

物理引导的深度学习研究综述:进展、挑战和展望

陈冲¹⁺,朱啸宇¹,王芳¹,许雅倩¹,张伟²

1. 中国石油大学(北京) 人工智能学院,北京 102249

2. 中国科学院 西北生态环境资源研究院 冰冻圈科学与冻土工程重点实验室可可托海站,兰州 730000

+ 通信作者 E-mail: chenchong@cup.edu.cn

摘要:尽管深度学习在处理非线性高维问题时表现出强大的能力,但在复杂科学与工程问题中仍面临诸多挑战,如高昂的计算成本、大量的数据需求、难以解释的黑盒特性,缺乏对物理规律的建模能力等。为此,近年来涌现了一种新的框架——物理引导深度学习,通过将领域内的物理知识融入深度学习模型的构建和训练过程中,旨在增强模型的性能、可解释性及其物理一致性。对国内外关于物理引导深度学习的相关工作进行了全面梳理与分析。介绍了物理引导深度学习框架的主要动机与理论基础。对物理信息组合与物理信息融合两种模式进行了详细讨论,总结了各方法的特点、局限性与应用场景。分析了物理引导深度学习在多个领域应用中的表现,并从计算复杂性与优化收敛问题、控制方程偏离问题、观测数据依赖问题与知识融合困难问题四个方面探讨了该框架目前面临的挑战,并基于此展望该领域未来的发展方向,以期为研究者提供借鉴思路及多维度视角。

关键词:科学范式;物理引导;深度学习;模型融合;控制方程

文献标志码:A **中图分类号:**TP183

Comprehensive Review of Physics-Guided Deep Learning: Advancements, Challenges, and Perspectives

CHEN Chong¹⁺, ZHU Xiaoyu¹, WANG Fang¹, XU Yaqian¹, ZHANG Wei²

1. College of Artificial Intelligence, China University of Petroleum (Beijing), Beijing 102249, China

2. Key Laboratory of Cryospheric Science and Frozen Soil Engineering, Northwest Institute of Eco-Environment and Resources, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China

Abstract: Although deep learning has significant achievements in addressing nonlinear and high-dimensional problems, it faces challenges in complex scientific and engineering domains (such as high computational costs and data requirements, the difficulties in interpreting its black-box nature, and the lack of capabilities for following the physical laws). Therefore, a novel framework called physics-guided deep learning has emerged which enhances the performance, explainability, and physical consistency of deep learning by integrating domain-specific physical knowledge into the construction and training process of deep learning models. This paper reviews and analyzes the researches (e.g., methodologies, applications, etc.) on physics-guided deep learning thoroughly. Firstly, the main motivations and theoretical foundations of the physics-guided deep learning are introduced. Secondly, a detailed discussion is conducted on the two modes: the combination of physical information with deep learning and the fusion of physical information with deep learning. The characteristics, limitations and application scenarios of the two modes are summarized and discussed. Finally, the performance of physics-guided

基金项目:国家重点研发计划(2022YFC2803700);甘肃省自然科学基金(23JRRA583)。

This work was supported by the National Key Research and Development Program of China (2022YFC2803700), and the Natural Science Foundation of Gansu Province (23JRRA583).

收稿日期:2024-07-16 **修回日期:**2024-09-13

deep learning on various applications is analyzed. Furthermore, the challenges of the physics-guided deep learning are discussed from four perspectives: computational complexity and convergence, biases while involving control equations, dependence on observational data, and difficulties in knowledge fusion, based on which, an outlook for the future direction of this domain is provided. This paper strives for providing research reference and multidimensional perspectives of physics-guided deep learning for the researchers.

Key words: scientific paradigm; physics-guided; deep learning; model fusion; governing equations

科学研究方法的框架与体系被称为科学范式,科学研究已经经历了经验科学范式、理论科学范式与计算科学范式^[1],并在大数据时代逐渐向数据密集型范式转变^[2]。在计算科学范式中,计算机技术和先进的数值方法,如 Ansys Fluent、COMSOL Multiphysics 和 FLAC (fast Lagrangian analysis of continua) 等,已被广泛用于建模和求解复杂的物理问题。但这些基于数值机理的模型在处理非线性多尺度问题时面临挑战,如计算成本高、对未知物理过程的建模困难及对网格化方法的依赖等^[3]。同时,在计算科学范式与数据密集型范式中均备受瞩目的深度学习方法,因其能够自动提取特征与规律^[4-5],拥有强大的复杂函数逼近能力^[6]而被广泛应用,已在图像识别^[7]、气象建模^[8]、材料信息学^[9]、水文学^[10],及数学^[11-12]等领域取得了显著的成果。然而,传统深度学习具有以下几个问题:(1)黑盒特性使人难以相信其能获得可解释性强且与物理规律相一致的结果;(2)严重依赖于训练过程,在与训练数据分布不同的实际应用中泛化能力不佳;(3)依赖于大量的观测数据,数据的获取费时费力,且观测数据不可避免地缺失或误差可能导致深度学习结果无法达到令人满意的准确度。基于此,为改善数值机理模型和深度学习方法的局限性,结合经验、理论与计算科学范式知识的深度学习方法为研究者提供了新的思路。

经验、理论、计算科学范式经历了长时间的发展,积累了丰富的知识与研究成果。在深度学习领域内,这些知识与研究成果包括物理定律、物理机理、专家经验等,被称为物理信息(或物理知识),将这些物理信息应用并融合到深度学习中,可以为深度学习模型内嵌领域物理知识,形成了物理引导的深度学习(physics-guided deep learning, PGDL)或理论引导深度学习(theory-guided deep learning, TGDL)。将物理信息与深度学习方法融合可在一定程度上提升深度学习方法的可解释性与物理一致性,同时,由于物理信息的融入,可大大减少深度学习方法对观测数据的依赖。

从 20 世纪 90 年代,已有尝试使用先验知识改进神经网络^[13]的研究。2017 年,Raissi 等^[14-15]提出了物理引导神经网络(physics-informed neural networks, PINN),

成功地将物理方程约束引入深度学习模型中,实现了偏微分方程的求解。这一工作将物理引导神经网络方法引入了研究的聚光灯下,并引领了该领域后续大量研究的开展。这些研究工作不仅进一步探索了物理引导深度学习的潜力,还为其在各个领域的应用提供了重要的理论和实践基础。近年来,许多学者在此基础上对物理引导的深度学习方法进行了深入研究^[16-20],在多个领域取得了显著的研究成果,这些成果进一步验证了该方法在提高模型准确率、泛化性、物理一致性和鲁棒性方面的潜力。例如,在结构力学领域,物理引导深度学习方法成功应用于结构动力学模拟,能够更精确地预测结构的响应和行为^[21];在化学领域,物理引导方法被成功应用于化学过程模拟,并帮助发现新化合物^[22-23];而在水文学领域,物理引导深度学习方法在湖泊温度建模、地下水渗流建模、降雨径流模拟、洪水预测和水文数据分析等方面展示出了独特的优势,并取得了令人满意的研究成果^[24-30]。这些都表明该方法在处理多尺度、多物理场耦合问题方面具有广泛的应用前景。

物理信息的长期积累与深度学习方法的持续发展,都各自形成了较为完整的理论体系,因此,物理信息与深度学习方法的融合需要学科之间紧密地沟通。然而,目前大多将深度学习与物理信息相结合的研究均是由不同学科的研究人员在独立研究中开发的。为加速不同研究团体之间的思想交流,并推进物理引导深度学习方法的研究与应用,本文对该领域的主流设计思路进行了总结,并介绍了其在不同领域的应用及流行趋势,旨在为研究者提供一个全面的视角,能够了解物理引导深度学习的最新进展和技术前沿。

1 物理引导深度学习

在物理引导深度学习框架的构造方法中,通常存在物理信息组合与物理信息融合两种模式(如图 1)。物理信息组合将领域物理知识编码为物理引导项并从外部介入引导神经网络的计算过程,通常将物理引导项应用于深度学习模型的前端以构建物理引导的数据处理方法;应用于后端以构建输出优化方法;应用于优化阶段以构建损失函数。不同于物理信息组合的引入外部

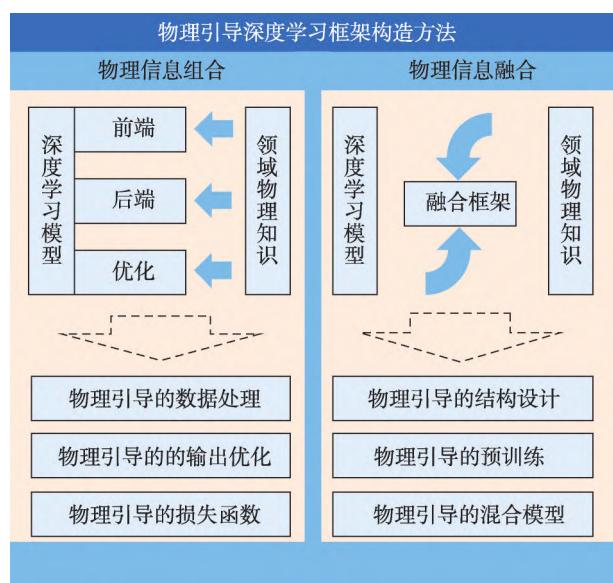


图1 物理引导深度学习框架构造方法

Fig.1 Construction methods of physics-guided deep learning frameworks

引导的方式,物理信息融合针对特定问题将领域物理知

识与深度学习模型进行深度融合,构建融合框架以实现优势互补。常用的方法包括物理引导的结构设计、预训练任务设计与混合模型构建等。

本章将从物理信息组合与物理信息融合框架构建模式及其相关的子方法出发,总结与介绍物理引导深度学习的应用案例。将重点探讨物理信息组合方面的关键方法,包括物理引导的数据处理、输出优化和损失函数设计等方面。同时,还将详细研究物理信息融合的常用方法,如物理引导的结构设计、预训练任务设计和混合模型构建等。表1对本章中将要阐述物理引导深度学习相关方法的机制、优势、局限性、适用场景进行了归纳总结。旨在为读者提供物理引导深度学习领域的理论指导和实践指南,为进一步推动物理引导深度学习方法的发展和应用提供有益的参考。

