# 通过深度学习从图像预测多孔介质的有效扩散率

# 摘要

我们报道了机器学习方法从二维多孔介质的结构图像预测有效扩散率（De）的应用。使用重构方法构建孔结构并以图像表示，并通过晶格玻尔兹曼（LBM）模拟计算其有效扩散率。这样生成的数据集可用于训练卷积神经网络（CNN）模型并评估其性能。经过训练的模型可以预测多孔结构的有效扩散率，而计算成本要比LBM模拟低几个数量级。优化的模型在具有现实拓扑结构，孔隙率变化较大（0.28-0.98），有效扩散系数超过一个数量级（0.1≲𝐷𝑒<1）的多孔介质上表现良好，例如，预测的De的> 95％已被截断当真实De大于0.2时，相对误差<10％。 CNN模型比经验Bruggeman方程提供更好的预测，特别是对于扩散率小的多孔结构。但是，对于De <0.1的结构，CNN预测的相对误差相当高。为了解决这个问题，将多孔结构的孔隙率直接编码到神经网络中，但性能得到了一定程度的提高。通过使用一种简单的算法去除捕获区域和死角路径，可以实现进一步的改进，即对于真正的De <0.1的结构，CNN预测的70％具有相对误差<30％。这些结果表明，以现场知识为基础的深度学习可以成为预测多孔介质传输特性的强大技术。在对当前工作中CNN模型的性能进行详细分析的基础上，讨论了多孔介质中机器学习的未来研究方向。

# 1 引言

# 2 计算框架

## 在本节中，我们讨论了深度学习模型，该模型可预测结构多样且具有挑战性的多孔介质的有效扩散率。 在A部分中，我们介绍了用于生成深度学习数据集的方法。 在B部分中，我们介绍了CNN模型的体系结构，并总结了使用CNN从其图像预测多孔介质的有效扩散率的计算框架。 最后，C部分介绍了CNN模型的训练和测试方法。

## 2.1生成数据集

用于训练，验证和测试我们的深度学习模型的数据集包括多孔介质的结构（以图像的形式）及其相应的有效扩散率。在不失一般性的前提下，我们将专注于方形的二维（2D）多孔介质。二维多孔材料的微观结构是使用四方结构生成集（QSGS）方法生成的，该方法是多孔介质领域中的一种流行方法.17该方法的详细说明可以在文献中找到，我们仅概述其关键步骤：（ 1）计算域被划分为正方形单元。（2）固体“种子”根据分布概率cd随机分布在域中，该概率小于多孔介质的目标孔隙率。这是通过为每个单元分配一个随机数来完成的，选择分配的随机数小于cd的单元作为“种子”。（3）根据定向生长概率Pi将“种子”种植到其相邻细胞中。为此，将随机数分配给固体种子的每个相邻细胞。如果相邻单元格的随机数小于Pi，它将成为正在生长的固体的一部分。（4）重复步骤（2）和（3），直到在区域中达到目标孔隙率。上述步骤一起产生了多孔介质的二进制图像。在这些图像中，单个的孔或颗粒被完全分解，每个像素要么是孔，要么是实心节点，并用0（孔空间）或1（固相）的二进制值表示。

使用上述方法，在200×200（像素）区域内生成二维多孔介质。选择多孔结构的这种大小，以便（1）微观结构足够大，可以捕获实际多孔介质中发生的拓扑结构和传输行为，并且（2）多孔结构足够小，使得大量的多孔结构 可以以合理的计算成本获得结构及其有效扩散性。 为了确保数据集包括各种各样的多孔结构，生成了1960个样品，孔隙率（ε）为0.28、0.29，...，0.98。 对于每个孔隙度，将生成28个样品。 图1a显示了生成的多孔样品的代表性图像。 在孔隙度小于0.5的样品中，可以获得多种结构，具有曲折的传输路径，被困区域和死角孔。

