

基于物理信息的神经网络:最新进展与展望

李 野 陈松灿

南京航空航天大学计算机科学与技术学院/人工智能学院 南京 211106

摘 要 基于物理信息的神经网络(Physics-informed Neural Networks, PINN),是一类用于解决有监督学习任务的神经网络,它不仅尽力遵循训练数据样本的分布规律,而且遵守由偏微分方程描述的物理定律。与纯数据驱动的神经网络学习相比, PINN 在训练过程中施加了物理信息约束,因此能用更少的数据样本学习得到更具泛化能力的模型。近年来, PINN 已逐渐成为机器学习和计算数学交叉学科的研究热点,并在理论和应用方面都获得了相对深入的研究,取得了可观的进展。但 PINN 独特的网络结构在实际应用中也存在训练缓慢甚至不收敛、精度低等问题。文中在总结当前 PINN 研究的基础上,对其网络/体系设计及其在流体力学等多个领域中的应用进行了探究,并展望了进一步的研究方向。

关键词: 人工智能;机器学习;神经网络;物理模型;偏微分方程

中图法分类号 TP183

Physics-informed Neural Networks: Recent Advances and Prospects

LI Ye and CHEN Song-can

College of Computer Science and Technology/Artificial Intelligence, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211106, China

Abstract Physical-informed neural networks (PINN) are a class of neural networks used to solve supervised learning tasks. They not only try to follow the distribution law of the training data, but also follow the physical laws described by partial differential equations. Compared with pure data-driven neural networks, PINN imposes physical information constraints during the training process, so that more generalized models can be acquired with fewer training data. In recent years, PINN has gradually become a research hotspot in the interdisciplinary field of machine learning and computational mathematics, and has obtained relatively in-depth research in both theory and application, and has made considerable progress. However, due to the unique network structure of PINN, there are some problems such as slow training or even non-convergence and low precision in practical application. On the basis of summarizing the current research of PINN, this paper explores the network/system design and its application in many fields such as fluid mechanics, and looks forward to the further research directions.

Keywords Artificial intelligence, Machine learning, Neural network, Physical model, Partial differential equations

1 引言

随着数据和计算资源的爆炸式增长,近年来以深度学习为代表的机器学习技术在众多领域取得了革命性的成果,如图像识别^[1]、自然语言处理^[2]、认知科学^[3]和基因组学^[4]等。此类技术的成功离不开丰富的训练数据,但在某些复杂的物理和工程领域,数据的可获取性是一大难题,这种数据稀疏性使得预测和决策遭受多重挑战,另一方面也使经典的深度神经网络、卷积神经网络、递归神经网络等机器学习算法易陷入过拟合而导致泛化能力变差。

在数据驱动的机器学习取得长足进步之前,许多物理和

工程领域采用的都是物理模型驱动,这些领域经过多年发展,积累了丰富的物理模型,大多以偏微分方程形式刻画或描述,如流体力学中的 Navier-Stokes 方程组^[5]、电磁场理论中的 Maxwell 方程组^[6]和量子力学中的 Schrödinger 方程^[7]等。直接求解物理模型可进行精准预测,但面临着物理模型简单导致的误差过大、物理模型复杂导致的求解复杂度过高、物理模型参数和初边值数据缺失或测量不准导致的求解误差过大等问题,且传统的偏微分方程数值方法在逆问题求解、复杂几何区域求解、高维空间求解等方面都面临着很大的挑战^[8]。与之不同的是,经典的机器学习算法都以纯数据驱动为主,训练一个有监督的机器学习模型的任务就是建立输入数据到

到稿日期:2021-05-22 返修日期:2021-10-19

基金项目:南京航空航天大学新教师工作启动基金(90YAH20131);中央高校基本科研业务费(NJ2020023)

This work was supported by the Start-up Fund of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics(90YAH20131) and Fundamental Research Funds for the Central Universities(NJ2020023).

通信作者:李野(yeli20@nuaa.edu.cn)

输出数据之间的函数映射,即从事先获得的训练数据和事先定义好的算法结构中学习一个具体模型,其好坏与训练数据或分布息息相关。而在许多物理和工程领域场景中,这些训练数据常常隐含部分先验知识(如流体力学问题中的流场数据需要满足质量守恒和动量守恒物理定律,即满足 Navier-Stokes 方程组),但这部分知识并未体现在经典的机器学习算法中,因此某种程度上来说,这是一种信息资源的浪费。本文提出的基于物理信息的神经网络算法(Physics-informed Neural Networks, PINN)正是结合了数据驱动的机器学习和物理模型的优势,能在少量训练数据的条件下,训练出自动满足物理约束条件的模型,在保证精度的同时具有更好的泛化性能,预测模型的重要物理参数。

2 基于物理信息的神经网络 PINN

2.1 什么是 PINN

人工神经网络早在 20 多年前就被用于求解常微分方程和偏微分方程^[9-11]但受限于当时的计算方法和计算资源,这一技术并未得到足够的重视。近年来,随着深度学习的发展,美国布朗大学应用数学系的 Karniadakis 教授及其合作者们重新审视了这一技术,在原有的基础上进行扩展,提出了一套深度学习算法框架,将其命名为“Physics-informed Neural Networks”,并首先将其用于求解偏微分方程的正问题和逆问题^[12-14]。他们期望借助 PINN 将深度学习算法更好地应用于传统数学物理和工程领域的建模和计算。PINN 被提出后,引发了大量的后续研究工作,并逐渐成为科学机器学习(Scientific Machine Learning, SciML)这一新兴交叉领域的研究热点^[15]。

从数学上函数逼近论的角度来看,神经网络可以看作是一个通用的非线性函数逼近器,而偏微分方程的建模过程也是寻找满足约束条件的非线性函数,两者具有相通之处。得益于在深度神经网络中广泛使用的自动微分技术^[16],我们可以将偏微分方程中的微分形式约束条件融入到神经网络的损失函数设计中,从而获得带物理模型约束的神经网络,这就是 PINN 最基础的设计思想。这样训练出来的神经网络不仅能够逼近观测数据,而且能够自动满足偏微分方程所遵循的对称性、不变性、守恒性等物理性质。下文以一个通用形式的偏微分方程为例来介绍 PINN 的设计方法。设函数 $u=u(t, x)$ 满足如下形式的偏微分方程:

$$u_t + N(u, \lambda) = 0, x \in \Omega, t \in [0, T] \quad (1)$$

其中, $N(u, \lambda)$ 是一个带参数 λ 的对 u 进行微分运算的泛函, x 是空间变量, t 是时间变量, Ω 是欧氏空间 \mathbb{R}^D 的子集, T 是终止时刻。传统的物理模型是给定 $u(t, x)$ 的初始状态、边界状态和物理参数 λ , 便可通过求解偏微分方程来预测出任意时空点的 $u(t, x)$ 函数值, 当无法获得解析解时可以利用有限差分、有限元等数值方法进行求解。PINN 则考虑建立一个神经网络来逼近偏微分方程的解, 定义 $u^N(t, x)$ 为逼近函数 $u(t, x)$ 的神经网络, $r(t, x) = u^N + N(u^N, \lambda)$ 为偏微分方程的残差, 并定义 PINN 的损失函数为 $Loss = Loss_u + Loss_r$, 其中:

$$Loss_u = \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u^N(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2 \quad (2)$$