为便于后续详细论述物理引导深度学习方法,表2列举了全文涉及的重要符号及其含义。

1.1 物理信息组合

1.1.1 物理引导的数据处理

在深度学习模型中,数据是驱动模型学习的关键因

表1 物理引导深度学习方法归纳

Table 1 Summarization of physics-guided deep learning methods

| 方法分类 | 机制 | 优势 | 局限性 | 适用场景 |
|-----------|-------------------------|-------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|
| 物理引导的数据处理 | 利用数值机理模型或客观物理信息来补充或修正数据 | 简化工程问题,增强模型的物理约束遵循性并提升模型性能 | 会引入系统偏差,存在参数估计困难以及过度收敛的风险 | 适用于数据质量受损或存在较多噪声的情况 |
| 物理引导的输出优化 | 利用领域知识对模型的输出进行后处理 | 模型的外推能力增强,提高模型的适用范围和泛化能力 | 使模型对异常值较敏感,需采取额外的数据预处理措施 | 适用于需要预测超出训练集范围的数据的情况 |
| 物理引导的损失函数 | 软约束 | 基于已知的物理方程、领域专家知识构建物理引导项 | 应用范围广,可实现更健壮的训练,能够约束参数更新方向且不显式增加模型参数 | 物理一致性不足,无法确保全面遵守物理约束,正则化项权重难以调整 |
| | 硬约束 | 为模型引入严格的限制条件,在定解条件上严格满足物理一致 | 可减少算法的数据需求,降低模型优化压力,提升模型鲁棒性 | 仅保证局部符合物理约束,增加计算时间 |
| 物理引导的结构设计 | 信息嵌入 | 将物理信息以神经元节点、数据流等形式嵌入深度学习模型中 | 增强模型对复杂问题的建模能力,提高预测准确性 | 需要精细的超参数调整,依赖物理信息的准确性,增加模型复杂性及计算成本 |
| | 结构定制 | 以特定物理知识为灵感定制模型结构可抽象地结构化反映物理信息 | 使模型训练和优化过程贴近真实物理系统,提升模型效率和可解释性 | 缺乏统一标准来选择合适的结构,依赖工程直觉和试错方法 |
| 物理引导的预训练 | 构建包含领域知识经验的预训练任务 | 模型适应性增强,可降低对高质量数据的依赖 | 增加模型复杂性和训练成本,具有领域依赖性 | 适用于数据获取成本高或数据稀缺的情况 |
| 物理引导的混合模型 | 模型集成 | 数值机理模型与深度学习进行结构或过程的集成 | 增强模型物理一致性,提高预测精度 | 需考虑物理模型的可用性和准确性及对模型进行细节校准 |
| | 残差建模 | 深度学习模型关注预测数值机理模型的残差以弥补模型误差 | 增强模型对新或未见数据的适应能力,降低过拟合风险,计算资源需求较低 | 适用于数据丰富、环境或操作条件变化大的情况 |

表2 本文符号及含义
Table 2 Notations and their meanings

| 符号 | 符号含义 |
|--------------------------------|------------------|
| X | 模型输入 |
| Y_{pre} | 模型预测输出 |
| θ | 模型可训练参数 |
| f_{net} | 深度学习模型 |
| f_{DE} | 微分方程 |
| f_{phy} | 物理引导项 |
| $y^{(n)}/Y_{\text{pre}}^{(n)}$ | 高阶微分项 |
| a | 值域极值 |
| N | 物理引导项配置点数量 |
| M | 物理约束项数量 |
| P | 施加硬约束后物理约束项数量 |
| $LOSS_{\text{data}}$ | 标签数据与模型输出数据间的损失 |
| $LOSS_{\text{phy}}$ | 物理引导损失函数 |
| $LOSS_{\text{phy,hard}}$ | 施加硬约束后的物理引导损失函数 |
| $LOSS$ | 多项损失函数加权后的总损失函数 |
| λ_i | 超参数, 用于调整各项损失的权重 |
| $Diff$ | 表示两者间的差异 |

素, 而数据中所蕴含的物理信息对于模型能否学习到准确的物理规律具有重要影响。因此, 在数据准备阶段, 可利用数值机理模型或客观物理信息来补充或修正数据, 从而提升深度学习模型的准确性和泛化能力。在水文学领域, Khandelwal 等^[31]使用地形海拔高度信息来修正卫星遥感获取的水体分布区域数据, 采用优先判定凹面地形区域为水体的方法, 解决了卫星数据缺失和错误等问题, 相较于传统滤波器方法, 预处理模型在无干扰与加入 40% 随机干扰噪声情况下准确性分别提升 97% 与 16%, 鲁棒性获得了大幅改进。在桥梁损失误差建模任务中, Yin 等^[32]通过分析桥梁激励响应对桥梁损失数据进行校正, 并将加速度信号转化为时频图像以提取更多频率信息, 与传统损伤识别技术相比, 模型预测准确率平均提升约 41%。改变数据预处理方式以确保深度学习模型的输入数据包含正确的原始物理信息, 也是物理引导数据处理的重要方法。Kashefi 等^[33]针对不均匀域中的翼面流体力学预测问题, 采用 PointNet 架构处理数据集, 以保留翼面数据的原始物理特性为目标, 在 $0^\circ \sim \pm 30^\circ$ 攻角下的预测误差(以欧氏距离 L^2 测量)均不超过 0.25, 相较传统计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)方法运行速度提升数百倍。

这些研究表明, 在数据准备阶段采用物理引导方法对数据进行修正或增强可以提高深度学习模型性能与物理一致性。然而, 利用数值机理模型补充、修正数据

也不可避免地引入了一些问题。这些数值机理模型通常是基于已知物理定律根据输入计算输出变量, 但由于目前对某些物理过程的不完全了解以及数值求解方法对控制方程的近似求解, 数值机理模型大多仅能提供实际物理过程的近似表示, 从而引入系统偏差。此外, 大多数数值机理模型参数较多, 需要首先借助有限的观测数据来估计这些参数值, 在计算成本较高的同时也引入了偏差。

1.1.2 物理引导的输出优化

在各个学科领域中, 数据分布规律和特征通常是非常重要的领域知识。利用这些领域知识对模型的输出进行后处理, 可以确保模型输出结果与物理实际相一致(如图 2 所示), 从而实现对输出结果的物理引导优化。Khandelwal 等^[34]在构建全球地表水动态地图的研究中, 针对中分辨率成像光谱仪(moderate-resolution imaging spectroradiometer, MODIS)的多光谱数据标定淡水资源面积时历史数据不完善、多地区水体/陆地数据标签不完整、不准确等问题, 基于“长时间被分类为水体的地区更可能拥有较低海拔”的物理规律, 有效提取了地理数据中隐藏的海拔高度信息。基于海拔信息的物理引导输出优化后处理修正项, 将水体/陆地的分类标签与海拔高低顺序进行统一, 改善了前人工作中全球地表水动态地图的分类质量, 在相同数据集的情况下, 使用改进的算法将皮尔逊相关系数(Pearson correlation coefficient, PCCs)由 0.83 提升至 0.94。但这种后处理方法在物理信息几乎不变或变化不足的场景中效果有限, 并且在处理具有更高空间分辨率的复杂几何区域时面临挑战。Chen 等^[35]采用类似的后处理方法成功改进了地下水水流深度学习模型。该研究将领域物理知识(地下水渗流控制方程)离散化为约束矩阵, 以确定符合控制方程解的超平面, 使用投影法将模型输出预测矩阵映射到该超平面, 从而优化模型输出并满足理论约束, 较传统多层神经网络, 物理信息的加入将预测精度 L^2 提升约 84%。Hautier 等^[23]采用输出优化的方法发现了新的化

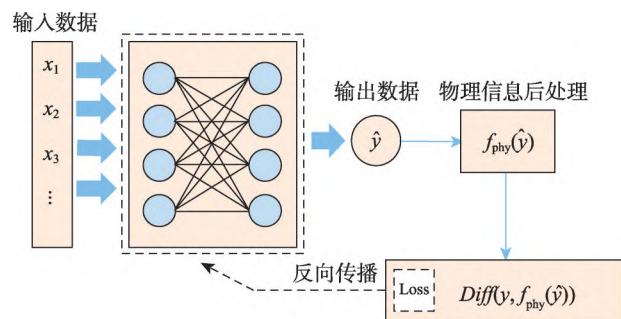


图2 物理引导的输出优化模型
Fig.2 Physics-guided output optimization model

合物。该研究首先在晶体结构数据库中建立了概率模型,输出最有可能形成新化合物的成分和晶体结构。然后利用密度泛函理论(density functional theory, DFT)作为输出优化项以测试筛选新化合物,该理论能准确模拟各种化合物的基态和有限温度行为,并有效证明化合物的相稳定性。该输出优化项帮助模型发现了355种新的稳定化合物,包括罕见的稀土元素混合物。Wada等^[36]在机械形状设计任务中,利用空气动力方程对生成对抗网络模型(generative adversarial network, GAN)生成的形状施加平滑约束以进行优化,从而确保模型输出形状与训练数据集相同并满足物理有效性,在多个四位数翼型数据集上平均绝对误差(mean absolute error, MAE)降至0.022,且在四种模型对比实验中表现最佳。

输出优化一种基于模型输出进行后处理的方法,其独立的结构特点赋予了其较高的灵活性,可以方便地与其他方法相结合并达成更好的模型效果。这类方法通过在模型输出端整合领域知识,增强了模型的外推能力,使其能够预测训练数据集范围外的数据,从而提高了模型的泛化能力。相较于依赖训练数据的纯数据驱动模型,采用输出优化策略的模型能基于物理机制进行外推,显著扩展了模型的适用范围。然而,这种方法构建的模型对异常值较敏感,需要采取额外的数据预处理措施进行离群点检测,以减少异常值对模型预测精度的负面影响,并提升模型对离群点的鲁棒性。

1.1.3 物理引导的损失函数

损失函数被广泛应用于指导深度学习模型的训练过程,决定了深度学习模型的优化方向与性能,同时深刻影响着深度学习模型的泛化能力。假设深度学习模型为 f_{net} ,如式(1)所示,其中 X 表示输入, Y_{pre} 表示模型输出, θ 代表模型可训练参数。对于成对的标签数据,均方误差函数(mean square error, MSE)(如式(2)所示)是常见的损失函数,它通过衡量标签数据与模型输出数据之间的相似度来优化模型参数。除了均方误差函数之外,还有许多其他常用的损失函数,如交叉熵损失函数(cross-entropy loss)、KL 散度损失函数(Kullback-Leibler divergence loss)等,它们适用于不同的任务和模型架构。

$$Y_{\text{pre}} = f_{\text{net}}(X, \theta) \quad (1)$$

$$LOSS_{\text{data}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{\text{pre}}^i - y_{\text{true}}^i)^2 \quad (2)$$

在物理引导深度学习中,可以根据具体问题和领域知识构建带有物理约束的损失函数,以进一步指导模型的优化调整。这种物理约束可以以多种形式融入损失函数中。例如,可以通过引入与物理规律相关的物理引

导项,用于约束模型输出与物理规律一致。这样的物理引导项可以基于已知的物理方程、领域专家知识(经验知识)或通过施加硬约束来构建,从而提供额外的引导方向,帮助模型更好地拟合真实物理系统。

(1)基于物理方程:构建基于已知的物理方程的物理引导项时,常常会涉及到含有高阶微分项的非线性微分方程,如Burgers方程和KdV方程等。物理引导损失函数的方法避免了直接求解微分方程的数值解,而是通过平衡方程的方式提取物理信息。微分方程 f_{DE} ,如式(3)所示,反映了微分方程的平衡关系,即左侧的变量满足方程的物理约束。通过将深度学习模型的输入 X 和输出 Y_{pre} 代入微分方程 f_{DE} ,可以得到物理引导项 f_{phy} (如式(4))。该项体现了深度学习模型输入和输出变量与物理信息之间的符合度。

$$f_{\text{DE}}(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0 \quad (3)$$

$$f_{\text{phy}}(X, f_{\text{net}}(X, \theta)) = f_{\text{DE}}(X, Y_{\text{pre}}, Y_{\text{pre}}', \dots, Y_{\text{pre}}^{(n)}) \quad (4)$$