图1.（a）为深度学习模型生成的二维多孔介质的代表性图像。 白色和黑色分别表示孔空间和固相。 质量通过多孔介质扩散的入口（出口）用蓝色（红色）线标记。 多孔介质顶部和底部的绿线表示LBM模拟中的周期性边界。 橙色区域代表死角通道（即仅连接到多孔结构的入口或出口的通道），青色区域表示捕获的孔隙空间（即未连接到多孔结构的孤立孔隙空间） 结构的入口和出口）。 （b）这项工作中产生的多孔介质的有效扩散率分布。

接下来，我们计算上面生成的多孔结构的有效扩散率。假设多孔结构内的分子传输遵循菲克定律，扩散系数𝐷̃0。因此，多孔结构内的分子扩散服从拉普拉斯方程，其中孔表面的零通量边界条件。为了计算每个多孔结构的有效扩散率，在每个多孔结构的左边界和右边界之间施加均匀的浓度差（Δ𝐶̃），并且在顶部边界和底部边界上分别施加周期性边界条件。使用晶格玻尔兹曼方法（LBM）求解拉普拉斯方程。具体而言，采用二维九速（D2Q9）LB模型来模拟多孔结构内部的扩散过程。 LBM与传统的数值方法不同，它通过离散化孔隙空间中的拉普拉斯方程，而求解浓度分布函数的演化方程。

## 2.2 卷积神经网络预测有效扩散率

# 支持信息中对经典和卷积神经网络的基本概念以及包括超参数和可学习参数的术语进行了回顾。这些模型，尤其是CNN，已经成功地用于图像分类，并且正在被用于预测多孔介质的有效渗透率。受这些工作的启发，我们采用CNN模型从其图像11、19、20预测多孔介质的有效扩散率，我们的模型结构如图2所示。多孔结构的二值图像，其中值为1（0）的像素对应于固相（孔空间），是CNN的输入。我们注意到，输入图像的二进制性质与这项工作中计算生成的多孔介质的格式一致（请参阅第II.A节），而不是像许多图像识别中所做的那样对灰度图像进行二值化的结果。学习。由于CNN中图像的所需像素大小为2m（m为整数），因此在将部分A中制作的多孔结构图像使用kernel21下采样为128×128像素，然后再馈入CNN。下面我们概述了CNN中的不同层。我们专注于识别数据流以及可学习的参数及其维数，但省略了数字实现细节，因为它们在文献中广泛可用。

在这项工作中，我们改编了具有类似AlexNet架构的CNN模型，11我们的CNN模型具有M对卷积和池化层以及P个全连接层（出于说明目的，图2中M和P都设置为2） ）。当在这项研究中将CNN用于图像相关研究时，卷积或合并层的输出量通常称为特征图，因为这些层的目的是从其输入量中提取特征。11，20为简单起见，卷积/池化层的任何输入/输出量的宽度在此工作中始终等于其高度。卷积层（𝑑𝑜）的输出体积的切片数就是其深度。为了获得特征图的第f个切片F.mapconv𝛿，在输入体积的每个宽度和高度位置上滑动一个过滤器，结果是每个位置的神经元输出。通过将F.mapconv𝛿写为𝑎𝑜×𝑎𝑜2阶张量（𝑎𝑜是要素图的宽度/高度），可以将该操作写为

**利用场知识来增强CNN模型**。CNN的一大优势是可以将物理属性编码到CNN体系结构中，以改善其最终预测。 由于多孔结构的有效扩散率与其孔隙率密切相关，因此在先前的工作14之后，我们还将孔隙率与最后一个池化层的平坦特征图结合起来，以形成CNN中的第一个完全连接的层。具体而言，将每个多孔结构的孔隙率作为输入添加到具有固定权重的常规CNN模型的第一全连接层中（对各种权重进行了测试，结果相似，并且在该值中使用10/4096的值）。最终模型）。