式(2)表示损失函数中的数据驱动部分, $\{t_u^i, x_u^i, u^i\}_{i=1}^{N_u}$ 表示通过初始状态和边界状态获取的训练数据(也包括通过实验观测、数值仿真等手段获取的训练数据)。另一部分损失函数为:

$$Loss_r = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} |r(t_r^i, x_r^i)|^2 \quad (3)$$

式(3)表示损失函数中的物理模型驱动部分, $\{t_r^i, x_r^i\}_{i=1}^{N_r}$ 表示方程的训练配点, 可以利用自动微分技术来高效地获得方程残差值 $r(t_r^i, x_r^i)$ 。我们希望训练出的神经网络逼近函数 $u^N(t, x)$, 不但要与已知训练数据的误差尽可能小, 而且要尽可能满足偏微分方程的约束条件。PINN 的网络结构如图 1 所示, 在输入时间和空间数据后, 首先通过全连接神经网络来逼近函数, 再利用自动微分技术, 求出偏微分方程残差和初边值残差约束, 并将其作为正则项放入损失函数中, 最后利用梯度下降法等优化算法获得神经网络连接权重参数和偏微分方程物理参数。

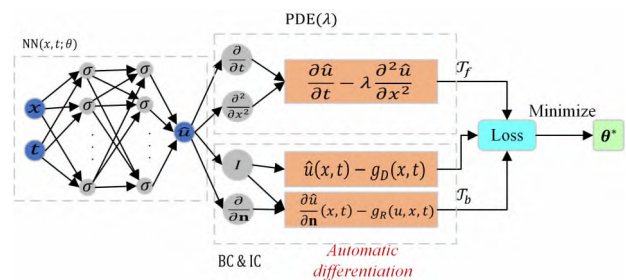


图 1 求解扩散方程 $\frac{\partial u}{\partial t} - \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ 的 PINN 网络结构示意图^[17]

Fig. 1 Schematic of PINN for solving diffusion equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0^{[17]}$$

从上文可以看出, PINN 的网络结构和损失函数都需要根据偏微分方程的形式来量身定做, 这与当前计算物理学领域中直接利用机器学习算法的已有工作不同。将物理信息先验知识融入机器学习算法中的工作有很多, 如 Wang 等^[18]提出了基于物理信息的机器学习框架(Physics-informed Machine Learning, PIML), 该框架用于求解湍流模型, 利用观测数据代替专家经验来建立流场特征到雷诺张量映射的机器学习模型; 其他利用机器学习算法对物理系统进行建模预测的工作请参考文献^[19-32]。这类工作最大的特点是只在训练数据的分类处理中利用了物理信息先验知识, 而把机器学习算法当作一个“黑盒”, 支持向量机、随机森林等经典机器学习算法都能应用。PINN 的设计则更依赖于偏微分方程的结构, 希望能够进一步理解算法“黑盒”的内部结构, 从而具有更好的可解释性和可扩展性。实际上, 在 Raissi 等于 2017 年首次提出 PINN 的概念后^[12-13], 涌现了不少 PINN 的变种, 如 cPINNs(守恒型 PINNs)和 vPINNs(变分型 PINNs)等, 同时也有不少研究者将 PINN 应用于流体力学、材料力学等领域。表 1 列出了近年来 PINN 在理论和应用方面的部分研究成果。

表 1 PINN 的理论和应用的研究总结

Table 1 Summary of PINN's theory and application research

理论研究		应用研究	
参考文献	理论方法	参考文献	应用场景
[33]	nPINNs: 非局部型 PINN	[49]	Hidden Fluid Mechanics, 流体力学
[34-35]	fPINNs: 分数阶 PINN	[50]	NSFnets: 不可压 Navier-Stokes 流
[36]	PPINNs: 并行的 PINN	[51]	高速空气动力学气流问题
[37]	cPINNs: 守恒型 PINN	[52]	多孔介质的地下水流动问题
[38]	DPINNs: 分布型 PINN	[53]	心房颤动诊断问题
[39]	B-PINNs: 贝叶斯型 PINN	[54-55]	超材料设计
[40]	vPINNs: 变分型 PINN	[56]	金属裂缝检测
[41]	XPINNs: 扩展型 PINN	[57-58]	预测电力系统动力学状态
[42-43]	PINN 的泛化误差估计	[59]	低分辨率图像重构
[44-46]	PINN 的训练过程优化	[17,60]	偏微分方程求解工具包
[47-48]	PINN 的激活函数优化	[61-62]	芯片散热器外形优化设计

2.2 理论研究

与传统的偏微分方程数值解法相比, PINN 具有无网格的特点, 有望在传统数值方法面临挑战的方面(如维数灾难、逆问题求解等)开拓出新的研究思路。与经典的机器学习任务相比, PINN 在损失函数的设计中除了有监督的数据部分外, 还包括违反物理定律(偏微分方程)的正则化因子。这些正则化因子因问题而异, 需要进行量身定做设计以达到最优。值得一提的是, 许多传统的偏微分方程数值算法的设计思想会对 PINN 的分析和设计有很大的帮助^[63-69]。下文讨论 PINN 近几年在泛化误差估计、训练过程优化、激活函数设计等理论方面的研究工作。

2.2.1 PINN 的泛化误差估计

传统的偏微分方程数值解法, 如有限差分、有限元方法等, 都有严格的误差分析理论, 以保证方法的稳定性和有效性。PINN 尽管处于初始研究阶段, 但也有工作对 PINN 的泛化误差进行了分析研究。Shin 等^[70]首次对 PINN 求解偏微分方程的相容性进行了分析, 证明了在 Hölder 连续等假设条件下, PINN 的泛化误差上界能被训练误差和训练样本数所控制。

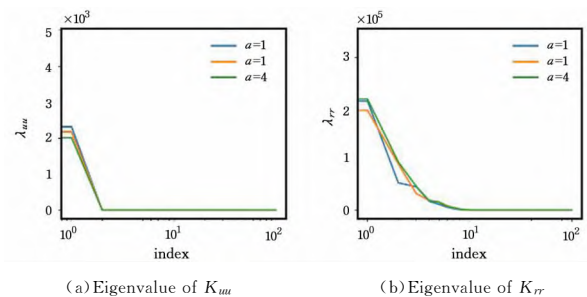
$$Loss_{test}(u_m) \leq C[Loss_{train}(u_m) + m_r^{-\frac{\alpha}{d}} + m_b^{-\frac{\alpha}{d-1}}] \quad (4)$$