(2)基于领域专家知识:在某些领域中,经验知识可以以单调性关系或变量的合理值范围等形式表达,并可以使用不等式进行表示。若需使深度学习模型能够遵循如式(5)、(6)所示的单调性或值域经验关系,可以构造如式(7)、(8)所示的物理引导项来度量模型与经验知识之间的符合度。通过合理的数学变换方法,研究者可以灵活地运用各种领域知识来构建物理引导项。

$$f_{\text{net}}(x_i, \theta) \leq f_{\text{net}}(x_j, \theta), x_i < x_j \quad (5)$$

$$f_{\text{net}}(x, \theta) \leq a \quad (6)$$

$$f_{\text{phy}}(x, f_{\text{net}}(x, \theta)) = \begin{cases} f_{\text{net}}(x_i, \theta) - f_{\text{net}}(x_j, \theta), f_{\text{net}}(x_i, \theta) > f_{\text{net}}(x_j, \theta) \\ 0, f_{\text{net}}(x_i, \theta) \leq f_{\text{net}}(x_j, \theta) \end{cases} \quad (7)$$

$$f_{\text{phy}}(x, f_{\text{net}}(x, \theta)) = \begin{cases} f_{\text{net}}(x, \theta) - a, f_{\text{net}}(x, \theta) > a \\ 0, f_{\text{net}}(x, \theta) \leq a \end{cases} \quad (8)$$

$$LOSS_{\text{phy}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f_{\text{phy}}(x_i)]^2 \quad (9)$$

$$LOSS = \lambda_1 LOSS_{\text{data}} + \sum_{i=2}^M \lambda_i LOSS_{\text{phy},i} \quad (10)$$

基于物理引导项残差构建的物理引导损失函数(如式(9))可以用于对深度学习模型施加物理信息约束。通过将多个损失函数进行加权和连接(如式(10)),可以构建多样化的损失函数。超参数 λ_i 用于调整各损失函数的权重,从而综合考虑标签数据与物理信息的重要性。通过灵活调整这些超参数,可以平衡标签数据与物理信息之间的权衡关系以使模型能够响应不同任务的具体需求(如满足物理一致性)。图3展示了物理引导损失函数方法的运行机制。

基于物理方程或领域知识构建物理引导损失函数

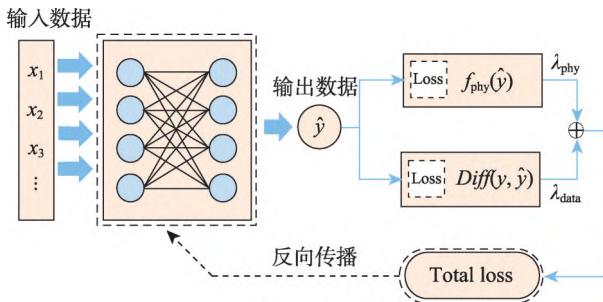


图3 物理引导的损失函数模型

Fig.3 Physics-guided loss function model

是目前流行的一种物理引导深度学习方法,属于软约束的范畴。以降雨径流建模为例,Xie等^[25]总结了降雨径流的极端天气情况与基本物理机制之间的关系,包括长期强降雨导致土壤含水量饱和、长期无雨导致极端干旱以及降雨强度与径流量大小的单调关系等。基于这些物理机制,研究团队构建了物理引导项,并将其与长短时记忆(long short-term memory, LSTM)网络结合进行训练。实验结果显示,与传统的LSTM模型相比,物理机制的加入不仅将MSE平均值从0.36下降至0.11,还显著改进了对洪峰的预测,并完全消除了不符合基本物理规律的“负流量”错误预测。类似的,Johnson等^[37]基于等离子体的欧姆定律损失函数的理论指导深度学习模型,消除了模型产生违反欧姆定律约束的预测的可能性,在不同太阳周期背景下进行的太阳风模拟实验中,物理约束模型的决定系数R2相比其他无约束深度学习回归模型平均提升约25%。在轴承剩余使用寿命预测问题上,Lu等^[38]利用轴承退化信息与监测信息间的单调约束关系构建了轴承退化过程的物理引导项,并引入时空注意机制,通过构建物理引导损失函数与深度学习模型相结合,对比其他先进模型,物理信息的加入显著提高了对现有数据的利用效率,R2指标达到0.902,物理一致性得分方面平均提升约36%。Karpatne等^[29]则根据湖泊系统中水密度随深度增加而增大的单调关系规律,设计了物理引导项。物理信息的加入使模型在湖泊温度预测的均方根误差(root mean square error, RMSE)从传统深度神经网络(deep neural networks, DNN)模型的2.07 °C优化至1.79 °C。此外,该模型完全消除了物理不一致性,提高了预测的准确性和可靠性。在流行病学领域,Magri等^[39]研究了新型冠状病毒的传播方式,利用基于易感者(susceptible, S)、感染者(infected, I)、康复者(recovered, R)和死亡者(deceased, D)的病毒传播模型,即SIRD模型构建了物理引导的损失函数,对多个国家新冠病毒病例增长情况进行建模分析。在真实病例数据集内的测试表明该模型可对康复者、感染者数量做出

较为准确的预测。

这些研究表明,物理引导损失函数的引入可以有效地将领域物理知识融入深度学习模型中,提升模型的性能和可解释性,并使模型能够更好地符合真实世界的物理规律。对模型施加软约束的一个主要优势在于,能够在输出(观察)数据不可用的情况下通过计算物理引导损失函数训练模型。进一步,当观测数据较稀疏时,也可以通过引入物理引导损失函数训练模型。此外,在算法复杂度方面,该方法在不显式增加模型参数的情况下,通过正则化项约束参数的更新方向。这种约束确保了模型预测沿着合理的方向优化。然而,基于软约束的模型可能仍然会产生物理上不一致的结果,因为它仅计算模型预测与物理机制之间一致性程度的加权平均值。这种策略只能在平均意义上保证预测结果不严重违反约束,无法确保预测结果在每个点都符合物理约束,即模型可能会在某些点上产生偏离控制方程的物理不一致的预测。目前,尚无适用的解决方案可以通过调整正则化项的权重,让模型更侧重于某项或多项基于物理的损失,实现各物理约束项的自适应优化控制。

(3)硬约束:复杂系统中的领域先验知识通常由泛定方程和定解条件等组成。硬约束指为模型引入严格的限制条件,保证其在定解条件上严格与物理一致。施加物理硬约束后得到的总损失函数无需考虑由边界和初始条件构成的惩罚项(如式(11))。图4展示了在软约束方法基础上施加物理硬约束构建物理引导损失函数方法的运行机制。

$$LOSS = \lambda_1 LOSS_{data} + \sum_{i=2}^P \lambda_i LOSS_{phy,hard,i} \quad (11)$$

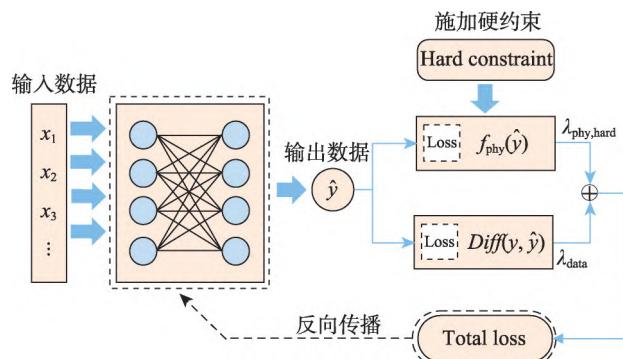


图4 施加硬约束的物理引导损失函数模型

Fig.4 Physics-guided loss function model with hard constraint

引入严格限制的定解条件是目前常用的施加硬约束的方法。在多材料扩散问题上,Xie等^[40]通过将解和通量的连续性条件作为硬约束整合到神经网络的数学形式中,完美解决了轴向界面处的不连续问题,与其他

增强型PINN方法在多场景下相比,总计算时间平均减少约20%。为解决神经网络中的“频谱偏差”现象,Deng等^[41]将多尺度深度神经网络与硬约束技术相结合,惩罚指定边界和初始约束的任何偏差,以将平流扩散方程(advection-diffusion equations, ADE)的解转化为一个无约束优化问题。不同维度的ADE数值实验表明,硬约束的引入增强了模型的有效性,MSE平均降低了6个数量级。

基于硬约束指导的模型具有一定的灵活性,有利于融合模型训练过程中的各种信息,这对提高模型精度具有重要意义。理论上,硬约束方法可以有效减少算法的数据需求,并且在较少的配置点(观测点)、边界点和观测值的情况下,依然能够获得较高的预测精度,同时对有噪声的观测具有更强的鲁棒性。从优化角度来看,硬约束通常比软约束更有效。对模型施加硬约束避免了直接构建边界和初始条件的残差项,减少了残差项的数量,降低了模型面对多重优化问题时的压力,并为手动调整训练超参数 λ_i 提供了便利。硬约束方法提高了模型的学习能力,可以有效利用领域知识和先验信息,但也存在一定的局限性。目前,对硬约束的研究还处于初级阶段,需要进一步深入探索。当前的硬约束方法只能保证严格的限制条件区域周围的配置点的预测结果严格符合物理约束,不能保证整体满足。换句话说,硬约束方法是一种从局部到全局的应用方法,而局部遵守约束是全局满意的必要不充分条件。只有所有位置都满足泛定方程和定解条件,才能保证整体的物理约束。同时,扩大硬约束的覆盖范围会增加计算时间。因此,如何平衡硬约束的覆盖范围和计算效率是一个值得进一步研究的问题。

总的来说,物理引导损失函数方法通过在损失函数中结合领域物理知识,不仅提升了模型预测的精度,减少模型对观测数据的依赖,还增强其输出的物理一致性,特别是在处理有噪声数据和复杂系统时展现出显著的鲁棒性和可信度。尽管该方法仍面临诸多挑战,研究者可结合软硬约束的优势,进一步致力于开发更加通用和高效的物理引导方法。同时,多学科交叉融合将推动这类方法在科学、工程和技术等各个领域的广泛应用。

1.2 物理信息融合

1.2.1 物理引导的结构设计

除了在深度学习模型前后端与优化阶段结合物理信息,直接使用物理信息修改深度学习模型结构能直接影响模型对物理机制的学习效果。合理运用理论知识可以很大程度上指导模型的结构设计,如McCulloch等^[42]基于大脑神经元信息交换传输的原理,提出了最早

的人工神经网络;而由大脑记忆与遗忘机制启发的LSTM网络^[43],则改进了传统循环神经网络(recurrent neural network, RNN)。物理引导结构设计的主要思想是根据特定的物理知识修改模型的结构,从而保证模型本身在一定程度上反映物理知识。物理引导的模型结构有多种设计思路,如信息嵌入及结构定制等。

(1)信息嵌入:信息嵌入指将物理信息以神经元节点、数据流等形式嵌入深度学习模型中,直接使物理信息在深度学习前向传播中耦合,强化模型输出与物理信息指导的相关性。如Jia等^[44]基于LSTM网络预测时间序列的湖泊温度,在LSTM数据流额外添加湖泊能量数据流以结合物理信息,两路数据流共同影响最终输出的湖泊温度数据。其中湖泊能量数据流以模型输出的湖泊水温、气温、气压及湖泊气候环境变量等为输入变量,结合能量守恒公式计算湖泊系统能量净变化量,指导模型的最终输出在一定程度上符合能量守恒定律。融合模型相比于传统RNN模型与基于物理的模型在湖泊温度预测的RMSE方面分别实现了最高0.5 °C与1.5 °C的提升。在预训练任务中,这种融合模型还展现了平均0.5 °C的精度优势,证明了其优异的泛化性能。Zhong等^[45]基于RNN构建模型以精确模拟高山流域径流对气候变化的响应,其中神经元的连接是通过系统动力学的显式离散表示来指定的(如描述土壤水分运动、融雪等的物理方程)。受Stefan方程启发从序列中记忆、记忆和输出信息,使输出变量具有物理意义,成功地将物理可解释性和一致性与深度学习的强大学习能力结合,模型对日、月、年流量模拟的纳什-萨特克利夫效率系数(Nash-Sutcliffe efficiency coefficient, NSE)均接近0.9。