# 3 深层卷积编码器-解码器网络（U-NET）

我们采用深度卷积编码器-解码器网络（U-Net）模型来解决第二部分中定义的逆问题。从概念上讲，此模型由一个编码器网络和一个解码器网络组成。编码器网络用于从温度场中提取重要的空间相关性和特征，并由深层卷积神经网络构成。解码器网络将提取的特征作为输入，并将特征图投影到高维空间，以预测复合材料的异质结构（即二进制导热系数场）。解码器网络由转置的卷积层构成，以将特征图上采样到高维空间。下面，我们首先简要介绍CNN中的基本操作。接下来，我们介绍转置的卷积运算及其与卷积运算的区别。然后，我们介绍我们的U-Net模型的体系结构，并总结使用U-Net预测复合材料异质结构的计算框架。

## 3.1 深度卷积神经网络

在我们最近的工作中可以找到对经典和卷积神经网络及其数据流的详细描述，这些描述以一种便于具有计算传输现象背景的研究人员访问的方式编写。这里，我们只是简要地概述了这些网络的核心思想。神经网络通过一系列带有仿射变换和非线性激活函数的层来近似输入-输出关系h：X→Y。例如，神经网络的第k层通过处理前一层来得到，首先为该输出分配权重和偏差，然后将结果传递给一个激活函数来生成其输出。



其中，和分别是这一层的基矩阵和偏差向量（称作可学习的参数）。是一个逐元非线性激活函数，例如双曲正切函数（tanh）和修正的线性单元函数（ReLU）。对于N层的神经网络，它的输入和输出分别是，。经典的神经网络是全连接的（即，任意层k中的神经元都连接到其上一层中的所有神经元），而且每一层的基矩阵和偏差向量是不同的。因此，随着层数和输入维数的增加，可学习参数的数量急剧增加，从而导致巨大的计算成本。

CNN的设计是为了大大减少神经网络的可学习参数。这是通过仅将k层中的神经元与k−1层中的一些神经元连接，并共享同一卷积层中所有神经元的可学习参数来实现的。在使用CNN进行图像处理时，使用一系列卷积核来计算输出量，称为feature map(因为卷积层的目的是从输入量中提取重要的特征)。通常，feature map的通道数就是卷积层输出量的深度。例如，考虑一个输入体积为Xi∈R xi x Xi x di的卷积层，其中Xi x Xi是每个feature map的大小，di是体积的深度。获得β-th特征映射(F⋅mapβconv)，β-th过滤器Wβ∈R sβ×sβ×di (sβ:内核大小；di:过滤器的数量)是由滑动输入量，和结果结合β-th偏见B之前通过非线性激活函数g (⋅)，其中J是一个所有元素都等于1的张量。Wβ⊗ξ表示滤波器内核与输入的二维卷积。它的详细表达式取决于填充(p)和步幅(st)，可以在许多教科书中找到。例如，一个2×2核(wij)的卷积的输入矩阵(xij)为3×3, 步幅 st = 1, 填充 p = 0，则输出为2×2矩阵(yij)。如果我们将输入和输出从左到右，从上到下展开成向量，那么卷积的计算可以表示为如下的矩阵运算:

## 3.2 转置卷积

转置卷积也称为分数跨度卷积，因为始终可以通过将许多零列和零行添加到输入中来通过直接卷积来模拟转置卷积。应当注意，转置卷积不会恢复卷积本身的输入，而是返回与输入大小相同的特征图。

## 3.3 深度卷积编解码网络

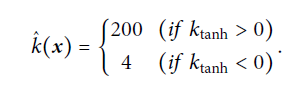
卷积编码器/解码器（U-Net）体系结构是CNN的扩展，用于逐像素预测问题。 在处理高维输入和输出之间的映射时，它显示出很高的效率。 例如，U-Net已成功用于生物医学图像分割和条件形状生成。受这些工作的启发，我们采用U-Net架构来求解Sec II中定义的逆模型。即根据其温度场预测2D复合材料的二进制电导率场。