其中, $Loss_{test}(u_m)$ 是 PINN 在进行预测时的损失函数值, $Loss_{train}(u_m)$ 是训练集上的损失函数值, m_r 和 m_b 分别是在区域内部和区域初始/边界上的训练样本点数量。更进一步地, 二阶线性椭圆型偏微分方程可以证明 PINN 的解能够收敛到偏微分方程的解。几乎同一时期, Mishra 等也建立了 PINN 求解偏微分方程正问题误差估计的抽象框架理论^[42], 在更弱的假设条件下也能获得类似的误差估计结果, 并分别在线性抛物方程、粘性双曲守恒律方程、不可压 Euler 方程上进行了证明和验证; 后来又将其推广到了偏微分方程逆问题的求解上, 也获得了类似的误差估计结果^[43]。从泛化误差估计式(4)可以看出, 在一定的正则性假设条件下, 只要 PINN 的训练误差足够小, 选取的训练样本数量足够多, PINN 训练获得的解就能准确收敛到偏微分方程(也就是物理模型)的解。

2.2.2 PINN 的训练过程优化

虽然在一定的正则性假设条件下建立了 PINN 的泛化误差分析理论, 但在实际应用中, 全连接的 PINN 神经网络还是出现了训练缓慢甚至不收敛的情形, 特别是在偏微分方程的解有高频现象或者多尺度现象时^[71-74]。Wang 等^[44]注意到,

在利用梯度下降法训练 PINN 时, 动态调整损失函数中不同组成成分之间的权重, 使得损失函数中不同组成成分的梯度值大小趋于一致时, 可以有效改善训练收敛情况。这一经验性的参数调整技巧并未揭示 PINN 训练失败的根本原因, 他们在随后的工作^[45]中从神经正切核^[75-76]的角度, 证明了在神经网络的宽度趋于无穷时, 全连接的 PINN 的神经正切核将会收敛到一个确定性的常数核; 通过分析发现, PINN 训练困难的根本原因是总的神经正切核矩阵和损失函数中不同组成成分对应的核矩阵的特征值分布差异皆过大。分析 PINN 解的梯度流可以发现, 解迭代的变化速率与神经正切核矩阵密切相关, 矩阵的大特征值对应的解分量迭代快, 小特征值对应的解分量迭代慢, 而神经正切核矩阵的特征值分布往往差异很大(见图 2), 这就会导致 PINN 训练缓慢。为此, 他们提出了根据分量核矩阵的特征值之和(等价于矩阵的迹)来自适应调整损失函数中不同组成成分之间权重的算法, 显著提高了 PINN 的训练速度和预测的准确性。Ji 等在利用 PINN 求解常微分方程组时也注意到了刚性常微分方程组(这里的刚性可以简单理解为矩阵特征值分布差异大)会导致 PINN 训练失败^[77], 因此需要先降低系统的刚性后才能用 PINN 进行训练求解。除此之外, Wight 等^[78]提出了自适应的配点重采样法来提高 PINN 的训练速度和逼近效果, McClenny 等^[79]利用软注意力机制来训练调整损失函数中不同组成成分之间的权重, 均在一定程度上加速了 PINN 的训练过程。

图 2 稳态热传导方程解为 $u(x) = \sin(a\pi x)$, $a=1, 2, 4$ 时

PINN 的神经正切核矩阵的特征值分布^[45]

Fig. 2 Eigenvalue distribution of PINN neural tangent kernel matrix for steady heat conduction equation with solutions $u(x) = \sin(a\pi x)$, $a=1, 2, 4$ ^[45]

2.2.3 PINN 的激活函数设计

神经网络可以看作线性变换和非线性变换的组合, 其中

激活函数唯一决定了神经网络的非线性逼近效果。与普通的神经网络相比, PINN 由于涉及到偏微分运算, 因此激活函数的选择就尤为重要。深度神经网络中常用的 ReLU 激活函数由于二阶及以上导数为零, 对损失函数中的高阶微分算子无贡献, 因此不再适用。PINN 中常用的激活函数包括 $\tanh(x)$ 和 $\sin(x)$ 等, 其选择常常与具体问题相关, 尚无统一的选择标准。对于普通的神经网络, 文献[80-81]证实了自适应的激活函数能够加快收敛过程。Jagtap 等引入了包含缩放因子的激活函数^[47], 该因子作为参数与神经网络参数同步训练更新, 能够动态调节激活函数的导数值。与固定不变的激活函数相比, 该方法能够显著加快 PINN 的训练收敛速度并提高精度。更进一步地, 对 PINN 中的每个神经层/神经元的激活函数引入不同的自适应缩放因子^[48], 可以进一步加快训练收敛速度。另外, 值得一提的是, 如果对偏微分方程解的形式有先验知识, 将其融入到激活函数的设计中能够大大提高 PINN 的逼近效果, 例如 Zobeiry 等在求解热传导方程时, 通过传统的分离变量法可以知道解在空间上有周期性、在时间上有指数衰减性, 因此他们在 PINN 网络中引入了一层前置网络, 这层网络中包含 $\sin(x)$ 和 $\exp(-t)$ 形式的激活函数^[82], 最终逼近效果显著优于常用的 $\text{sigmoid}(x)$ 、 $\tanh(x)$ 等激活函数。

2.3 应用研究

由于 PINN 自然地满足了物理定律约束, 随着机器学习和深度学习的发展, 许多研究者在不同领域对其进行了应用, 特别是在许多具有多尺度物理现象的建模和求解问题中得到

了广泛的关注^[83-84]。Lu 等建立了基于 TensorFlow 的 Python 库 DeepXDE^[17], 其可用于求解偏微分方程的正问题和逆问题, 便于 PINN 的推广应用。下文介绍 PINN 在流体力学、生物医学、材料学等工程领域中的应用情况。

2.3.1 PINN 在流体力学中的应用

文献[49]中的研究成果是 PINN 在流体力学中进行应用的典型代表, 更多应用可参见综述文献[85]。传统的计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)通过有限差分、有限元等数值方法来求解流体力学方程组^[86], 其缺点是需要给定明确的初边值条件, 且数值求解算法对边界区域敏感, 条件稍加改变就必须重新计算, 难以用于实时计算和预测等。Raissi 等采取了不同的做法, 他们期望通过用实验手段获得的部分流场图像数据来预测速度和压力场的动态分布, 将流场图像数据、不可压 Navier-Stokes 方程组、对流扩散方程融入神经网络损失函数设计中, 可以训练得到速度和压力场的函数逼近, 甚至可以用于预测雷诺数、佩克莱数等重要物理参数, 解决了传统 CFD 数值模拟方法对区域和初边值条件敏感的问题。他们提出的基于 Navier-Stokes 信息的神经网络结构如图 3 所示, 输入数据为时间变量 t 和空间变量 x, y, z , 输出数据为观测标量 c 、速度场 (u, v, w) 和压力 p , 损失函数为观测标量数据的均方误差和偏微分方程均方残差。

$$\text{Loss} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |c(t^i, x^i, y^i, z^i) - c^i|^2 + \sum_{k=1}^5 \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M |e_k(t^j, x^j, y^j, z^j)|^2 \quad (5)$$