以上研究表明,将物理信息嵌入到深度学习模型架构中,可以增强模型对复杂问题的建模能力。这样不仅可以利用深度学习模型强大的非线性拟合能力来更全面地捕捉复杂系统的动态行为,还能指导模型更准确地预测关键变量,并确保输出更加符合物理定律。然而,这种方法可能会使模型参数变得更加复杂,优化过程更为困难,需要精细的超参数调整,致使训练和推理过程中计算成本的增加。此外,嵌入的物理信息的准确性至关重要,因为不准确的物理信息会导致预测偏差。信息嵌入的优势依赖于高质量且多样化的物理信息。

(2)结构定制:以特定物理知识为灵感定制模型结构可抽象地结构化反映物理信息。Jia等^[30]使用基于图结构的LSTM网络研究河网的流量与温度变化,将图神经网络与LSTM网络结合,以真实河网的连接关系为图神经网络建立邻接矩阵,将河流流量数据添加到网络节点中,约束河流流量数值关系符合现实河道拓扑结构;

同时以能量守恒定律约束河流水温,从多方面将物理信息立体结合入网络模型中在温度和流量预测的RMSE方面,该模型比传统的RNN模型平均提升约130%。Gao等^[46]提出了一种物理引导的图卷积神经网络(graph convolutional neural network, GCNN)用于最优潮流(optimal power flow, OPF)计算,聚合局部邻域特征构建物理引导图卷积来提取拓扑特征和物理关系,以使神经网络中的特征传播遵循物理定律,与现有方法相比,在不同拓扑变化情况下,该模型OPF预测精度平均提高13.30%至32.63%。进一步,由于物理引导项的引入使得模型学习了通用的结构动力学物理规律,模型具有对包含部分未知物理关系的结构动力系统进行建模的能力。类似的,Kashinath等^[47]在模型中嵌入可微层以加强偏微分方程(partial differential equation, PDE)物理约束的优化效率,在模型内部加速对物理信息的学习,相较于卷积神经网络(convolutional neural network, CNN),物理信息层的嵌入将预测精度最高提升了约25%。

这些研究揭示了通过在结构上直接反映物理信息,可以使训练和优化过程更贴近真实的物理系统,从而为各种应用带来显著的优势。这种方法不仅大幅提升了模型效率,还增强了模型对复杂现象的可解释性,为处理复杂的科学和工程问题提供了一个可靠的工具,特别是在需要精确模拟物理现象的场景中展现出巨大的潜力。然而,在实施结构定制时,选择何种结构来反映物理信息以优化模型性能并无统一标准,这在实践中带来一定的不确定性。通常需要根据具体问题和场景特别定制模型结构,牺牲模型泛化性以提高其鲁棒性。尽管这种方法在优化模型性能上取得了进展,但关于结构定制的实用指南仍相对有限,因此模型结构的设计在很大程度上还是依赖于工程直觉和试错方法。

总而言之,物理引导的结构设计方法紧密结合了物理信息,基于物理指导的模型结构切实参与了模型的计算与优化,通过观察物理信息数据流,研究者可以直观地研究理论引导项对模型的影响,有助于对模型机理的解释。由于不同领域拥有多样的物理定律或领域经验知识,每项不同领域的研究都对应着独特的定制模型,多样且复杂的物理信息导致构建模型的经验难以继承,因此,广泛地将物理定律映射到模型结构上仍具有挑战性。

1.2.2 物理引导的预训练

合适的参数初始化有助于避免深度学习模型陷入局部最小值、鞍部及梯度消失等问题。构建包含领域知识经验的预训练任务并应用于迁移学习,有助于避免劣质的参数初始化以优化训练过程。同时,物理引导的预

训练任务可在早期阶段内化物理信息、为后继模型的泛化性能打下良好的基础。Harada等^[48]首先使用相对较大、生成成本低廉的数据集并结合物理约束来学习RAE2822机翼周围欧拉方程的解以生成物理引导的预训练初级模型。然后,利用基于Navier-Stokes方程的物理引导损失函数更新和扩充使用大量低保真欧拉数据获得的预训练模型。结果表明,使用物理引导预训练模型进行热启动,在稀疏数据下可有效进行深度学习模型的训练,其总体均方误差低于 10^{-5} ,决定系数 R^2 值为0.99。在稀疏数据条件下,预训练模型相较于传统Navier-Stokes方程模型预测精度提升近一个数量级。Wang等^[26]以地下水渗流迁移学习任务为背景研究了物理引导预训练方法的泛化性能,以恒定边界条件的二维瞬态饱和流数据构建物理引导预训练模型。将预训练模型直接迁移至边界条件突变事件,实验表明物理引导的预训练模型可有效利用内化物理信息预测训练集范围外的地下水渗流响应, R^2 相较于传统多层神经网络对照组提升约105%。Chen等^[49]利用时空网络架构门控变量来捕获动力系统物理参数的变化以提取复杂的时空数据模式。基于不同物理参数下的湖泊温度模型生成的多组模拟数据构建预训练模型以初始化该架构。通过预训练获得的初始化模型可以通过微调门控变量以轻松适应每组模拟数据,仅只使用2%的数据,也很容易改进以匹配观测结果。

这些研究展示了物理引导预训练方法在提升深度学习模型的泛化能力和预测精度方面的有效性。通过在预训练阶段内化物理信息,模型能够更好地适应未知分布的数据,具备更强的泛化能力。特别是在数据稀缺或成本较高的情况下,这种方法能利用少量或低保真度的数据实现较高的预测精度,降低对高质量数据的依赖。然而,物理引导的预训练也增加了模型的复杂性和训练成本,特别是在处理高维度和大规模问题时,可能需要大量的计算资源。此外,该方法在缺乏物理知识支持的领域或未探索的领域中的优势不太明显。未来,通过进一步结合多领域的物理知识与先进的深度学习方法,物理引导的预训练将继续推动复杂系统建模的发展。

1.2.3 物理引导的混合模型

融合基于自然物理系统机理的数值机理模型与基于数据驱动的深度学习模型以构建混合模型是一种有效的物理引导深度学习框架。混合模型的构建有多种方法,如模型集成及构建残差模型等。

(1)模型集成:将数值机理模型与深度学习进行结构或过程的集成,是发挥两种模型优势的重要方法。具

体措施包括为深度学习模型引入数值机理模型数据流以进行特征增强;实施模型级联或替代等。如 Pawar 等^[50]使用深度学习方法研究翼形气动问题,尝试使用特征增强方法将简化数值机理模型的物理信息导入深度学习模型以构造集成模型,该研究使用翼形数据驱动深度学习网络以回归升力系数,在第三隐藏层增加了气流物理参数(雷诺数与功角)、数值机理模型(Hess-Smith 面板法)产出的升力系数及压力阻力系数,所提混合模型取得了很好的效果。特别地,由于 Hess-Smith 面板法在小功角条件下表现出较好的预测效果,混合模型成功地继承了数值机理模型的优点,在攻角范围为 -10° 到 $+10^{\circ}$ 时提供了较传统方法更好的预测。Hanachi 等^[51]开发了用于预测刀具磨损的物理引导混合模型,以自适应神经模糊系统(adaptive network-based fuzzy inference system, ANFIS)为基础,以加工条件参数和传感器数据为输入特征,融合刀具磨损率预测数值机理模型构建混合模型,其对于磨损的预测精度分别比基于个体测量的推理模型和 Sipos 刀具磨损预测模型提升 48% 和 61%。Xu 等^[52]在 GCNN 中引入物理模型的刚度退化信息与导波信号的功率谱密度变化关系进行学习,以确保模型输出满足现有物理,通过仅对一种特定碳纤维增强复合材料(carbon fiber reinforced polymer, CFRP)结构的数据进行训练,混合模型就可以将其出色的性能扩展到 NASA 发布的 CFRP 数据集中的所有其他 CFRP 层上,准确率超过 90%。Chen 等^[53]通过整合作物生长和生产模型(world food studies, WOFOST)、非饱和流模型(HYDRUS)等数值模型与径向基函数神经网络构建了集成模型以进行生态水文建模。在有限硬件条件下的测试中集成模型降低了约 6% 的运行时间,增强了运行效率。在多个数据集上,集成模型与数值模拟的结果高度一致,显示出良好的泛化性能。

上述研究表明,模型集成方法有效地结合了基于物理的模型和基于数据驱动的深度学习模型的优势。通过利用两者的互补特性,不仅提升了模型的性能,还减轻了各自的不足。通过结合数值机理模型的物理准确性和深度学习的数据处理能力,该方法改善了物理过程的建模,提供了比单一模型更高的预测精度,并确保模型输出在物理上的一致性。集成模型还能有效利用数值机理模型的低成本数据与深度学习的快速计算能力,提升模型的运行速度。然而,在集成基于物理的模型和深度学习模型之前,需考虑到基于物理的模型的可用性和准确性。由于物理过程的复杂性可能随应用场景而变化,基于物理的模型需要在细节上进行适当校准,而未经校准的模型可能会引入物理信息的误差。因此,使

用经过校准的模型进行集成能更好地捕获与目标系统相关的关键物理特征,从而提高整体模型的实用性和准确性。

(2) 残差建模:残差建模是构建混合模型的一种重要方法。在面对未知的物理机理和观测误差时,基于领域物理知识的数值机理模型在实际应用中难以完全准确地描述现实物理系统,因此其输出结果会存在不可避免的误差。然而,深度学习模型具有复杂函数逼近的能力,可以对数值模型的误差进行回归。基于这一原理,可以构建残差建模框架来弥补模型误差(如图 5 所示)。Cho 等^[54]使用 LSTM 网络对基于深度学习模型与水文数值机理模型(weather research and forecasting model-hydro, WRF-Hydro)的残差进行回归,构建了混合模型(WRF-Hydro-LSTM)。实验结果表明,相较于单独应用 LSTM 网络或者 WRF-Hydro 模型,所提出的混合模型展现了更高的预测精度。具体而言,该模型在 NSE 上达到 0.95,而在相关系数 R 上超过 0.97。值得注意的是,在偏差百分比(percent bias, PBIAS)方面,该混合模型相比于单独使用的 LSTM 模型提高了 89.7%。这一显著的改进表明,混合模型在减少对训练数据集的敏感性方面取得了显著成效,从而展现出更加卓越的泛化性能。Li 等^[55]针对数值天气预报模型(numerical weather prediction, NWP)在降水预测任务中存在的系统偏差问题,利用空间信息和大气环流变量作为辅助预测因子,使用 CNN 对数值模型的残差进行建模,通过其对空间信息的提取能力,将数值机理模型在预测任务中的 RMSE 改进了约 10%。Jeon 等^[56]采用 CFD 和深度学习模型交替计算时间序列并监测第一原理残差的混合方法,两者的交叉点可以由第一原理的物理信息确定。通过进行中间 CFD 模拟,始终如一地防止深度学习模型预测的时间序列中的残差超过公差,网络参数可以在最新的 CFD 时间序列数据中使用类似的变量拓扑更新,包括参数更新时间在内,混合模型的仿真速度提高了 1.9 倍。