我们的U-Net模型的体系结构如图2所示。测得的温度场（以2D图像表示）是U-Net和二进制电导率场的输入，其中像素值为1（-1 对应于局部电导率k = 200（4）W /（m K）的）是输出预测。为了降低计算成本，在输入U-Net模型之前，使用卷积核将输入的温度场图像下采样为64×64像素。下面，我们概述了U-Net模型中的不同层。

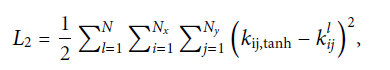
如图2所示，我们的U-Net模型由具有收缩路径的编码器（左侧），具有扩展路径的解码器（右侧）以及连接编码器和解码器部分的瓶颈组成。 编码器部分遵循CNN的典型结构，具有四个重复单元，每个单元包含三层：（1）每层的输入数据均应用3×3卷积层（本研究中的所有卷积层均具有相同的填充） 和步幅），然后是ReLU激活功能； （2）使用步长st = 2的2×2最大合并层对第一层的输出特征图进行下采样； （3）为避免过度拟合，在将数据馈送到下一个单元的卷积层之前，应用保持率为kp = 0.5的丢弃层。

解码器部分由四个重复单元组成，每个单元包含四层：（1）通过转置卷积对输入特征图进行上采样（本研究中的所有转置卷积均为相同的填充和st =2的跨度）然后是ReLU激活功能；（2）然后，通过收缩路径将来自编码器部分的输出特征与其对应的特征图连接起来，这称为跳过连接；（3）将丢弃层应用于连接的要素，以避免过度拟合；（4）丢弃层的输出结果被馈送到常规卷积层，然后是ReLU激活函数。

我们在瓶颈处应用卷积层以连接编码器和解码器部分。在U-Net的最后一层，使用具有tanh激活功能的1×1卷积将要素映射到所需的输出ktanh。通过阈值化获得对二元电导率场的最终预测



每个卷积/池化层产生的特征图的数量，每个卷积层之后的激活函数的选择，总层数以及训练轮回的次数。在这项工作中，将根据模型在验证数据集上的性能来选择这些超参数。优化的超参数在图2中标记，并在第二节中介绍。三，上面的U-Net模型是使用Tensorflow实施的。L2损失适用于量化模型再现训练数据集的程度，

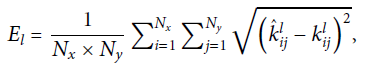


其中N是样本数，Nx（Ny）是2D合成图像的x-（y-）方向上的像素数。 kij，tanh和kl ij是在具有tanh激活函数的1×1卷积和样本l的像素ij的地面真值之后由模型进行的预测。

使用训练数据集对U-Net模型进行训练。在训练过程中，使用标准偏差为0.1的截断正态分布初始化所有内核的权重，并将所有偏差设置为0.1。使用具有衰减学习率（初始值为8×10−4，每200个周期减少40％）的Adam Optimizer35来最小化公式中的L2。当验证错误最小化时，训练将在3000个轮回时停止。在训练过程中，我们每隔1000个时间段为所有可学习的过滤器保存优化的权重和偏差。然后，将恢复最后一步中保存的参数，以评估测试数据集。

# 4深度学习模型的性能

在这部分，我们检查了深度学习模型的性能，该模型用于根据温度场预测2D复合材料的异质结构（即其二元导热率场）。 样本l的预测误差定义为



其中ˆkl ij是模型对二进制电导率场的预测。测试数据集的平均准确度定义为Acc = 1.0 − 1NΣNl= 1 El。测量温度作为输入的像素数Nmea可以改变以测试模型的性能。我们首先证明，如果将复合材料中每个像素处测得的温度场用作输入，则深度学习模型将表现良好。接下来，我们表明该模型在输入像素小于1％的温度下性能很好，前提是对温度输入进行了适当的预处理。最后，我们证明了深度学习模型可用于指导温度传感器的放置，而这些传感器所测量的额外数据可用于增强模型的预测精度。