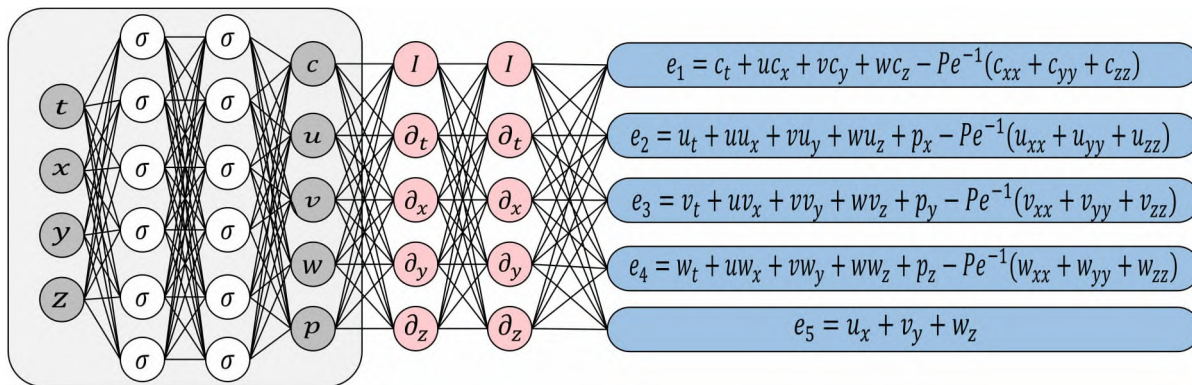


图 3 基于 Navier-Stokes 信息的神经网络示意图^[49]

Fig. 3 Navier-Stokes informed neural networks^[49]

鉴于不可压 Navier-Stokes 方程组在流体力学中的重要地位, 近年来不少研究工作都围绕 PINN 对 Navier-Stokes 方程组进行求解和应用。Raissi 等还用深度学习的方式对物体绕流的升力/阻力问题进行了模拟^[87], 在不可压 Navier-Stokes 方程组的基础上耦合了物体运动位移方程和对流扩散方程, 并将其融入神经网络损失函数设计中, 通过观测到的部分速度场数据还原出全部流场, 进而获得绕流物体的升力、阻力、位移变化等信息, 这对于研究涡流诱导的共振现象有重要意义。Sun 等期望建立 Navier-Stokes 方程组的替代模型^[88], 将流体的质量和动量守恒定律融入损失函数的设计后, 不需要额外的标记数据便能训练出流场模型。他们设计了自动满足初边值条件的深度神经网络, 并对血液动力学中的许多问题(如狭窄管道血液流、动脉瘤血液流等)进行了应用, 数值结果表明了 PINN 与传统 CFD 数值模拟方法的一致性。Jin 等

分别建立了速度-压力形式的 Navier-Stokes 方程组、速度-涡度形式的 Navier-Stokes 方程组的 PINN 网络模型^[50], 并将其用于求解层流和槽道湍流问题, 数值结果显示, 速度-涡度模型在求解层流问题时具有更高的精度, 速度-压力模型能够模拟雷诺数低于 1 000 时的槽道湍流现象, 但雷诺数高于 1 000 时会存在训练收敛不佳的问题。考虑到神经网络中出现的“谱偏置”现象, 即神经网络对低频函数的逼近效果远好于对高频函数的逼近效果^[67-68], Zhang 等提出了频率补偿的 PINN 算法^[69], 在不可压圆柱绕流问题的 PINN 网络中增加了 Fourier 特征映射子网络, 提高了 PINN 算法的泛化性。

除了粘性不可压缩流外, PINN 在流体力学的其他方面也有很多应用, 如空气动力学、多孔介质流等。Mao 等利用 PINN 求解无粘可压缩流的 Euler 方程组的正问题和逆问题^[51]。Euler 方程组用于模拟高速空气动力学的气流

问题,这类问题解的光滑性较差,通常存在间断面(激波)等不连续现象,用整体连续的神经网络来逼近通常效果欠佳。为此,他们通过在 PINN 的损失函数中增加全局的质量守恒和动量守恒信息、提高在间断面附近的训练样本比重等技巧,更好地捕捉到了间断面的存在。Jagtap 等提出了守恒型 PINN 算法 cPINNs^[37],该算法将原始求解区域分解为多个子区域,在损失函数中增加相邻子区域界面通量守恒的约束条件,相比原始的 PINN 能够更准确地模拟激波面等光滑性较差甚至间断的情形;随后在 cPINNs 的基础上提出了扩充型的 PINN 算法 XPINNs^[41],该算法可以同时空间和进行区域分解,能够对任意类型的偏微分方程求解进行加速。Wessels 等在 PINN 的基础上提出了神经粒子方法^[89]用于求解表面自由流问题,其无网格化的特点比传统 CFD 数值方法具有更高的求解效率。Mehta 等利用 PINN 对 Couette 流的湍流情形进行建模,对雷诺应力张量建立了一个变阶数的分数阶模型^[90],该方法对于任意大小的雷诺数都能准确预测平均流场和雷诺应力。Tartakovsky 等利用 PINN 适合求解偏微分方程逆问题的特点,对地下流模型中的参数和本构关系进行建模重构^[91-92],其效果显著优于经典的最大概率方法和纯数据驱动神经网络方法。Guo 等也基于 PINN 来模拟多孔介质的地下水流问题^[52],利用迁移学习的技巧可以大大缩短 PINN 在实际应用中的训练时间,并能提高预测精度。

PINN 在工业界也受到了广泛关注,如 ANSYS 和 NVIDIA 等企业都在加速将 PINN 算法落地产品化。SimNetTM 是 NVIDIA 公司基于 PINN 算法最新开发的 AI 加速仿真工具包^[61-62],该工具包试图解决传统仿真方法计算量大、无法融合实验测量数据等问题。SimNetTM 提供了一个框架,可以对偏微分方程以及边界条件和初始条件进行建模。传统的数值仿真求解器每次只能求解一个实例,当面临多个实例场景时容易耗时过长,而 SimNetTM 能够处理多个单个几何或参数化几何问题,这样可以同时在多个场景上训练神经网络,并且可以在推理过程中实时评估每个配置,以便更有效地探索优化设计空间。SimNetTM 还可以将传统仿真的范围扩展到当前可解决的使用案例之外,例如,神经网络可以保留在训练中获得的知识,以便实时解决学习到的情况;神经网络可以轻松解决传统数值求解器难以解决的数据同化和逆问题。NVIDIA 将其应用于自家芯片散热器的外形设计上,与传统的商用数值仿真求解器相比,其可以将仿真时间由数月缩短至数天甚至数小时,受到了 NVIDIA CEO Jensen Huang 的公开赞扬,表明了 PINN 在对复杂物理模型进行仿真计算方面的巨大潜力。