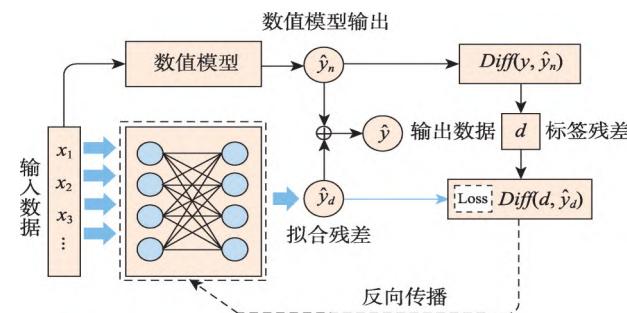


图 5 物理引导的残差建模

Fig.5 Physics-guided residual modeling

这些研究表明残差建模是直接解决基于物理的模型的缺陷的有效方法。当数值机理模型无法捕捉所有复杂非线性关系时,深度学习模型能通过学习这些差异来提供更精确的预测结果。残差模型通过校正数值机理模型的系统误差,不仅提升了特定数据集上的表现,还增强了对新或未见数据的适应能力。尽管深度学习模型容易受到过拟合的影响,但在残差建模中,其主要关注预测物理模型的残差,这种专注性降低了过拟合的可能性,并提高了模型的稳定性和可靠性。与完全基于数据驱动的模型相比,残差模型通常需要较少的计算资源,因为物理模型提供了一个近似解决方案,深度学习模型只需调整这些解决方案以适应特定的误差模式。这种方法增强了模型在不同环境中的应用灵活性和鲁棒性,为处理复杂的实际问题提供了一种有效的技术路线。然而,在使用深度学习模型进行残差建模时需谨慎。例如在某些情况下,动态系统可能需要保持稳定或状态需为非负。如果没有对残差模型施加额外的约束,深度学习模型的过度灵活性可能导致不良行为。此外,这种方法旨在模拟由物理模型产生的误差,而不是直接预测某些物理量,无法强制执行基于物理系统内部状态的更广泛约束,不能提供与已知物理定律绝对一致的预测。该方法仍然需要大量的训练数据,因此无法解决数据稀缺性的挑战。

总之,物理引导的混合模型方法通过整合基于物理的模型和深度学习模型,充分利用两者的优势,增强模型的物理意义和实用性。研究者可通过利用数值机理模型的结构性和深度学习的灵活性,改进各领域对物理知识或自然物理系统机理的应用。尽管如此,混合模型的发展仍面临诸多挑战,包括提高模型可解释性、保证决策透明度及实现绝对物理一致性等。面对这些挑战,可尝试在构建深度学习残差模型的过程中利用本文提到的物理引导方法融入物理信息。

2 物理引导深度学习方法的应用

物理引导的深度学习将领域物理知识与深度学习模型有机结合,成功改善了深度学习模型在特定科学与工程领域中的性能表现。通过物理引导,深度学习模型能够充分发挥其强大的函数逼近能力,展现出独特的应用潜力。本章将根据物理引导深度学习的研究现状,介绍其在提升可解释性、求解偏微分方程、知识发现、数据生成、降尺度和参数反演等方面的应用。以学科领域进行分类,表3总结了在不同科学与工程领域中已经用于引导深度学习训练与推导的物理原理与规律。

2.1 提升可解释性

由数据驱动的深度学习模型能够得到令人满意的

表3 物理引导深度学习中的领域物理知识应用概览

Table 3 Overview of application of field-specific physics knowledge in physics-guided deep learning

| 学科领域 | 已应用于物理引导方法的领域知识 | 参考文献编号 |
|----------|-------------------------|----------------------|
| 材料科学 | 线性扩散方程 | [40] |
| 地球物理学 | 波形物理模型 | [57] |
| | Aki-Richards 方程 | [57] |
| 地下水动力学 | 地下水渗流方程 | [26][27][35][58][59] |
| | 达西定律 | [59] |
| 地质力学 | 粘性流体本构方程 | [60] |
| 电磁学 | Helmholtz 方程 | [61] |
| 光学 | 程函方程 | [62] |
| 土木工程学 | 欧拉-伯努利简支梁模型 | [32] |
| 电力工程学 | 交流潮流方程 | [46] |
| 化学 | 密度泛函理论(DFT) | [22][23] |
| | 分子结构 | [63] |
| | 经验磨损时间模型 | [51] |
| | 泊松方程 | [64] |
| 机械工程学 | 非线性泊松方程 | [61] |
| | 空气动力学方程 | [36] |
| | 轴承退化信息-监测信息关系 | [38] |
| 结构力学 | 线弹性本构方程 | [60] |
| 量子力学 | 薛定谔方程 | [14][15][65] |
| | Klein-Gordon 方程 | [66] |
| 流行病学 | SIRD 模型 | [39] |
| | SVEIDR 模型 | [67] |
| 流行病学 | SEIR 模型 | [68] |
| | SIR 模型 | [68] |
| 能源动力学 | 热平衡方程 | [69] |
| 农业科学 | 作物生长和生产模型 (WFOST) | [53] |
| | Richardson-Richards 方程 | [70] |
| 气象学 | 数值天气预报模型(NWP) | [55] |
| | 平流方程 | [62] |
| | Allen-Cahn 方程 | [14][15][65][71] |
| | Navier-Stokes 方程 | [14][15][33][48][65] |
| | Korteweg-de Vries 方程 | [66][72][73][74] |
| | Hess-Smith 面板法 | [50] |
| 热传导与流体力学 | 两相流动方程 | [61] |
| | 欧拉方程 | [48] |
| | 分数对流扩散方程 | [75] |
| | 广义斯托克斯方程 | [76] |
| | Burgers 方程 | [62][72] |
| | 对流扩散方程 | [73] |
| | Kuramoto-Sivashinsky 方程 | [72] |
| | 反应扩散方程 | [32] |
| | 动量方程 | [56] |
| | 降雨径流机制 | [25] |
| | 能量守恒定律 | [44][49] |
| | 水密度-深度关系 | [29] |
| 水文学 | 非饱和流模型(HYDRUS) | [53] |
| | 水文数值机理模型(WRF-Hydro) | [54] |
| | Stefan 方程 | [45] |
| | 水动力模型 | [67] |
| | 全息问题偏微分方程 | [76] |
| | 分数阶方程 | [72] |
| | 随机微分方程 | [77] |
| | 随机扩散反应方程 | [77] |
| 物理学 | 直接模拟蒙特卡罗方法(DSMC) | [78] |
| | Helmholtz 方程 | [69] |
| | 质量守恒定律 | [59] |
| | 等离子体的欧姆定律 | [37] |
| | 非定常平流扩散方程 | [41] |
| | Grey-Scott 方程 | [71] |
| | Ginzburg-Landau 方程 | [71] |

输出结果,但是其内部机理依然无法解释,本质上由数据驱动的黑盒模型。深度学习模型的运作机理可能出人意料,如Rieger等^[79]在训练用于判断恶性或良性肿瘤斑块的深度学习模型时,发现模型会错误地将数据集中恶性肿瘤旁的彩色标签视为判断恶性肿瘤的重要特征。因此,解释模型运作机理是设计、改进与评价深度学习模型的重要参考。当前,提升深度学习的可解释性是重要的研究课题^[80-82]。

将物理知识与深度模型相结合,通过引导模型重视正确特征、纳入参考理论或数值机理模型建议等方法,能有效地为深度学习模型提供引导使其输出物理知识上一致的结果。Irrgang等^[83]强调了将地球系统模型(earth system models,ESMs)与深度神经网络构造知悉物理规律的混合模型对提升可解释性有重大意义。在交通工程领域中,Zhang等^[84]将起点-终点(origin-destination,OD)需求和入站流量之间的物理量信息纳入深度学习模型,为大流行期间未来OD乘客的演变趋势生成具有物理意义的解释,为应对突发事件期间的交通管理和规划提供了重要的参考。Stoudenmire等^[85]受物理学中成功的密度矩阵重整化群算法启发,将量子启发张量网络应用于多类监督学习任务。在MNIST数据集上的应用表明,这种方法能够实现低于1%的测试集分类错误率,张量网络形式为深度学习模型增添了结构,并提供了生成式解释。Duvenaud等^[63]由分子的客观结构启发,使用GCNN将分子的顶点与键等特征映射为图形形式,并用于总结分子指纹特征。研究人员发现,分子的溶解度的高低与指纹的某些位置密切相关,这些位置可以对应到相应分子中的几个子结构,这些子结构具有共性,并且从理论上与分子的溶解度高低对应着正向或反向的相关性。这些研究表明,将物理知识与深度学习结合的方法不仅提升了深度学习模型的透明度和准确性,还能有效揭示模型的内部机制,从而增强了模型在科学和工程应用中的信任度和实用性。

2.2 求解PDE

偏微分方程PDE指包含未知函数的偏导数(或偏微分)的方程,其中在数学、物理及工程技术中应用最广泛的二阶偏微分方程,也被称为数学物理方程,是极大部分物理知识的表现形式。现如今如谱方法、有限元法、变分迭代法、有限差分法^[86]、无网格法及有限体积法等求解偏微分方程的数值方法为人们计算和预测物理系统提供了巨大帮助。如今已有许多面向不同领域的数值机理模型用于求解PDE,为科研项目提供可靠的模拟效果与数值解。然而基于数值方法的高精度PDE求解往往会面临很大的计算代价,“维度爆炸”问题也使人

们对于大规模PDE求解问题望而却步。

训练好的深度学习模型能以很低的计算代价完成回归任务,对求解PDE有一定应用潜力。目前已有许多团队对基于深度学习的PDE求解方法进行了研究^[87-92],其中利用物理引导的深度学习方法求解PDE是一个重要方向。Raissi等^[65]提出PINN方法将目标PDE变形并定义为损失函数以回归目标PDE的解,并针对连续和离散PDE分别给出了基于物理引导深度学习的正逆向求解方式,对复杂流体动力学问题进行了准确的正向求解预测,误差约0.1%。Pang等^[75]使用整数阶运算符的自动微分和分数阶运算符的数值离散化来构造损失函数中的残差,将PINN扩展到分数阶物理信息神经网络(fractional physics-informed neural networks,fPINN),实现了对时空分数阶对流扩散方程的多维度高精度正向求解,物理信息的融合使精度增加约60%。Lu等^[76]提出具有硬约束的物理信息神经网络(physics-informed neural networks with hard constraints,hPINN)用于解决拓扑优化问题,并证明了其在光学全息问题和斯托克斯流流体问题上的有效性,其 L^2 相对误差<1%。Wang等^[71]提出物理信息残差自适应网络,解决了PINN的病态初始化问题,使其能够稳定有效地扩展以利用深度网络,在多个PDE上证实了其求解性能方面的卓越效果,平均相对 L^2 测试误差低于 10^{-3} 。如今使用物理引导深度学习模型方法求解PDE已成功实用化,如DeepXDE等软件包已为求解PDE提供了解决方案^[93]。

2.3 知识发现

数据对于科学的研究至关重要,研究者们可从数据中总结规律,发现变化,甚至提取出控制方程^[94]。深度学习从数据层面帮助研究者揭示数据规律、发现数据特征甚至控制方程以促进知识发现^[95-97]。

将物理知识与深度学习模型相结合,能帮助实现知识发现。对于大部分的物理问题,基本规律大多以微分方程的形式表现。从观测数据中提取微分方程的未知参数是一种典型的知识发现过程。Raissi等^[65,72]在讨论物理引导的PDE求解方法的过程中,对PDE隐藏参数的知识发现过程进行了探索,成功使用物理引导的深度学习方法寻找到连续Navier-Stokes方程中的未知参数,也成功通过离散时间物理信息神经网络解决了极少量数据下PDE未知参数的反演问题,其误差在0.09%内。进一步,该团队使用依赖高斯过程的框架实现线性微分方程的参数挖掘,通过推断函数概率使对于小数据的知识发现过程更为有效,其反演误差不超过2.8%,并表现出良好的抗噪性能。Zhang等^[77]将不确定性分析与物理信息神经网络进行结合,在正向与逆向求解问题上均