**4.1 带有全尺寸的深度学习模型**

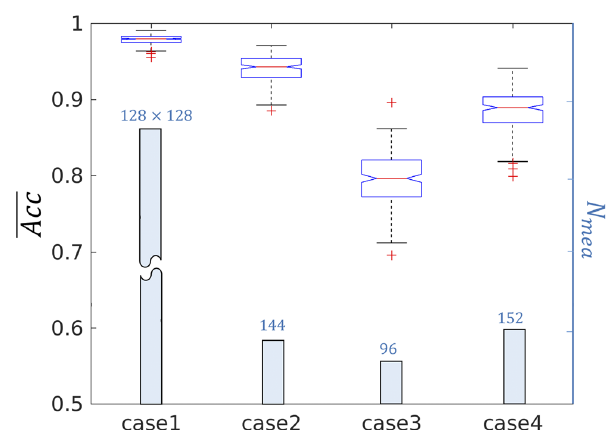


图3：深度学习模型的预测精度和所需的温度测量数量的箱线图。

案例1：训练模型进行全温度测量（即，每个像素处都有温度）。

情况2：使用通过稀疏温度输入的拉普拉斯插值获得的温度场训练的模型

情况3：使用通过在复合材料边界上进行稀疏温度数据的拉普拉斯插值获得的温度场进行训练的模型（小于总测量值的0.6％）。

案例4：使用通过深度学习模型建议的位置处测得的稀疏温度数据的拉普拉斯插值获得的温度场训练的模型。

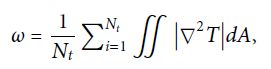
图3显示了将深度学习模型的输入作为复合材料中所有像素处测得的温度场时的性能（以下称为全温度场）测试数据集。预测的二元电导率场的平均精度为Acc = 0.979。图4（a）显示了一个代表性示例中的温度场。图4（b）和4（c）分别显示了图4（a）所示示例中的真实和预测的二进制热导率字段。我们观察到，由U-Net模型预测的电导率场与真实场非常吻合。测试数据集的预测误差直方图如图4（d）所示，我们观察到> 70％的测试数据的预测误差小于2％。有趣的是，从图4（a）所示的输入温度场中，我们可以大致辨别出高电导率填料的轮廓。显然，人类识别的温度场内的空间相关性可以通过编码器模型很好地提取（以特征图的形式，参见等式（7））。否则，解码器模型将无法准确预测二进制电导率场，其预测能力在很大程度上取决于编码器模型对特征的有效提取。

当一些填充物彼此重叠时，用眼睛识别在温度场中的填充物的轮廓变得越来越困难。尽管如此，在这些条件下，U-Net模型仍然可以很好地预测二元电导率场（参见补充材料中的图S1）。这表明深度学习在某些条件下可以比人类更好。

在上述示例中，填料[200 W /（m K）]和基体[4 W /（m K）]的热导率之间的对比度非常高。为了阐明填料和基体电导率之间的对比如何影响我们模型的性能，我们通过将基体电导率保持在km = 4 W /（m K）但将填料电导率更改为kf = 4.4 8W /（m K），8 W /（m K），20 W /（m K）和200 W /（m K），进行了四组研究。因此，我们的研究覆盖了电导率对比值为γ= kf / km = 1.1、2、5和50的结果。复合材料的结构与上面使用的结构相同。图5总结了这些数据集的模型性能。该模型在电导率对比度γ≥5时表现很好。例如，图5（a）显示了模型的平均精度Acc，而对于γ≥5，我们观察到Acc优于0.979。图5（b）显示了累积值每个数据集中所有结构的预测误差E的概率。我们观察到，在γ= 5时，模型的预测误差E <0.02超过70％数据集中的结构。由于广泛遇到了至少5的电导率对比[例如，诸如塑料之类的基质材料的电导率为〜0.1 W /（m K），大多数填料的电导率至少为几W /（m K）]，该模型的性能在实际条件下是足够的。