2.3.2 PINN 在其他工程领域的应用

除了流体力学领域的广泛应用外,PINN 在其他许多工程领域也进行了积极的探索和尝试。在生物医学领域,Sahli 等对心房颤动诊断问题进行了研究,通过 PINN 求解心脏活化时间所满足的非线性波动动力学方程^[53],能够捕捉到波阵面的碰撞现象,准确率优于已有的插值法和高斯过程回归法。Kissas 等对心血管流进行了模拟,心血管流的管壁截面、血流速度和压力作为随时间和空间变化的函数,在物理上满足一阶非线性双曲型偏微分方程,将该方程作为约束条件和训练

数据融入 PINN 的设计中,训练出的模型能够用于预测心血管中的血液流动情况^[93]。特别地,他们用真实的临床数据进行了训练和测试,利用从四维磁共振成像数据中获取到的血流速度和管壁位移数据作为训练数据,训练出的 PINN 模型能够成功预测心血管中的动脉压力分布变化情况。

在材料领域,Fang 等利用 PINN 对电磁超材料问题进行了探索^[54]。通过 PINN 求解频率领域的 Maxwell 方程,一方面可以获得材料内外部的电磁波分布,另一方面通过增加材料内部的电磁波分布约束条件,可以反向获得材料的磁导率、电容率等物理参数,从而应用于材料隐身等特殊场景的设计。Chen 等也用类似的思路对纳米光学器件的超材料设计进行了探索,利用 PINN 求解 Helmholtz 偏微分方程的逆问题^[55],通过观测多纳米粒子组成的材料的散射数据来反演出电磁波在材料内外部的分布及材料的电容率等物理参数。Liu 等设计了多保真的基于物理约束的神经网络算法^[94],通过融合长时间的低保真模拟和短时间的高保真模拟,能够在保证精度的基础上进一步减少所需的训练数据,缩短训练时间,并对材料设计领域中的热传导、相变等物理过程进行了模拟。Zhang 等通过 PINN 来求解平面张力方程,研究了非均匀超弹性材料的识别问题^[95]。Shukla 等研究了金属表面裂缝的检测问题,通过 PINN 求解声波偏微分方程^[56],可以求出金属表面声速的传播情况,声速突变处即是裂缝。Zhu 等将 PINN 应用于金属三维加工建模过程,只需要少量标记数据便可学习到金属加工过程中的温度和融化物分布的动态变化情况^[96]。Viana 等利用 PINN 对材料的累计损伤模型进行求解能够预测腐蚀对材料带来的损伤^[97-98]。

在断裂力学和热力学等工程领域,Goswami 等通过最小化系统的变分能量,提出了一种改进的 PINN 算法,并将其应用于断裂力学的求解^[99]。Tao 等利用 PINN 对薄壁圆柱弯曲载荷问题进行了预测^[100]。Mishra 等利用 PINN 求解在天体物理、核工程和医学领域都有重要意义的辐射转移偏微分方程^[101],这是一个七维的微分积分方程,传统的数值计算方法的计算量很大,他们利用 PINN 求解并给出了与维数无关的泛化误差估计表达式。在电力系统领域,Misyris 等利用 PINN 求解摆动方程^[57],可以预测电力系统动力学状态,如转子角度和频率等,其求解效率是传统方法的 87 倍。Stiasny 等也基于 PINN 来对电力系统频率动态进行预测^[58]。在其他领域,Kadeethum 等利用 PINN 对孔隙介质弹性波的 Biot 方程的正问题和逆问题进行了求解^[102]。Liu 利用 PINN 对生物软组织力学中的本构模型进行建模,效果明显优于依据专家经验构建的模型^[103]。Wang 等基于 PINN 在大气污染羽流对流条件下从低分辨率图像重构高分辨率图像,效果优于传统的超分辨率技术^[59]。Wang 等采取了与 PINN 类似的思想,结合数据驱动模型和物理模型的优势提出了 AutoODE 框架,用机器学习方法来估计常微分方程组中的参数,再结合自动微分技术进行变量预测,将该框架应用于新冠肺炎预测时,误差比纯数据驱动的深度学习算法低 57.4%^[104]。

结束语 本文介绍了 PINN 近年来的发展情况,包括用于求解不同类型的偏微分方程、泛化误差估计、训练过程优化、激活函数设计等理论研究工作,以及在流体力学等许多

工程领域的应用情况。PINN 利用了神经网络的逼近理论和自动微分技术,具有无网格的特点,一定程度上能够避免传统数值方法中的维数灾难现象。PINN 融合了数据和物理模型先验知识,有助于降低神经网络的复杂度和对训练数据量的需求,实验结果也显示 PINN 对于逼近遵循一定物理定律的稀疏数据非常有效,能够避免传统神经网络在逼近稀疏数据时的过拟合现象。

PINN 作为机器学习和计算数学交叉学科的研究热点,尽管在 2017 年提出后已经涌现了不少相关工作,也取得了令人欣喜的效果,但该方法仍处于初探期,存在大量问题亟待解决。本文重点讨论 PINN 在理论和应用方面的一些问题与其未来的发展方向。

从理论方面来看,当前 PINN 的设计都是针对具体问题来具体设计,可能对某个问题有效的设计方式对其他问题就失效了,需要统一考虑各种设计方式对结果的影响。如 PINN 网络的深度和宽度对结果有何影响? 对于更深的神经网络和更高阶的微分算子是否会存在梯度消失现象? 损失函数大都用均方误差表示,是否有更符合物理意义的损失函数表示方式? 如何针对损失函数来设计优化算法,以缩短 PINN 的训练时间,从而提高实用性? 如何避免因多尺度物理系统的刚性问题造成的 PINN 训练缓慢甚至失效的现象? 如何引进多模态数据(如观测的图像数据和测量的数值数据)以进一步提高 PINN 的逼近效果? 总的来说,其核心挑战在于,如何在 PINN 中将数据驱动部分和物理模型驱动部分进行更有效的融合,以增强 PINN 训练过程的稳定性、收敛性和模型的泛化性,提高 PINN 对实际物理过程的逼近效果。