有效对微分方程随机参数进行挖掘,相对 L_2 误差可达 1% 以下。Zhang 等^[78]将直接模拟蒙特卡罗方法与机器学习模型相结合,构建混合物理引导模型,成功推导出了流体力学中的多个重要方程。

除了对微分方程进行参数挖掘,知识发现过程也能为研究者定性或定量地提供具体领域知识与经验。类似的方法也用于实现预测 3D 分子结构^[98]。Ke 等^[67]利用 SVEIDR 病毒传播模型指导神经网络的构建,该模型考虑了疫苗接种状况等因素,包括易感者(susceptible, S)、疫苗接种者(vaccinated, V)、暴露者(exposed, E)、感染者(infected, I)、诊断者(diagnosed, D)和康复者(recovered, R)。该研究旨在探索新型冠状病毒的传播模式。所提出的物理引导模型有效预测了感染曲线的变化,所有相对均方根误差(relative root mean square error, RRMSE)均小于 4%,对感染人数的预测准确率达到了 95%。Fraehr 等^[99]利用混合模型实现了洪水水位的预测,与其他基准模型相比,混合模型在峰值水位预测上的平均差异最小,其值接近于 0 米左右,表明模型在水位预测中没有显著的高估或低估偏差,为制定更科学的洪涝防护策略提供了有力支持。Dandekar 等^[68]将隔离措施状况等信息作为物理约束指导神经网络,结果表明实施强有力的公共卫生检疫和隔离措施可防止病毒有效繁殖数 R_t 的指数级增长。该类方法还能在计算机硬件领域为研究者生成可靠的错误预测机制^[100],为有序与混沌力学系统的演化研究提供预测方法^[11,101]。

2.4 数据生成

数据在科学研究中起着至关重要的作用,尤其对于数据驱动的深度学习方法而言,数据的质量和数量更加重要。优质的数据能够很好地反映研究对象的内在规律,是发现或验证理论的必要条件,也是深度学习模型训练的基础。然而,数据的获取通常需要耗费大量时间和人力成本,涉及到统计整理大量的人工采集数据或传感器收集的数据。因此,如何以高效且低成本的方式获取优质数据成为一个非常重要的问题。

利用深度学习模型低成本生成数据是一个可能的解决方案,然而深度学习模型生成的数据往往缺乏理论支撑,缺乏与现实物理规律的一致性。物理信息引导的深度学习模型能有效改善这个问题,通过物理知识约束使深度学习模型内化物理规律,保证物理一致性并赋予更好的可解释性。例如 Gauding 等^[73]基于超分辨率生成对抗网络,结合物理引导损失函数通过无监督深度学习进行训练,从粗颗粒度数据(例如大涡模拟(large eddy simulation, LES))中重建完全解析的湍流场并具有较好的精度。Yao 等^[22]提出了一种物理引导的混合模型以

解决传统力场无法进行化学过程模拟的问题。该模型支持各种常见化学模拟类型,可以低计算代价进行上万原子的模拟并生成可靠的分子模拟数据。Feng 等^[102]提出了基于物理的深度学习级联损失模型,在压气机设计中表现出良好的性能,并给出了叶栅流场的局部描述,实现了高精度的二维流场数据生成。这些研究表明,物理信息引导的深度学习模型可以在数据生成过程中兼顾效率和物理一致性,为解决数据获取成本高的问题提供了一种可行的解决方案。

2.5 参数反演

一些关键的物理参数对于描述系统的状态演化非常重要,因此获取这些参数是非常必要的。然而,在实际研究中,研究者往往难以直接获取系统的关键参数或特征,这时参数反演可以帮助研究者获取所关注的参数和输入特征。

由于深度学习方法具有优秀的非线性逼近能力,它在参数反演任务中具有很好的适用性。此外,将已知的物理知识嵌入深度学习模型中,可以有效地帮助深度学习模型学习物理系统的潜在知识,并约束模型按照给定的物理规律产生结果。在水文学领域,Wang 等^[27]提出了基于地质统计信息约束的 TgNN-geo 模型,用于反演地下水渗流系统的导水率场。TgNN-geo 模型引入了两个神经网络,分别用于逼近随机模型参数和导水率场解,通过加入导水率场的地质先验统计信息,TgNN-geo 模型能够在空间测量稀疏或先验统计不精确的情况下进行直接反演。该研究团队还提出了基于卷积神经网络的物理引导自动编码器(TgAE)^[58],TgAE 通过对控制方程进行有限差分离散化,并将其作为损失函数嵌入到 CNN 的训练中,实现了水利传导率场的准确反演(RMSE=0.259),且不确定性显著降低。Kalajahi 等^[59]使用类似方法测试了多种物理引导神经网络架构,在使用相对较小的输入数据集训练时,仍能在估计介质的渗透率和孔隙度等方面实现显著的准确性。Bandai 等^[70]提出了一个由三个连接的前馈神经网络组成的 PINN 框架,成功地在无需初始条件和边界条件的情况下反演了 Richardson-Richards 方程的关键参数,与现有方法相比相对误差降低了三个数量级。Xu 等^[60]使用物理引导神经网络对粘弹性材料进行参数反演,仅利用有限位移数据进行粘弹性反演建模就能较准确地恢复空间变化的地下粘度参数,还在另一项研究中阐明具有物理约束信息的数据驱动繁衍模型在相对刚性的问题上具有更快的收敛性和更好的稳定性^[61]。Hong 等^[69]将物理引导模型与传感器数据结合,成功反演了建筑的区域空气渗透速率和区域内部热质量两个关键参数很大程度提高仿

真精度,从而有助于解决现有建筑改造节能估算的挑战。在地质学领域中,Biswas等^[57]基于波传播物理学计算中间物理参数构造物理引导模型,与传统的机器学习方法相比,降低了对标记数据集的需求且在解决地震反演问题上取得了很好的效果。这些研究表明物理引导深度学习模型结合物理知识的约束提升了参数估算的准确性,在处理反演任务时展现出广泛的应用潜力。

3 挑战与展望

物理引导方法在深度学习模型中引入了物理机制,在许多应用场景中取得了优异的效果。然而,在研究实践中,仍然存在一些领域内共同的困难与挑战。本章将总结一些物理引导方法存在的研究痛点,回顾了相关研究者为解决这些问题所采取的举措,对该领域未来的发展方向进行了展望。

3.1 计算复杂性与优化收敛问题

在传统深度学习领域,单一损失函数的应用基于严谨的数学推导,以确保模型在独立解空间内实现有效收敛^[103]。在这种框架下,深度学习模型能够根据设定的优化策略,在有限的时间和计算资源条件下,有效地找到预期的最优解。然而,在物理引导深度学习的应用中,通常采用物理引导的损失函数作为模型构建的主要方法,从而引入新的数学组件。由于多个损失函数的组合,模型面临多个独立解空间的挑战,进而形成一个包含多个局部最优解的复合解空间。这种解空间的重叠和相互作用显著增加了寻找全局最优解的计算复杂性,导致模型优化目标的模糊性,面临多目标优化的问题。这可能导致梯度下降过程陷入极限环或发散,从而影响模型优化的效率和稳定性。目前,对这种正则化机制的影响仍然不完全清楚,在某些情况下可能导致不稳定和错误的预测^[66]。

为缓解优化困难,尝试探索适当的损失函数权重是一种有潜力的研究方向。Wang等^[66]通过研究物理引导深度学习模型的收敛性能和训练失败案例,提出了学习率退火方法,利用梯度统计来平衡复合损失函数中不同项之间的相互作用,并在一系列的问题上将其预测准确性提高了50~100倍。同时,该团队从神经正切核(neural tangent kernel, NTK)的视角出发,推导出了PINN的NTK并证明了其收敛性。利用NTK的特征值来自适应地平衡各项损失函数的权重,可以在一定程度上优化PINN在多项优化状态下的训练效果^[64],将预测解和精确解的相对 L_2 误差降低了两个数量级。然而,该类方法是基于对优化失败案例模式的分析所启发的基于统计的经验方法,虽然优化了训练效果但对于核心的多项优化问

题尚无解决方案。如何从根本上解决这一难题仍需要更多研究者持续深入的工作,即对深度学习模型的构建方式和优化算法进行更深层次的探索和改进,为物理引导深度学习方法的进一步发展提供更可靠的解决方案。

3.2 控制方程偏离问题

当主导物理引导深度学习框架的控制方程具有高阶导数或解具有强不连续性时,简单的物理引导损失函数方法只能在平均值上满足控制方程的解。这导致难以保证每一个预测点都满足既定的物理约束,在庞大的解空间中寻找控制方程的特解变得困难。因此,如何高效地保证控制方程的严格满足是一个待解决的问题。

为缓解上述问题,有研究者尝试将损失函数的构造形式由整体聚焦于局部。例如,Xu等^[24]采用了区域积分的方法,将偏微分方程的弱形式应用于深度学习模型中,一定程度上缓解了当偏微分方程含有高阶导数或解具有间断时损失函数精度下降的问题。同时,该团队还尝试了硬约束的方法,通过投影法和输出优化手段限制偏微分方程的解空间,引导模型向符合偏微分方程解的方向收敛^[73]。然而,该类方法只能保证观测点周围区域的预测结果符合物理约束,而不能保证整体的解均满足控制方程。在处理高度复杂的物理现象时,这些方法的有效性和泛化能力仍有待验证。因此,如何更好地全面解决这个问题仍然需要进一步的研究。

3.3 观测数据依赖问题

目前,在控制方程约束的物理引导深度学习框架中,仍然需要部分观测数据来确定控制方程的定解条件。这意味着仍需要数值机理模型或实际观测数据对物理引导深度学习模型提供必要的数据支持,限制了其应用的灵活性。

有研究者尝试使用深度学习来寻找控制方程的算子而非函数。通过寻找控制方程对应的潜在解的解算子,尝试实现深度学习模型在没有配对输入输出训练数据的情况下快速预测偏微分方程的解。如Wang等^[62]引入了基于物理的DeepONets网络(一种算子学习架构)在无标签数据下实现预测偏微分方程的解并将优化速度提高了三个数量级。对控制方程定解条件进行更强制的约束也是可能的解决方案,如Sun等^[74]对Navier-Stokes方程的初始与边界条件进行强制约束,在无模拟数据的情况下完成了对流体流动系统的代理建模。然而当前无观测数据的方法尚在起步阶段,模型的成功运行往往以高难度的训练过程为代价且只能解决简单问题。无监督方法在处理基于更复杂的物理公式的实际问题时无法胜任,如对于非稳态与源汇问题^[104],仍无合适的解决方案,这也是未来研究的一个开放方向。

3.4 知识融合困难问题

要成功地将物理知识与深度学习模型有机结合,研究者需要同时熟悉深度学习领域和研究领域的物理知识。他们需要在特定领域中准确有效地运用适当的物理知识并将其与深度学习模型相匹配,这对于领域物理知识专家和深度学习研究者来说都是一个重要课题。

