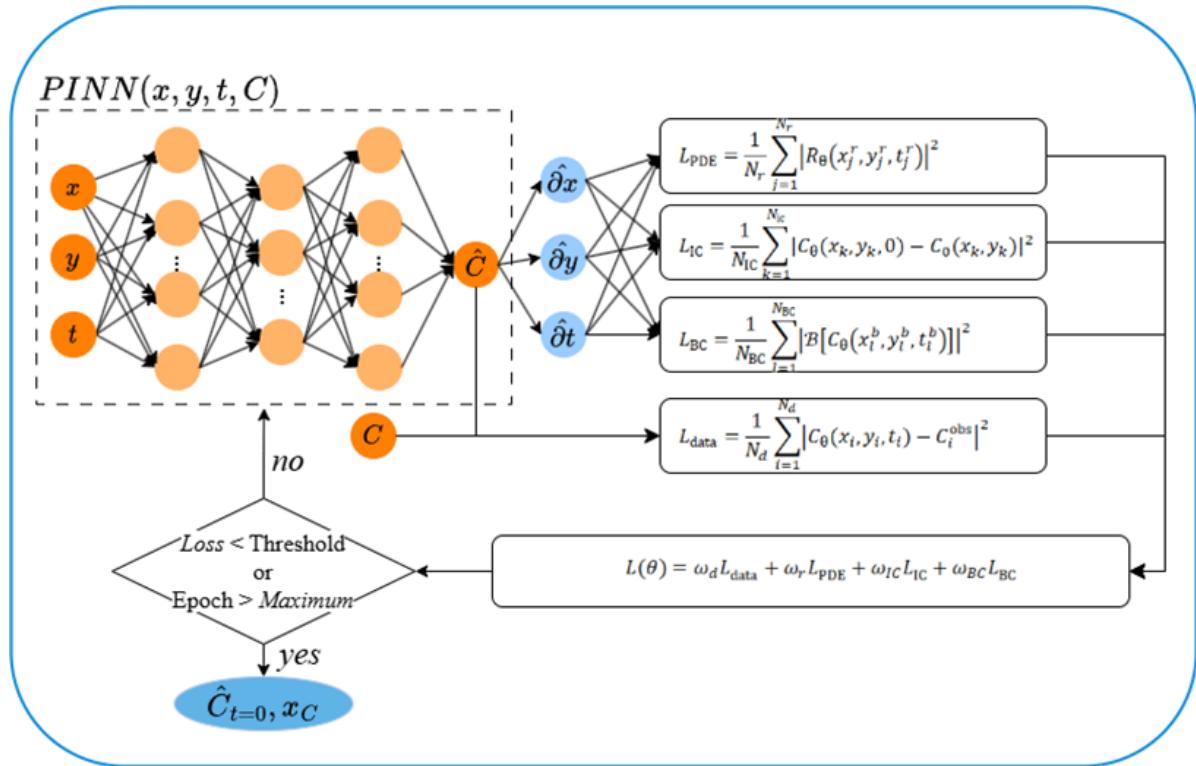


a) 物理驱动的地下水污染溯源方法

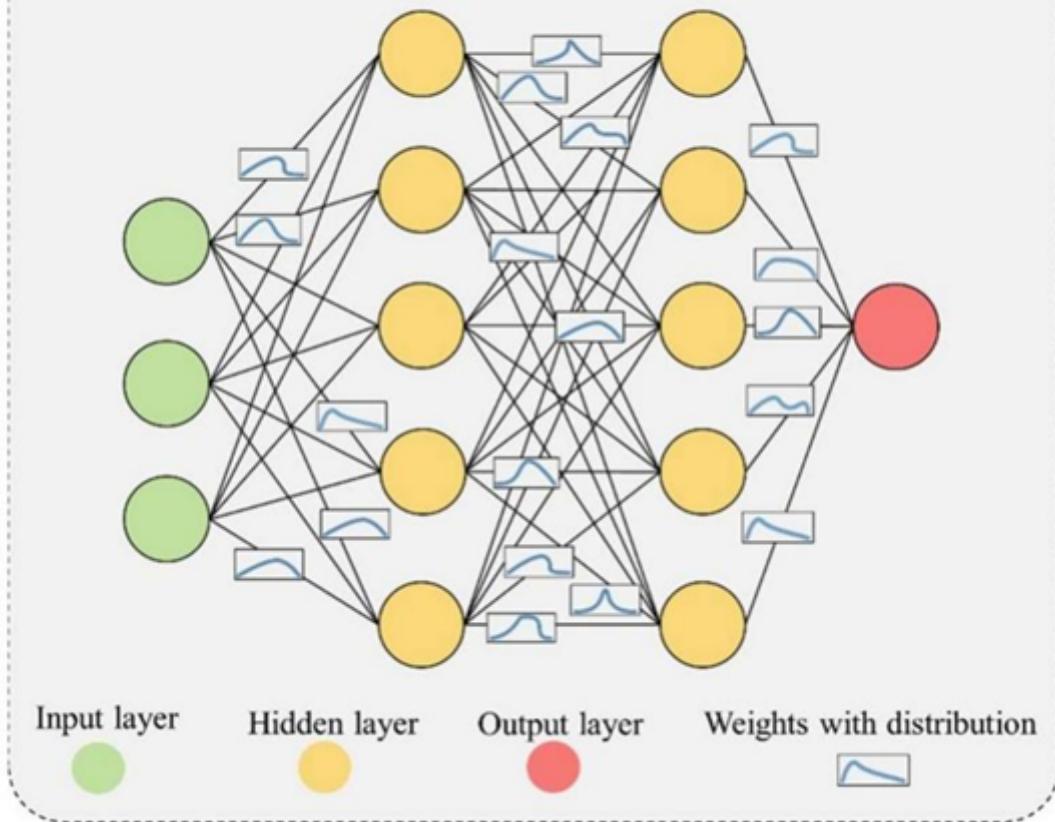
PINN神经网络结构：



PINN 在一组训练点上训练神经网络模型，使其满足模型的要求。通过将损失函数与偏微分方程的残差、初始条件 (IC) 和边界条件 (BC) 相结合，PINN 无需使用任何其他模型或模拟即可获得偏微分方程的解。

贝叶斯神经网络结构：

Bayesian Neural Network



BNN跟常见的深度神经网络的不同之处在于，其权重参数是随机变量，而非确定的值，它是通过概率建模和神经网络结合起来，并能够给出预测结果的置信度。其先验用来描述关键参数，并作为神经网络的输入。神经网络的输出用来描述特定的概率分布的似然。通过采样或者变分推断来计算后验分布。这对于很多问题来说非常关键，由于BNN具有不确定性量化能力，所以具有非常强的鲁棒性。

理论分析：

对流扩散方程：

对流扩散方程 (Advection-Dispersion Equation, ADE) 是一种经典的抛物型偏微分方程，用以描述物质在流体介质中同时受到对流与扩散作用下的传输过程，其理论基础来源于连续性方程、Fick 第一定律与对流通量的耦合。在环境科学与水文地质领域，ADE 构成了地下水污染输运与溯源模型的核心框架，大量研究将其用于预测溶质在含水层中的迁移路径、评估污染风险及指导修复工程设计。此外，ADE 在海洋学、大气科学、化工过程模拟及热传导等领域也有广泛应用，数值求解方法涵盖有限差分、有限元、谱方法和格子 Boltzmann 方法等，对提高环境预测精度和工程决策效率具有重要意义。

在二维直角坐标系 (x, y) 中，设溶质浓度场为 $C(x, y, t)$ 、孔隙水线速度为 $v = (v_x, v_y)$ 、分散系数张量为：