从应用方面来看,PINN 在解决涉及复杂偏微分方程的物理问题时具有较大潜力,特别是在传统数值算法面临困难的方面,如数据同化、逆问题和参数化代理模型等。首先,NVIDIA 公司已经展现出 PINN 在基于 AI 的仿真计算方面的潜力,训练出的代理模型能够大大加快芯片散热器外形参数化优化设计,有望进一步被推广到其他优化设计任务中(如超临界翼型的仿真优化设计)。其次,流体力学领域中 PINN 对大雷诺数和超高声速的流场模拟是一大难点,需要消除大梯度、奇异点和间断点现象的影响,提高 PINN 对此类物理现象的逼近效果。然后,PINN 对于非牛顿流体的建模是一个值得探索和挖掘的方向,非牛顿流体的本构关系建模在数学和物理中一直是一大难题,将物理建模和数据驱动的机器学习算法有效结合,就有望建立更精确的本构关系模型,提高非牛顿流体的建模精度。最后,当前 PINN 都是针对偏微分方程建模问题进行求解,这种融合物理模型的思想有可能推广到其他不用偏微分方程建模的问题中,如相似规律与尺度效应预测等。总的来看,PINN 还需要接受更多实际数据和实际工程应用的检验。

参 考 文 献

- [1] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. Communications of the ACM, 2017, 60(6): 84-90.
- [2] LI H. Deep learning for natural language processing: advantages and challenges[J]. National Science Review, 2018, 5(1): 24-26.
- [3] LAKE B M, SALAKHUTDINOV R, TENENBAUM J B. Human-level concept learning through probabilistic program induction[J]. Science, 2015, 350(6266): 1332-1338.
- [4] ALIPANAHI B, DELONG A, WEIRAUCH M T, et al. Predicting the sequence specificities of DNA-and RNA-binding proteins by deep learning[J]. Nature Biotechnology, 2015, 33(8): 831-838.
- [5] TEMAM R. Navier-Stokes equations: theory and numerical analysis [M]. American Mathematical Society, 2001.
- [6] TAFLOVE A, HAGNESS S C. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method [M]. Artech House, 2005.
- [7] BEREZIN F A, SHUBIN M. The Schrödinger Equation [M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [8] AMES W F. Numerical methods for partial differential equations [M]. Academic Press, 2014.
- [9] LAGARIS I E, LIKAS A, FOTIADIS D I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 1998, 9(5): 987-1000.
- [10] PSICHOGIOS D C, UNGAR L H. A hybrid neural network-first principles approach to process modeling[J]. AIChE Journal, 1992, 38(10): 1499-1511.
- [11] LAGARIS I E, LIKAS A C, PAPAGEORGIOU D G. Neural-network methods for boundary value problems with irregular boundaries[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2000, 11(5): 1041-1049.
- [12] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed deep learning (part I): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations[J]. arXiv:1711.10561, 2017.
- [13] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed deep learning (part II): Data-driven discovery of nonlinear partial differential equations[J]. arXiv:1711.10566, 2017.
- [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.
- [15] BAKER N, ALEXANDER F, BREMER T, et al. Workshop report on basic research needs for scientific machine learning: Core technologies for artificial intelligence [R]. USDOE Office of Science (SC), Washington, DC (United States), 2019.
- [16] BAYDIN A G, PEARLMUTTER B A, RADUL A A, et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey[J]. Journal of Machine Learning Research, 2018, 18: 1-43.
- [17] LU L, MENG X, MAO Z, et al. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations[J]. SIAM Review, 2021, 63(1): 208-228.
- [18] WANG J X, WU J, LING J, et al. A comprehensive physics-informed machine learning framework for predictive turbulence modeling[J]. arXiv:1701.07102, 2017.
- [19] ZHU Y, ZABARAS N. Bayesian deep convolutional encoder-decoder networks for surrogate modeling and uncertainty quantification[J]. Journal of Computational Physics, 2018, 366: 415-447.
- [20] HAGGE T, STINIS P, YEUNG E, et al. Solving differential

- equations with unknown constitutive relations as recurrent neural networks[J]. arXiv:1710.02242, 2017.
- [21] HAN J, JENTZEN A, WEINAN E. Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2018, 115(34): 8505-8510.
- [22] TRIPATHY R K, BILIONIS I. Deep UQ: Learning deep neural network surrogate models for high dimensional uncertainty quantification[J]. Journal of Computational Physics, 2018, 375: 565-588.
- [23] VLACHAS P R, BYEON W, WAN Z Y, et al. Data-driven forecasting of high-dimensional chaotic systems with long short-term memory networks[J/OL]. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2018, 474(2213). <https://doi.org/10.1098/rspa.2017.0844>.
- [24] PARISH E J, DURAISAMY K. A paradigm for data-driven predictive modeling using field inversion and machine learning[J]. Journal of Computational Physics, 2016, 305: 758-774.
- [25] DURAISAMY K, ZHANG Z J, SINGH A P. New approaches in turbulence and transition modeling using data-driven techniques [C] // 53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting, Kissimmee, Florida, 2015: 1284.
- [26] LING J, KURZAWSKI A, TEMPLETON J. Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2016, 807: 155-166.
- [27] ZHANG Z J, DURAISAMY K. Machine learning methods for data-driven turbulence modeling[C/OL] // 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 2015: 2460.
- [28] MILANO M, KOUMOUTSAKOS P. Neural network modeling for near wall turbulent flow[J]. Journal of Computational Physics, 2002, 182(1): 1-26.
- [29] PERDIKARIS P, VENTURI D, KARNIADAKIS G E. Multifidelity information fusion algorithms for high-dimensional systems and massive data sets[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2016, 38(4): B521-B538.
- [30] RICO-MARTINEZ R, ANDERSON J S, KEVREKIDIS I G. Continuous-time nonlinear signal processing: a neural network based approach for gray box identification[C] // Proceedings of IEEE Workshop on Neural Networks for Signal Processing. IEEE, 1994: 596-605.
- [31] LING J, TEMPLETON J. Evaluation of machine learning algorithms for prediction of regions of high Reynolds averaged Navier-Stokes uncertainty[J/OL]. Physics of Fluids, 2015, 27(8). <https://doi.org/10.1063/1.4927765>.
- [32] YANG X, ZAFAR S, WANG J X, et al. Predictive large-eddy-simulation wall modeling via physics-informed neural networks [J/OL]. Physical Review Fluids, 2019, 4(3). <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.4.034602>.
- [33] PANG G, D'ELIA M, PARKS M, et al. nPINNs: nonlocal Physics-Informed Neural Networks for a parametrized nonlocal universal Laplacian operator. Algorithms and Applications[J/OL]. Journal of Computational Physics, 2020, 422. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109760>.
- [34] PANG G, LU L, KARNIADAKIS G E. fPINNs: Fractional physics-informed neural networks[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2019, 41(4): A2603-A2626.
- [35] SONG F, PANGE G, MENEVEAU C, et al. Fractional physical-inform neural networks (fPINNs) for turbulent flows[C] // Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 2019: 23-26.
- [36] MENG X, LI Z, ZHANG D, et al. PPINN: Parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs[J/OL]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 370. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113250>.
- [37] JAGTAP A D, KHARAZMI E, KARNIADAKIS G E. Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: applications to forward and inverse problems [J/OL]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 365. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113028>.
- [38] DWIVEDI V, PARASHAR N, SRINIVASAN B. Distributed physics informed neural network for data-efficient solution to partial differential equations[J]. arXiv:1907.08967, 2019.
- [39] YANG L, MENG X, KARNIADAKIS G E. B-PINNs: Bayesian physics-informed neural networks for forward and inverse PDE problems with noisy data [J/OL]. Journal of Computational Physics, 2021, 425. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109913>.
- [40] KHARAZMI E, ZHANG Z, KARNIADAKIS G E. Variational physics-informed neural networks for solving partial differential equations[J]. arXiv:1912.00873, 2019.
- [41] JAGTAP A D, KARNIADAKIS G E. Extended physics-informed neural networks (XPINNs): a generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations[J]. Communications in Computational Physics, 2020, 28(5): 2002-2041.
- [42] MISHRA S, MOLINARO R. Estimates on the generalization error of physics-informed neural networks (PINNs) for approximating PDEs [J]. arXiv:2006.16144, 2020.
- [43] MISHRA S, MOLINARO R. Estimates on the generalization error of physics-informed neural networks (PINNs) for approximating PDEs II: a class of inverse problems [J]. arXiv:2007.01138, 2020.
- [44] WANG S, TENG Y, PERDIKARIS P. Understanding and mitigating gradient pathologies in physics-informed neural networks [J]. arXiv:2001.04536, 2020.
- [45] WANG S, YU X, PERDIKARIS P. When and why PINNs fail to train: A neural tangent kernel perspective [J]. arXiv:2007.14527, 2020.
- [46] WANG S, WANG H, PERDIKARIS P. On the eigenvector bias of Fourier feature networks: from regression to solving multi-scale PDEs with physics-informed neural networks[J]. arXiv:2012.10047, 2020.
- [47] JAGTAP A D, KAWAGUCHI K, KARNIADAKIS G E. Adaptive activation functions accelerate convergence in deep and physics-informed neural networks[J/OL]. Journal of Computational Physics, 2020, 404. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109136>.
- [48] JAGTAP A D, KAWAGUCHI K, KARNIADAKIS G E. Locally adaptive activation functions with slope recovery for deep and physics-informed neural networks[J/OL]. Proceedings of the Royal Society A, 2020, 476(2239). <http://doi.org/10.1098/>

