Explosion and Shock Waves, 2024, 44(8): 46-61. DOI: 10.11883/bzycj-2023-0469.

[28] KINGMA D P, BA J. Adam: A method for stochastic optimization [C]. International Conference on Learning Representations, 2015. arXiv:1412.6980.

[29] LIU D C, NOCEDAL J. On the limited memory BFGS method for large scale optimization [J]. Mathematical Programming, 1989, 45(1-3): 503-528. DOI: 10.1007/BF01589116.

[30] WU C, ZHU M, TAN Q, et al. A comprehensive study of non-adaptive and residual-based adaptive sampling for physics-informed neural networks [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2023, 403: 115671. DOI: 10.1016/j.cma.2022.115671.

[31] YU J, LU L, MENG X, et al. Gradient-enhanced physics-informed neural networks for forward and inverse PDE problems [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2022, 393: 114823. DOI: 10.1016/j.cma.2022.114823.

[32] MCKAY M D, BECKMAN R J, CONOVER W J. Comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code [J]. Technometrics, 1979, 21(2): 239-245. DOI: 10.1080/00401706.1979.10489755.

[33] KHARAZMI E, ZHANG Z, KARNIADAKIS G E. hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021, 374: 113547. DOI: 10.1016/j.cma.2020.113547.

[34] XIONG Y, XU S, XIE Y, et al. Decoupling tensile and shear effects in dynamic fracture of glass sphere [J]. Powder Technology, 2025, 460: 121083. DOI: 10.1016/j.powtec.2025.121083.

录用稿件，非最终出版稿