$$D(x) = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix} \quad (1)$$

并令 $S(x, y, t)$ 表示源/汇项，则 ADE 的守恒形式可写为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C - v C) + S(x, y, t) \quad (2)$$

当介质各向同性或仅考虑主方向分散、忽略交叉项 ($D_{xy} = D_{yx} = 0$)，且无显式源/汇时，可简化为常见的标量形式：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (3)$$

其中：

D_x, D_y 分别代表沿 x, y 方向的总分散系数（包含机械分散与分子扩散）；

$C(x, y, t)$ 代表溶质浓度 (M/L^3)，反映污染物或示踪剂在各点的浓度分布；

$v = (v_x, v_y)$ 代表孔隙中流体线速度 (L/T)，由达西速率与孔隙度等转换得到；

D 代表分散系数张量 (L^2/T)，其主对角元素包含纵向与横向机械分散与分子扩散之和；

$S(x, y, t)$ 代表源/汇项 ($M/L^3/T$)，可表示污染物注入、化学反应或生物降解等过程。

在时间 $t=0$ 时，假设物质浓度 C 在区域内均匀分布，且浓度为零，只在区域的中心有一个高斯分布的初始浓度。则初始条件可以表示为：

$$C(x, y, 0) = C_0 \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4)$$

其中：

C_0 为高斯分布的峰值浓度；

σ 为标准差，控制分布宽度；

(x_c, y_c) 为区域中心坐标。

ADE 通常有三类边界条件：Dirichlet 边界条件，Neumann 边界条件，Robin 边界条件。我们在此采用 Dirichlet 边界条件，即直接指定边界上的浓度值，可以表示为：