- rspa, 2020, 0334.
- [49] RAISSI M, YAZDANI A, KARNIADAKIS G E. Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations[J]. *Science*, 2020, 367(6481): 1026-1030.
- [50] JIN X, CAI S, LI H, et al. NSFnets (Navier-Stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible Navier-Stokes equations[J/OL]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 426. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109951>.
- [51] MAO Z, JAGTAP A D, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks for high-speed flows[J/OL]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 360. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112789>.
- [52] GUO H, ZHUANG X, LIANG D, et al. Stochastic groundwater flow analysis in heterogeneous aquifer with modified neural architecture search (NAS) based physics-informed neural networks using transfer learning[J]. *arXiv*, 2010, 12344, 2020.
- [53] SAHLI COSTABAL F, YANG Y, PERDIKARIS P, et al. Physics-informed neural networks for cardiac activation mapping [J]. *Frontiers in Physics*, 2020, 8: 42.
- [54] FANG Z, ZHAN J. Deep physical informed neural networks for metamaterial design[J]. *IEEE Access*, 2019, 8: 24506-24513.
- [55] CHEN Y, LU L, KARNIADAKIS G E, et al. Physics-informed neural networks for inverse problems in nano-optics and metamaterials[J]. *Optics express*, 2020, 28(8): 11618-11633.
- [56] SHUKLA K, DI LEONI P C, BLACKSHIRE J, et al. Physics-informed neural network for ultrasound nondestructive quantification of surface breaking cracks[J]. *Journal of Nondestructive Evaluation*, 2020, 39(3): 1-20.
- [57] MISYRIS G S, VENZKE A, CHATZIVASILEIADIS S. Physics-informed neural networks for power systems[C] // 2020 IEEE Power & Energy Society General Meeting (PESGM). *IEEE*, 2020: 1-5.
- [58] STIASNY J, MISYRIS G S, CHATZIVASILEIADIS S. Physics-informed neural networks for non-linear system identification applied to power system dynamics [J]. *arXiv*: 2004. 04026, 2020.
- [59] WANG C, BENTIVEGNA E, ZHOU W, et al. Physics-informed neural network super resolution for advection-diffusion models [J]. *arXiv*: 2011. 02519, 2020.
- [60] NASCIMENTO R G, FRICKE K, VIANA F A C. A tutorial on solving ordinary differential equations using Python and hybrid physics-informed neural network[J/OL]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2020, 96. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2020.103996>.
- [61] HENNIGH O, NARASIMHAN S, NABIAN M A, et al. An end-to-end AI-driven simulation framework[EB/OL]. *Workshop: Machine Learning and the Physical Sciences, the 34th Conference on Neural Information Processing Systems*, 2020. <https://ml4physicsciences.github.io/2020/>.
- [62] HENNIGH O, NARASIMHAN S, NABIAN M A, et al. NVIDIA SimNet™: an AI-accelerated multi-physics simulation framework[C] // *International Conference on Computational Science*. Cham: Springer, 2021: 447-461.
- [63] YANG L, ZHANG D, KARNIADAKIS G E. Physics-informed generative adversarial networks for stochastic differential equations[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2020, 42(1): A292-A317.
- [64] NABIAN M A, MEIDANI H. A deep neural network surrogate for high-dimensional random partial differential equations[J]. *arXiv*: 1806. 02957, 2018.
- [65] ZHANG D, GUO L, KARNIADAKIS G E. Learning in modal space: Solving time-dependent stochastic PDEs using physics-informed neural networks[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2020, 42(2): A639-A665.
- [66] ZHANG D, LU L, GUO L, et al. Quantifying total uncertainty in physics-informed neural networks for solving forward and inverse stochastic problems [J/OL]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 397. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.07.048>.
- [67] RAHAMAN N, BARATIN A, ARPIT D, et al. On the spectral bias of neural networks[C] // *International Conference on Machine Learning*. PMLR, 2019: 5301-5310.
- [68] RONEN B, JACOBS D, KASTEN Y, et al. The convergence rate of neural networks for learned functions of different frequencies [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2019, 32: 4761-4771.
- [69] ZHANG T, DEY B, KAKKAR P, et al. Frequency-compensated PINNs for fluid-dynamic design problems [J]. *arXiv*: 2011. 01456, 2020.
- [70] SHIN Y, DARBON J, KARNIADAKIS G E. On the convergence and generalization of physics informed neural networks [J]. *arXiv*: 2004. 01806, 2020.
- [71] FUKS O, TCHELEPI H A. Limitations of physics informed machine learning for nonlinear two-phase transport in porous media [J]. *Journal of Machine Learning for Modeling and Computing*, 2020, 1(1): 19-37.
- [72] ZHU Y, ZABARAS N, KOUTSOURELAKIS P S, et al. Physics-constrained deep learning for high-dimensional surrogate modeling and uncertainty quantification without labeled data [J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 394: 56-81.
- [73] RAISSI M, KARNIADAKIS G E. Hidden physics models: Machine learning of nonlinear partial differential equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 357: 125-141.
- [74] RAISSI M. Deep hidden physics models: Deep learning of nonlinear partial differential equations[J]. *The Journal of Machine Learning Research*, 2018, 19(1): 932-955.
- [75] JACOT A, GABRIEL F, HONGLER C. Neural tangent kernel: convergence and generalization in neural networks [C] // *Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems*. 2018: 8580-8589.
- [76] ARORA S, DU S, HU W, et al. On exact computation with an infinitely wide neural net[C] // *Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems*. 2019: 8141-8150.
- [77] JI W, QIU W, SHI Z, et al. Stiff-PINN: physics-informed neural network for stiff chemical kinetics[J]. *arXiv*: 2011. 04520, 2020.
- [78] WIGHT C L, ZHAO J. Solving Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations using the adaptive physics-informed neural networks [J]. *arXiv*: 2007. 04542, 2020.
- [79] MCCLENNY L, BRAGA-NETO U. Self-adaptive physics-informed neural networks using a soft attention mechanism[J]. *arXiv*: 2009. 04544, 2020.