为了更有效地应用物理引导深度学习这种融合方法,学科之间的知识和信息交流至关重要。领域知识专家和深度学习研究者之间的互助合作可以促使更多领域知识被应用于物理引导深度学习,并克服技术难题。物理引导深度学习方法可以成为推动学科交流与学习的契机,吸引更多学者参与跨学科学习与交流,并利用跨学科混合方法的优势为各自领域带来新的贡献。然而,当前的教育和研究框架可能尚未完全适应这种跨学科知识融合的需求。因此,未来可能需要发展新的教育模式和合作框架,以更好地促进和支持这种跨学科的知识交流和合作。通过这些新的方法,可以更有效地培养具有多学科背景和技能的研究者,从而推动物理引导深度学习等领域的进一步发展。

4 总结

本文全面总结了物理引导深度学习的方法论与研究进展,详尽介绍了信息融合与组合两大类方法,并分析了子方法的机制、特点、局限性及适用场景。此外,文章还重点讨论了这些方法在多学科领域的应用及其独特优势和有效性。尽管物理引导深度学习在实际使用中已展现出成效,但仍存在未解决的问题,展现出广阔的研究前景。未来可围绕这些未解决的问题进行多学科领域合作,以推动该领域的进一步发展。总体而言,物理引导的深度学习为深度学习领域带来了新的思路和挑战,同时也为跨学科知识融合提供了新的契机,有待多学科研究者进一步深入研究。

参考文献:

- [1] 邓仲华,李志芳. 科学研究范式的演化:大数据时代的科学研究第四范式[J]. 情报资料工作, 2013, 34(4): 19-23.
DENG Z H, LI Z F. The evolution of scientific research paradigm: the fourth paradigm of scientific research in the era of big data[J]. Information and Documentation Services, 2013, 34(4): 19-23.
- [2] TOLLE K M, TANSLEY D S W, HEY A J G. The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery[J]. Proceedings of the IEEE, 2011, 99(8): 1334-1337.
- [3] 曾和义. 网格质量对数值模拟的影响[C]//中国核学会2009年学术年会论文集. 北京: 原子能出版社, 2009: 235-239.
ZENG H Y. On the influences of mesh quality upon numerical simulation[C]//Proceedings of the 2009 Academic Annual Conference of the Chinese Nuclear Society. Beijing: Atomic Energy Press, 2009: 235-239.
- [4] 余凯,贾磊,陈雨强,等. 深度学习的昨天、今天和明天[J]. 计算机研究与发展, 2013, 50(9): 1799-1804.
YU K, JIA L, CHEN Y Q, et al. Deep learning: yesterday, today, and tomorrow[J]. Journal of Computer Research and Development, 2013, 50(9): 1799-1804.
- [5] HINTON G E, SALAKHUTDINOV R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks[J]. Science, 2006, 313(5786): 504-507.
- [6] LEWICKI G, MARINO G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function[J]. Zeitschrift Fur Analysis Und Ihre Anwendungen, 2003, 22(2): 463-470.
- [7] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks [J]. Communications of the ACM, 2017, 60(6): 84-90.
- [8] WAN Z Y, VLACHAS P, KOUOUTSAKOS P, et al. Data-assisted reduced-order modeling of extreme events in complex dynamical systems[J]. PLoS One, 2018, 13(5): e0197704.
- [9] 牛程程,李少波,胡建军,等. 机器学习在材料信息学中的应用综述[J]. 材料导报, 2020, 34(23): 23100-23108.
NIU C C, LI S B, HU J J, et al. Application of machine learning in material informatics: a survey[J]. Materials Reports, 2020, 34(23): 23100-23108.
- [10] MAXWELL R M, CONDON L E, MELCHIOR P. A physics-informed, machine learning emulator of a 2D surface water model: what temporal networks and simulation-based inference can help us learn about hydrologic processes[J]. Water, 2021, 13(24): 3633.
- [11] CHOUDHARY A, LINDNER J F, HOLLIDAY E G, et al. Physics-enhanced neural networks learn order and chaos[J]. Physical Review E, 2020, 101(6): 062207.
- [12] COHEN T S, GEIGER M, KOEHLER J, et al. Spherical CNNs[EB/OL]. [2024-07-10]. <https://arxiv.org/abs/1801.10130>.
- [13] THOMPSON M L, KRAMER M A. Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks[J]. AIChE Journal, 1994, 40(8): 1328-1340.
- [14] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed deep learning (part II): data-driven discovery of nonlinear partial differential equations[EB/OL]. [2024-07-10]. <https://arxiv.org/abs/1711.10566>.
- [15] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed deep learning (part I): data-driven solutions of

- nonlinear partial differential equations[EB/OL]. [2024-07-10]. <https://arxiv.org/abs/1711.10561>.
- [16] WILLARD J, JIA X W, XU S M, et al. Integrating scientific knowledge with machine learning for engineering and environmental systems[J]. ACM Computing Surveys, 2022, 55(4): 1-37.
- [17] VON RUEDEN L, MAYER S, BECKH K, et al. Informed machine learning — a taxonomy and survey of integrating prior knowledge into learning systems[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(1): 614-633.
- [18] KARPATNE A, ATLURI G, FAGHMOUS J H, et al. Theory-guided data science: a new paradigm for scientific discovery from data[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2017, 29(10): 2318-2331.
- [19] KARNIADAKIS G E, KEVREKIDIS I G, LU L, et al. Physics-informed machine learning[J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3: 422-440.
- [20] DE PAUL ADOMBI A V, CHESNAUX R, BOUCHER M A. Review: theory-guided machine learning applied to hydrogeology: state of the art, opportunities and future challenges[J]. Hydrogeology Journal, 2021, 29(8): 2671-2683.
- [21] YU Y, YAO H P, LIU Y M. Structural dynamics simulation using a novel physics-guided machine learning method[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2020, 96: 103947.
- [22] YAO K, HERR J E, TOTH D W, et al. The TensorMol-0.1 model chemistry: a neural network augmented with long-range physics[J]. Chemical Science, 2018, 9(8): 2261-2269.
- [23] HAUTIER G, FISCHER C C, JAIN A, et al. Finding nature's missing ternary oxide compounds using machine learning and density functional theory[J]. Chemistry of Materials, 2010, 22(12): 3762-3767.
- [24] XU R, ZHANG D X, RONG M, et al. Weak form theory-guided neural network (TgNN-wf) for deep learning of subsurface single- and two-phase flow[J]. Journal of Computational Physics, 2021, 436: 110318.
- [25] XIE K, LIU P, ZHANG J Y, et al. Physics-guided deep learning for rainfall-runoff modeling by considering extreme events and monotonic relationships[J]. Journal of Hydrology, 2021, 603: 127043.
- [26] WANG N Z, ZHANG D X, CHANG H B, et al. Deep learning of subsurface flow via theory-guided neural network[J]. Journal of Hydrology, 2020, 584: 124700.
- [27] WANG N Z, CHANG H B, ZHANG D X. Deep-learning-based inverse modeling approaches: a subsurface flow example[J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2021, 126(2): e2020JB020549.
- [28] READ J S, JIA X W, WILLARD J, et al. Process-guided deep learning predictions of lake water temperature[J]. Water Resources Research, 2019, 55(11): 9173-9190.
- [29] DAW A, KARPATNE A, WATKINS W D, et al. Physics-guided neural networks (PGNN): an application in lake temperature modeling[M]//Knowledge-guided machine learning. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2022: 353-372.
- [30] JIA X W, ZWART J, SADLER J, et al. Physics-guided recurrent graph model for predicting flow and temperature in river networks[C]//Proceedings of the 2021 SIAM International Conference on Data Mining. Philadelphia: SIAM, 2021: 612-620.
- [31] KHANDELWAL A, MITHAL V, KUMAR V. Post classification label refinement using implicit ordering constraint among data instances[C]//Proceedings of the 2015 IEEE International Conference on Data Mining. Piscataway: IEEE, 2015: 799-804.
- [32] YIN X F, HUANG Z, LIU Y. Bridge damage identification under the moving vehicle loads based on the method of physics-guided deep neural networks[J]. Mechanical Systems and Signal Processing, 2023, 190: 110123.
- [33] KASHEFI A, REMPE D, GUIBAS L J. A point-cloud deep learning framework for prediction of fluid flow fields on irregular geometries[J]. Physics of Fluids, 2021, 33(2): 027104.
- [34] KHANDELWAL A, KARPATNE A, MARLIER M E, et al. An approach for global monitoring of surface water extent variations in reservoirs using MODIS data[J]. Remote Sensing of Environment, 2017, 202: 113-128.
- [35] CHEN Y T, HUANG D, ZHANG D X, et al. Theory-guided hard constraint projection (HCP): a knowledge-based data-driven scientific machine learning method[J]. Journal of Computational Physics, 2021, 445: 110624.
- [36] WADA K, SUZUKI K, YONEKURA K. Physics-guided training of GAN to improve accuracy in airfoil design synthesis[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2024, 421: 116746.
- [37] JOHNSON R, FILALI BOUBRAHIMI S, BAHRI O, et al. Combining empirical and physics-based models for solar wind prediction[J]. Universe, 2024, 10(5): 191.
- [38] LU W J, WANG Y, ZHANG M Q, et al. Physics guided neural network: remaining useful life prediction of rolling bearings using long short-term memory network through dynamic weighting of degradation process[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2024, 127: 107350.
- [39] MAGRI L, DOAN N. First-principles machine learning modelling of COVID-19[EB/OL]. [2024-07-10]. <https://arxiv.org/abs/2004.09478>.