当γ从5降低到2时，Acc从0.979降低到0.965。对于深度学习模型，通常将这样的Acc降低0.014（对应于误差增加68％）视为大幅下降。当γ进一步减小到1.1时，模型的预测能力急剧下降：其Acc下降到0.87；对于数据集中的几乎所有结构，其预测误差都大于0.08，对于50％以上的结构，其预测误差在0.12和0.24之间。

随着γ的降低，模型性能的降低可以理解如下 如果复合材料中的电导率是均质的，则其温度场到处都遵循拉普拉斯方程（即i2T = 0）。 本质上，训练深度学习模型以近似温度的非拉普拉斯分布之间的相关性场和复合材料中的二元电导率场。我们假设，如果温度场的非拉普拉斯性质很强，则该模型应该能够学习近似这些相关关系并表现良好；否则，该模型的效果会很差。为了测试这种假设，我们通过定义一个参数来表征温度场的非拉普拉斯性质



其中对每个复合i进行积分，而Nt是数据集中的复合数。如图5（a）所示，随着γ减小，ω减小，特别是当γ从2减小到1.1时。该趋势与同一图中所示的γ的平均准确度的演变非常吻合，因此支持了我们的假设。以下各节中，所有模拟均在固定电导率对比度γ= 50.0的条件下进行。

**4.2 粗粒度输入的深度学习模型**

另一方面，基本矩阵-填充物界面的热导率跃变意味着拉普拉斯插值必然将误差引入温度场，研究这些误差是否会损害深度学习模型的预测很有趣。 图6（d）显示了当在复合材料中均匀分布的122个像素处给出真实温度场[见图6（a）]时，使用拉普拉斯内插法对温度场进行上采样的过程[见图6（c）]。 上采样温度的平均相对误差为29％，表明该温度场中存在相当大的误差。

预测的和真实的二进制热导率场的比较[参见图1和2。 [6（b）和6（e）]显示了深度学习模型可以捕获半径约为10个像素的填充物的曲率，尽管事实上只有在间隔为12的粗分布点处才知道真实的温度场像素。这种成功可能与深度学习模型中几何特征的提取和表示方式有关。在深度学习模型中，填充物的几何特征隐式封装在温度场的空间相关性中。几层编码器模型中的滤波器可以在许多长度尺度上提取温度场中的空间相关性，从而可以在与以下情况相当的长度尺度上解析二元热导率场的几何特征（以及填充物的曲率）已知真实温度的点之间的间隔。因此，与基于有限差分和有限元方法的方法相比，深度学习模型具有一些潜在的优势。在那些方法中，因为等式中的微分算子。 （1）是局部离散的，网格大小必须大大小于计算域中几何特征的曲率半径，才能很好地捕获温度场。深度学习模型能够捕获全局（大规模）特征的能力将来应更多的用力撕系统地探索细粒度的输入。

**4.3 使用仅边界输入的深度学习模型**

虽然基于插值的向上采样允许从粗粒度温度数据预测复合材料中的二进制导热系数场，但深度学习模型需要在复合材料内部测量数据。 这种测量通常比在边界上测量温度更困难，尤其是在三维复合材料中。为了研究是否可以减轻此限制，在这里，我们探讨了仅在2D复合材料边界上测量温度的情况。具体而言，仅在图1所示的均匀分布在复合材料的四个边界上的96个点处测量温度。

在边界上测得的真实温度下，我们首先使用拉普拉斯插值法获得复合材料内部的温度。在图7（a）中显示了代表性案例的内插温度场，在图6（a）中显示了相应的真实温度场。内插温度场偏离真实温度场，平均相对误差为AEl = 43％。 插值场不能很好地再现真实场，并且在插值温度场中很难分辨出填料的轮廓。 图7（c）显示了由U-Net模型预测的二值热导率场。我们观察到该模型可以揭示高导电性填料所位于的区域。这表明编码器模型可以捕获不完美温度场中的大规模空间相关性，而解码器模型可以使用这些相关性在很大程度上重建填充物的位置。 然而，深度学习模型很难描述填充物-矩阵的界面，特别是在几个填充物彼此靠近的空间中（在图7（c）中用蓝色椭圆形突出显示）以及复合材料的内部。这与以下事实一致：内插温度场无法捕获小范围和远离边界的温度变化。在整个测试数据集中，二元电导率场的平均预测精度为Acc = 0.797（见图3），其中超过95％的情况的平均误差小于25％[见图7（d）] ]。 假设真实温度仅在边界上可用，并且在合成中所有像素的约0.5％处可用，深度学习模型的准确性似乎是合理的。