$$C(x, y, t) = C_b(x, y, t), \text{ 当 } x, y \in \Gamma, t \geq 0 \quad (5)$$

其中：

$C_b(x, y, t)$ 是边界上的已知函数或常数；

Γ 表示空间域的边界。

PINN:** **

物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) 是一类在神经网络训练过程中同时满足观测数据和所给物理定律（以偏微分方程形式刻画）的“物理-数据融合”方法，最早由 Raissi 等人于 2019 年提出，目标是在无需网格划分的条件下求解 PDE 的正反问题。与传统数值方法依赖有限差分/有限元离散不同，PINN 直接将网络输出视为待求解的场函数，并通过自动微分计算其对空间-时间坐标的导数，从而将 PDE 残差嵌入损失函数中引导模型学习。这种将物理先验作为正则化手段的思路，使 PINN 在流体力学、电磁学、量子力学等多个科学领域迅速流行，并被视为“无网格的通用 PDE 求解器”。

PINNs 的训练过程通常涉及四个方面：

- (1) 数据点的损失项：通过神经网络拟合测量数据，使得神经网络的输出逼近测量值。
- (2) 物理方程的损失项：利用自动微分计算神经网络输出关于输入的导数，并将这些导数引入物理方程，形成约束条件。
- (3) 初始条件的损失项：用于确保网络满足物理方程初始条件，通常与数据点的损失项一同训练以提升稳定性。
- (4) 边界条件的损失项：确保神经网络在初始和边界点满足物理方程的边界条件。

在本研究课题中，我们所基于的物理方程即为ADE。在PINN中引入ADE的物理约束后，模型的总损失函数同样由以下四部分组成：数据点的损失项、物理方程的损失项、初始条件的损失项与边界条件的损失项，并通过超参数（权重）平衡各项对训练的贡献。对流扩散算子为（即将ADE方程所有项都移到左边）：

$$R_{\theta}(x, y, t) = \frac{\partial C_{\theta}}{\partial t} + v_x \frac{\partial C_{\theta}}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_{\theta}}{\partial y} - D_x \frac{\partial^2 C_{\theta}}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C_{\theta}}{\partial y^2} \quad (6)$$

各项损失函数如下：

1. 数据损失 L_{data}

$$L_{\text{data}} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} |C_{\theta}(x_i, y_i, t_i) - C_i^{\text{obs}}|^2 \quad (7)$$

用于度量网络在稀疏观测点 (x_i, y_i, t_i) 处的预测与真实浓度 C_i^{obs} 之间的均方误差，能有效结合有限测点数据进行监督。

2. PDE残差损失 L_{PDE}

$$L_{\text{PDE}} = \frac{1}{N_r} \sum_{j=1}^{N_r} |R_{\theta}(x_j^r, y_j^r, t_j^r)|^2 \quad (8)$$

在域内 N_r 个配点采样点 (collocation points) 上，通过自动微分计算PDE残差 R_{θ} 并最小化其平方和，从而将偏微分方程物理信息施加于网络。

3. 初始条件损失 L_{IC}

$$L_{\text{IC}} = \frac{1}{N_{\text{IC}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{IC}}} |C_{\theta}(x_k, y_k, 0) - C_0(x_k, y_k)|^2 \quad (9)$$

用于确保网络在 $t = 0$ 时刻符合已知初始浓度场 C_0 。

4. 边界条件损失 L_{BC}

$$L_{\text{BC}} = \frac{1}{N_{\text{BC}}} \sum_{l=1}^{N_{\text{BC}}} |\mathcal{B}[C_{\theta}(x_l^b, y_l^b, t_l^b)]|^2 \quad (10)$$

根据问题所采用的 Dirichlet 边界算子 $\mathcal{B}[\cdot]$ 构造对应均方误差，保证浓度场在边界 (x_l^b, y_l^b, t_l^b) 上满足。

则有总损失函数为：

$$L(\theta) = \omega_d L_{\text{data}} + \omega_r L_{\text{PDE}} + \omega_{\text{IC}} L_{\text{IC}} + \omega_{\text{BC}} L_{\text{BC}} \quad (11)$$

其中 $\omega_d, \omega_r, \omega_{\text{IC}}, \omega_{\text{BC}}$ 为权重。