- [40] XIE Y C, CHI H H, WANG Y H, et al. Physics-specialized neural network with hard constraints for solving multi-material diffusion problems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2024, 430: 117223.
- [41] LI X A, DENG J X, WU J R, et al. Physical informed neural networks with soft and hard boundary constraints for solving advection-diffusion equations using Fourier expansions[J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2024, 159: 60-75.
- [42] MCCULLOCH W S, PITTS W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity[J]. *Bulletin of Mathematical Biology*, 1990, 52(1/2): 99-115.
- [43] GREFF K, SRIVASTAVA R K, KOUTNÍK J, et al. LSTM: a search space odyssey[J]. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2016, 28(10): 2222-2232.
- [44] JIA X W, WILLARD J, KARPATNE A, et al. Physics-guided machine learning for scientific discovery: an application in simulating lake temperature profiles[J]. *ACM/IMS Transactions on Data Science*, 2021, 2(3): 1-26.
- [45] ZHONG L J, LEI H M, GAO B. Developing a physics-informed deep learning model to simulate runoff response to climate change in alpine catchments[J]. *Water Resources Research*, 2023, 59(6): e2022WR034118.
- [46] GAO M S, YU J, YANG Z F, et al. A physics-guided graph convolution neural network for optimal power flow[J]. *IEEE Transactions on Power Systems*, 2023, 39(1): 380-390.
- [47] JIANG C, KASHINATH K, PRABHAT, et al. Enforcing physical constraints in CNNs through differentiable PDE layer[C]//Proceedings of the ICLR 2020 Workshop on Integration of Deep Neural Models and Differential Equations, 2020.
- [48] HARADA K, RAJARAM D, MAVRIS D N. Application of transfer learning for multi-fidelity regression using physics-informed neural network on an airfoil[C]//Proceedings of the AIAA SCITECH 2022 Forum. Reston: AIAA, 2022: 0386.
- [49] CHEN S Y, KALANAT N, XIE Y Q, et al. Physics-guided machine learning from simulated data with different physical parameters[J]. *Knowledge and Information Systems*, 2023, 65(8): 3223-3250.
- [50] PAWAR S, SAN O, AKSOYLU B, et al. Physics guided machine learning using simplified theories[J]. *Physics of Fluids*, 2021, 33(1): 011701.
- [51] HANACHI H, YU W N, KIM I Y, et al. Hybrid data-driven physics-based model fusion framework for tool wear prediction[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2019, 101(9): 2861-2872.
- [52] XU X B, LIU C. Physics-guided deep learning for damage detection in CFRP composite structures[J]. *Composite Structures*, 2024, 331: 117889.
- [53] CHEN C, ZHANG H, SHI W X, et al. A novel paradigm for integrating physics-based numerical and machine learning models: a case study of eco-hydrological model[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2023, 163: 105669.
- [54] CHO K, KIM Y. Improving streamflow prediction in the WRF-Hydro model with LSTM networks[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 605: 127297.
- [55] LI W T, PAN B X, XIA J J, et al. Convolutional neural network-based statistical post-processing of ensemble precipitation forecasts[J]. *Journal of Hydrology*, 2022, 605: 127301.
- [56] JEON J, LEE J, VINUESA R, et al. Residual-based physics-informed transfer learning: a hybrid method for accelerating long-term CFD simulations via deep learning[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024, 220: 124900.
- [57] BISWAS R, SEN M K, DAS V, et al. Prestack and poststack inversion using a physics-guided convolutional neural network[J]. *Interpretation*, 2019, 7(3): SE161-SE174.
- [58] WANG N Z, CHANG H B, ZHANG D X. Theory-guided auto-encoder for surrogate construction and inverse modeling[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 385: 114037.
- [59] KALAJAHI A P, PEREZ-RAYA I, D' SOUZA R M. Physics informed deep neural net inverse modeling for estimating model parameters in permeable porous media flows[J]. *Journal of Fluids Engineering*, 2022, 144(6): 061102.
- [60] XU K L, TARTAKOVSKY A M, BURGHARDT J, et al. Learning viscoelasticity models from indirect data using deep neural networks[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 387: 114124.
- [61] XU K L, DARVE E. Physics constrained learning for data-driven inverse modeling from sparse observations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 453: 110938.
- [62] WANG S F, WANG H W, PERDIKARIS P. Learning the solution operator of parametric partial differential equations with physics-informed DeepONets[J]. *Science Advances*, 2021, 7(40): eabi8605.
- [63] DUVENAUD D, MACLAURIN D, AGUILERA-IPARAGUIRRE J, et al. Convolutional networks on graphs for learning molecular fingerprints[C]//Proceedings of the 29th International Conference on Neural Information Processing Systems - Volume 2. New York: ACM, 2015: 2224-2232.
- [64] WANG S F, YU X L, PERDIKARIS P. When and why PINNs fail to train: a neural tangent kernel perspective[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 449: 110768.
- [65] 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.
- [66] WANG S F, TENG Y J, PERDIKARIS P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2021, 43(5): A3055-A3081.
- [67] KE J H, MA J H, YIN X Y. Simulation and application of COVID-19 compartment model using physic-informed neural network[EB/OL]. [2024-07-10]. <https://arxiv.org/abs/2208.02433>.
- [68] DANDEKAR R, BARBASTATHIS G. Quantifying the effect of quarantine control in Covid-19 infectious spread using machine learning[J]. *medRxiv*, 2020, 6: 1-13.
- [69] HONG T Z, LEE S H. Integrating physics-based models with sensor data: an inverse modeling approach[J]. *Building and Environment*, 2019, 154: 23-31.
- [70] BANDAI T, GHEZZEHEI T A. Physics-informed neural networks with monotonicity constraints for Richardson-Richards equation: estimation of constitutive relationships and soil water flux density from volumetric water content measurements[J]. *Water Resources Research*, 2021, 57(2): e2020WR027642.
- [71] WANG S F, LI B W, CHEN Y H, et al. PirateNets: physics-informed deep learning with residual adaptive networks[EB/OL]. [2024-08-10]. <https://arxiv.org/abs/2402.00326>.
- [72] RAISSI M, KARNIADAKIS G E. Hidden physics models: machine learning of nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 357: 125-141.
- [73] GAUDING M, BODE M. Using physics-informed enhanced super-resolution generative adversarial networks to reconstruct mixture fraction statistics of turbulent jet flows[C]// *Proceedings of the 35th International ISC High Performance Conference*. Cham: Springer, 2021:138-153.
- [74] SUN L N, GAO H, PAN S W, et al. Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 361: 112732.
- [75] PANG G F, LU L, KARNIADAKIS G E. fPINNs: fractional physics-informed neural networks[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2019, 41(4): A2603-A2626.
- [76] LU L, PESTOURIE R, YAO W J, et al. Physics-informed neural networks with hard constraints for inverse design[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2021, 43(6): B1105-B1132.
- [77] ZHANG D K, LU L, GUO L, et al. Quantifying total uncertainty in physics-informed neural networks for solving forward and inverse stochastic problems[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 397: 108850.
- [78] ZHANG J, MA W J. Data-driven discovery of governing equations for fluid dynamics based on molecular simulation [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, 892: A5.
- [79] RIEGER L, SINGH C, MURDOCH W, et al. Interpretations are useful: penalizing explanations to align neural networks with prior knowledge[C]// *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*. New York: ACM, 2020: 8116-8126.
- [80] ZHANG Q S, ZHU S C. Visual interpretability for deep learning: a survey[J]. *Frontiers of Information Technology & Electronic Engineering*, 2018, 19(1): 27-39.
- [81] GUERRERO-GÓMEZ-OLMEDO R, SALMERON J L, KUCHKOVSKY C. LRP-based path relevances for global explanation of deep architectures[J]. *Neurocomputing*, 2020, 381: 252-260.
- [82] SUN J M, BINDER A. Generalized PatternAttribution for neural networks with sigmoid activations[C]// *Proceedings of the 2019 International Joint Conference on Neural Networks*. Piscataway: IEEE, 2019: 1-9.
- [83] IRRGANG C, BOERS N, SONNEWALD M, et al. Towards neural earth system modelling by integrating artificial intelligence in earth system science[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2021, 3: 667-674.
- [84] ZHANG S X, ZHANG J L, YANG L X, et al. Physics guided deep learning-based model for short-term origin - destination demand prediction in urban rail transit systems under pandemic[J]. *Engineering*, 2024, 41: 276-296.
- [85] STOUDENMIRE E, SCHWAB D. Supervised learning with quantum-inspired tensor networks[C]// *Advances in Neural Information Processing Systems* 28, 2016: 4806-4814.
- [86] SMITH G D. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*[M]. Oxford: Oxford University Press, 1985.
- [87] GREENFELD D, GALUN M, KIMMEL R, et al. Learning to optimize multigrid PDE solvers[C]// *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning*. San Diego: JMLR, 2019.
- [88] 曹富军, 郭晓斌, 高飞, 等. 求解偏微分方程的卷积迭代方法[J]. *山西大学学报(自然科学版)*, 2023, 46(2): 293-303.
- CAO F J, GUO X B, GAO F, et al. The convolutional iterative method for solving partial differential equation[J]. *Journal of Shanxi University (Natural Science Edition)*, 2023, 46(2): 293-303.
- [89] HOLL P, KOLTUN V, UM K, et al. phiflow: a differentiable PDE solving framework for deep learning via physical simulations[C]// *Proceedings of the NeurIPS Workshop*. Cambridge: MIT Press, 2020.

- [90] SIRIGNANO J, SPILIOPOULOS K. DGM: a deep learning algorithm for solving partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 375: 1339-1364.
- [91] DISSANAYAKE M W M G, PHAN-THIEN N. Neural-network-based approximations for solving partial differential equations[J]. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 1994, 10(3): 195-201.
- [92] LONG Z C, LU Y P, MA X Z, et al. PDE-Net: learning PDEs from data[C]//Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning. New York: PMLR, 2018: 3208-3216.
- [93] LU L, MENG X H, MAO Z P, et al. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations[J]. *SIAM Review*, 2021, 63(1): 208-228.
- [94] RUDY S H, BRUNTON S L, PROCTOR J L, et al. Data-driven discovery of partial differential equations[J]. *Science Advances*, 2017, 3(4): e1602614.
- [95] LUAN L L, LIU Y, SUN H. Distilling governing laws and source input for dynamical systems from videos[C]//Proceedings of the 31st International Joint Conference on Artificial Intelligence. Vienna: IJCAI Organization, 2022: 3898-3904.
- [96] CHEN B Y, HUANG K, RAGHUPATHI S, et al. Automated discovery of fundamental variables hidden in experimental data[J]. *Nature Computational Science*, 2022, 2(7): 433-442.
- [97] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Machine learning of linear differential equations using Gaussian processes[J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, 348: 683-693.
- [98] CHO Y, KIM S, LI P P, et al. Physics-guided reinforcement learning for 3D molecular structures[C]//Proceedings of the Workshop at the 33rd Conference on Neural Information Processing Systems. Cambridge: MIT Press, 2019.
- [99] FRAEHR N, WANG Q J, WU W Y, et al. Assessment of surrogate models for flood inundation: the physics-guided LSG model vs. state-of-the-art machine learning models[J]. *Water Research*, 2024, 252: 121202.
- [100] BASEMAN E, DEBARDELEBEN N, BLANCHARD S, et al. Physics-informed machine learning for DRAM error modeling[C]//Proceedings of the 2018 IEEE International Symposium on Defect and Fault Tolerance in VLSI and Nanotechnology Systems. Piscataway: IEEE, 2018: 1-6.
- [101] DOAN N A K, POLIFKE W, MAGRI L. Physics-informed echo state networks for chaotic systems forecasting[C]//Proceedings of the 19th Annual International Conference on Computational Science. Cham: Springer, 2019: 192-198.
- [102] FENG Y Y, SONG X Z, YUAN W, et al. Physics-informed deep learning cascade loss model[J]. *Aerospace Science and Technology*, 2023, 134: 108165.
- [103] HINTON G E. How neural networks learn from experience[J]. *Scientific American*, 1992, 267(3): 144-151.
- [104] 查文舒, 李道伦, 沈路航, 等. 基于神经网络的偏微分方程求解方法研究综述[J]. *力学学报*, 2022, 54(3): 543-556.
- ZHA W S, LI D L, SHEN L H, et al. Review of neural network-based methods for solving partial differential equations[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2022, 54(3): 543-556.



陈冲(1987—),男,河北衡水人,博士,副教授,CCF会员,主要研究方向为机器学习、信息融合、机器学习可解释等。

CHEN Chong, born in 1987, Ph.D., associate professor, CCF member. His research interests include machine learning, information fusion, machine learning interpretability, etc.



朱啸宇(1998—),男,江苏苏州人,硕士,主要研究方向为物理引导深度学习。

ZHU Xiaoyu, born in 1998, M.S. His research interest is physics-guided deep learning.



王芳(1999—),女,河南信阳人,硕士,主要研究方向为物理引导深度学习。

WANG Fang, born in 1999, M.S. Her research interest is physics-guided deep learning.



许雅倩(1998—),女,山东滨州人,硕士,主要研究方向为物理引导深度学习。

XU Yaqian, born in 1998, M.S. Her research interest is physics-guided deep learning.



张伟(1983—),男,河南南阳人,博士,副研究员,主要研究方向为水文水资源观测与模拟等。

ZHANG Wei, born in 1983, Ph.D., associate research fellow. His research interests include hydrological and water resources observation and simulation, etc.