**4.4 通过已知模型的温度测量来改善深度学习预测**

对于图7（b）所示的复合材料，图7（c）表明，在复合材料内部，该模型对二元导热系数场的预测相对较差。 从模型本身可以推断出这种不良性能。 我们模型的最后一层是tanh层，它在合成中的每个像素处输出ktanh [例如，参见图7（e）]。 使用0作为决策阈值的阈值ktanh给出了预测的二进制热导率字段。因此，可以将ktanh用作预测二进制导热系数置信度的替代：ktanh与决策阈值0的较大（较小）偏差对应于具有较高（较低）置信度的预测。在图7（e）的ktanh的灰度表示中，颜色接近于完美的黑白的区域是深度学习模型“确定”局部导热率的地方。而颜色介于黑色和白色中间的区域（通常在复合材料的内部）对应于深度学习模型对局部热导率“不确定”的地方。深度学习模型具有较小置信度（或不确定性较大）的后一个区域确实对应于其中预测的二进制热导率具有较大误差的区域。

复合材料内部的边界处存在真实温度时，深度学习模型的性能相对较差，并且性能之间存在很强的相关性，并且tanh层的输出所揭示的低模型置信度通常适用于此处研究的所有复合材料。具体来说，我们通过Eij =ΣNl= 1 ∣ˆkl ij-kl ij∣ / N计算测试数据集中所有合成像素的ij的平均预测误差。图7（f）显示，复合材料内部的Eij实际上大于其边界附近的Eij。我们还通过CFij = ∑Nl = 1 tanktanh，ij∣ / N定义测试数据集中所有复合物中每个像素ij的模型置信度，其中CFij = 1和0分别对应100％和0％的置信度。图7（g）显示，模型置信度低的区域与预测误差高的区域大致重合[cf. 图7（f）]。

大的预测误差与像素处的低模型置信度之间的强相关性可用于指导温度传感器的放置，以改善模型性能并减少温度测量的次数。例如，由于当仅在边界处可获得真实温度时，模型对复合材料内部的置信度较低，因此我们可以在该区域中引入其他传感器以潜在地减少该区域中的预测误差。为了探索这个想法，除了在Sec中使用了96个边界点。我们将56个测量点引入到复合材料的中心区域[请参见图8（a）]。 然后，我们使用拉普拉斯插值法计算复合材料中的温度场。 图8（b）示出了内插温度场，其与真实温度场[见图6（a）]偏离，具有平均相对误差AE1 ＝ 30％。根据该温度场预测的二值热导率场如图8（c）所示。与图7（c）的结果相比，预测得到了显著改善，尤其是在复合材料的中心部分。对于整个测试数据集，我们发现平均预测准确度为Acc = 0.885（见图3），并且超过90％的预测误差小于15％[见图8（d）]。除此之外，复合材料中心区域的模型置信度和平均预测准确度分别从〜55％提高到〜80％和从〜0.65提高到〜0.85。因此，根据深度学习模型的反馈（即模型在整个组合中的模型置信度分布）的反馈来测量组合中其他点的温度，有助于改善模型的性能。该模型的精度略低于图3所示情况2的模型，图3中的情况是在复合材料内部的144个点处测量真实温度。但是，复合材料内部的温度测量次数约为情况2的一半。