- [80] YU C C, TANG Y C, LIU B D. An adaptive activation function for multilayer feedforward neural networks[C]//2002 IEEE Region 10 Conference on Computers, Communications, Control and Power Engineering. IEEE, 2002, 1: 645-650.
- [81] QIAN S, LIU H, LIU C, et al. Adaptive activation functions in convolutional neural networks[J]. *Neurocomputing*, 2018, 272: 204-212.
- [82] ZOBEIRY N, HUMFELD K D. A physics-informed machine learning approach for solving heat transfer equation in advanced manufacturing and engineering applications[J]. *arXiv*, 2010. 02011, 2020.
- [83] ALBER M, TEPOLE A B, CANNON W R, et al. Integrating machine learning and multiscale modeling — perspectives, challenges, and opportunities in the biological, biomedical, and behavioral sciences[J]. *NPJ Digital Medicine*, 2019, 2(1): 1-11.
- [84] PENG G C Y, ALBER M, TEPOLE A B, et al. Multiscale modeling meets machine learning: What can we learn? [J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2020: 1-21.
- [85] CAI S, MAO Z, WANG et al. Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: A review [J]. *arXiv*:2105.09506, 2021.
- [86] ANDERSON J D, WENDT J. *Computational fluid dynamics* [M]. New York: McGraw-Hill, 1995.
- [87] RAISSI M, WANG Z, TRIANTAFYLLOU M S, et al. Deep learning of vortex induced vibrations[J]. *arXiv*: 1808.08952, 2018.
- [88] SUN L, GAO H, PAN S, et al. Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data[J/OL]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 361. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112732>.
- [89] WESSELS H, WEIBENFELS C, WRIGGERS P. The neural particle method—An updated Lagrangian physics informed neural network for computational fluid dynamics[J/OL]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 368. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113127>.
- [90] MEHTA P P, PANG G, SONG F, et al. Discovering a universal variable-order fractional model for turbulent Couette flow using a physics-informed neural network[J]. *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 2019, 22(6): 1675-1688.
- [91] TARTAKOVSKY A M, MARRERO C O, PERDIKARIS P, et al. Physics-informed deep neural networks for learning parameters and constitutive relationships in subsurface flow problems [J/OL]. *Water Resources Research*, 2020, 56(5). <https://doi.org/10.1029/2019WR026731>.
- [92] HE Q Z, BARAJAS-SOLANO D, TARTAKOVSKY G, et al. Physics-informed neural networks for multiphysics data assimilation with application to subsurface transport[J/OL]. *Advances in Water Resources*, 2020, 141. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2020.103610>.
- [93] KISSAS G, YANG Y, HWUANG E, et al. Machine learning in cardiovascular flows modeling: Predicting arterial blood pressure from non-invasive 4D flow MRI data using physics-informed neural networks[J/OL]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 358. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112623>.
- [94] LIU D, WANG Y. Multi-fidelity physics-constrained neural network and its application in materials modeling[J/OL]. *Journal of Mechanical Design*, 2019, 141(12). <https://doi.org/10.1115/1.4044400>.
- [95] ZHANG E, YIN M, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks for nonhomogeneous material identification in elasticity imaging[J]. *arXiv*:2009.04525, 2020.
- [96] ZHU Q, LIU Z, YAN J. Machine learning for metal additive manufacturing: predicting temperature and melt pool fluid dynamics using physics-informed neural networks[J]. *Computational Mechanics*, 2021, 67(2): 619-635.
- [97] DOURADO A, VIANA F A C. Physics-informed neural networks for missing physics estimation in cumulative damage models: a case study in corrosion fatigue[J/OL]. *Journal of Computing and Information Science in Engineering*, 2020, 20(6). <https://doi.org/10.1115/1.4047173>.
- [98] YUCESAN Y A, VIANA F A C. A physics-informed neural network for wind turbine main bearing fatigue[J]. *International Journal of Prognostics and Health Management*, 2020, 11(1): 17.
- [99] GOSWAMI S, ANITESCU C, CHAKRABORTY S, et al. Transfer learning enhanced physics informed neural network for phase-field modeling of fracture[J/OL]. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2020, 106. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2019.102447>.
- [100] TAO F, LIU X, DU H, et al. Physics-informed artificial neural network approach for axial compression buckling analysis of thin-walled cylinder[J]. *AIAA Journal*, 2020, 58(6): 2737-2747.
- [101] MISHRA S, MOLINARO R. Physics Informed Neural Networks for Simulating Radiative Transfer [J]. *arXiv*: 2009.13291, 2020.
- [102] KADEETHUM T, JØRGENSEN T M, NICK H M. Physics-informed neural networks for solving nonlinear diffusivity and Biot's equations[J/OL]. *PloS ONE*, 2020, 15(5). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0232683>.
- [103] LIU M, LIANG L, SUN W. A generic physics-informed neural network-based constitutive model for soft biological tissues [J/OL]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 372. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113402>.
- [104] WANG R, MADDIX D, FALOUTSOS C, et al. Bridging physics-based and data-driven modeling for learning dynamical systems[J]. *arXiv*:2011.10616, 2020.



LI Ye, born in 1989, Ph.D, lecturer, is a member of China Computer Federation. His main research interests include machine learning and numerical solutions for partial differential equations.

(责任编辑:李亚辉)