# 5 讨论

结果以秒为单位。 IV显示，对于具有随机分布在2D矩阵中的圆形填充物的复合材料，深度学习模型可以合理地从其温度场预测复合材料的结构。 因此，尽管用于定量解决工程问题的深度学习模型仍处于起步阶段，但它们显示出可观的前景。 但是，深度学习模型的实际应用必须解决这里未解决的几个重要问题，例如，应将它们扩展到具有更逼真的异构性的三维（3D）系统，并且必须生成足够的训练数据来训练这些模型 。 我们对这些问题可以解决感到谨慎乐观。

首先，深度学习模型可能会扩展到3D系统。最近，在几篇关于使用CNN预测3D多孔介质的结构传输特性的论文中报道了令人兴奋的进展。这些工作表明深度学习技术有望解决3D问题。此外，U-Net模型擅长在高维数据之间进行映射，并证明了将其用于3D多类分割问题的可行性。其次，深度学习模型应该能够处理更一般的异质性，例如，一种复合材料，其中任意形状的填料分散在基础基质中。实际上，我们已经测试了一个数据集，其中圆形填充物可以彼此重叠，从而产生部分不规则的填充物[见图S1（a）]。

该数据集的模型平均预测准确度为Acc = 0.972，这与填充物之间不存在重叠的情况相似。此处良好的预测准确性表明，深度学习模型可以潜在地在相对一般的意义上处理异构性 但是，将来必须对此进行更彻底的检查（尤其是在3D系统中）。必须进行广泛的测试以确认U-Net模型在解决涉及逼真的3D异构结构的逆问题中的可行性。

其次，在许多情况下，生成用于训练深度学习模型的大型数据集应该是可行的。尽管通过实验构建大型数据集可能具有挑战性，但这并不一定会阻止深度学习模型的应用。首先，在许多与运输现象相关的领域（例如，石油工程），每天都会通过实验生成大量数据集。这些数据集中的一些是公众可用的，例如数字摇滚数据库。其次，可以通过计算构建大型数据集。现实的复合结构不仅可以通过实验生成，还可以通过计算生成。对于许多问题，可以使用可靠的数学模型（在我们的研究中为热传导方程）。由于在构建数据集时仅需要解决正向问题（根据结构预测温度场），因此可以使用成熟的算法和高性能群集通过解决此类问题来构建海量数据集。这样建立的数据集可以用于训练深度学习模型。虽然在使用这些数据集时必须格外小心（例如，确保数据集中的复合结构代表真实复合物中的结构），但它们确实大大减轻了通过实验生成数据的难度。

# 6 结束语

总而言之，我们开发了一个基于深度学习的模型，可以根据复合材料内部的温度场预测低电导率二维矩阵中高电导率填料的分布。 通过采用编码器-解码器体系结构，我们的U-net模型可以有效处理高维输入和输出字段。当将复合材料中每个像素的真实温度用作输入时，该模型可以准确预测复合材料中的填充剂分布。 即使将粗粒度的温度场（小于完整数据的1％）用作输入，该模型仍然表现良好。如果在模型预测预测可信度较低的所选区域中引入温度数据作为额外输入，则可以进一步提高模型的性能。

虽然当前的工作解决的是涉及热传导的反问题，但是可以想到，可以为涉及类似控制方程的其他传输现象开发类似的模型（例如，在非均匀渗透率的非均质介质中的流体传输）。更广泛地说，这项工作证明了使用深度学习模型解决高维输入和输出反问题的可行性。重要的是，可以用比实际温度场的空间分辨率稍高的空间分辨率来预测复合物中填料的几何特征。这表明，尽管存在细微的不确定性（噪声），编码器子模型仍可以有效地捕获温度场的大规模特征，而解码器子模型可以将这些特征有效地映射到二进制导热系数场。由于只有粗粒度输入字段可用于解决许多实际的逆问题，因此此处显示的结果对于这些问题的深度学习模型的未来发展是令人鼓舞的。

# 补充材料

有关使用深度学习模型预测结构比图4复杂的异构介质结构的示例结果，请参见补充材料。