用于全场超声表征的深度学习

Yang Xu[1],Fatemeh Pourahmadian[1,2*], Jian Song[1], Conglin Wang[3]

[1] *Department of Civil, Environmental & Architectural Engineering, University of Colorado Boulder, USA*
[2] *Department of Applied Mathematics, University of Colorado Boulder, USA*[3] *Department of Physics, University of Colorado Boulder, USA*

arXiv:2301.02378v1 [math.NA] 6 Jan 2023

摘要

本研究借鉴机器学习的最新进展，建立了一个基于物理的数据分析平台，用于根据全波形数据分布式重建层状构件的力学性能。为此，研究探索了两种思路，即直接反演和物理信息神经网络（PINNs）。直接反演包含三个步骤：(i) 对全场数据进行谱去噪和微分；(ii) 构建适当的神经映射，以近似未知物理参数和正则化参数在各自定义域上的分布；(iii) 利用步骤 (i) 中的数据，通过最小化经 Tikhonov 正则化的偏微分方程损失，同时训练神经网络。物理信息神经网络通过多任务学习，为复杂系统提供具有预测能力的高效代理模型；在这种方法中，场变量由神经映射建模，并配以（标量或分布式）辅助参数，例如物理未知量和损失函数权重。随后，通过在底层物理定律的约束下最小化数据失配度量来训练物理信息神经网络。本研究为促进从超声数据中学习，采用了以下物理信息神经网络损失设计：(a) 使用波数相关的 Sobolev 范数计算数据失配；(b) 在特定尺度框架中使用非自适应权重，利用与弹性波传播相关的偏微分方程形式，自然平衡各项损失目标。两种范式均通过合成数据和实验室测试数据进行了考察。在后者中，研究在多个频率下进行重建，并通过一组互补实验验证结果，凸显了验证与确认对于数据驱动建模的重要性。

关键词：深度学习、超声检测、数据驱动力学、全波场反演

1. 引言

基于激光的超声检测近期取得的进展，促使高密度时空数据集不断涌现；结合合适的数据分析方法，这些数据有望帮助我们更好地理解复杂材料和构件的力学机制。这包括从测试数据中学习分布式力学性能，相关应用涵盖从医学诊断到增材制造的广阔领域 [1, 2, 3, 4, 5,6, 7]。本研究利用深度学习 [8, 9]在偏微分方程直接问题和反问题方面的最新进展 [10, 11, 12, 13] ，构建了一个系统的全场反演框架，旨在根据激光超声测量结果恢复层状构件中相关物理量的分布。研究重点关注两种范式，即直接反演和物理信息神经网络（PINN） [14, 15, 16, 17]。实际上，直接反演方法是作者从深度学习视角重新诠释的弹性成像方法 [18, 19, 20] 。为此，研究采用信号处理工具：(a) 对实验数据进行去噪；(b) 根据控制方程仔细计算所需的场导数。与此同时，神经网络识别空频域中的偏微分方程参数分布，并通过最小化单目标弹性成像损失进行训练。通过 Tikhonov 正则化 [21, 22] 稳定学习过程，其中正则化参数以分布式方式定义为一个独立的神经网络，并与待求物理量同时训练。这种独特的

*通讯作者：电话 303-492-2027，电子邮箱 fatemeh.pourahmadian@colorado.edu

借助神经网络，无需先验估计即可学习正则化场；在反演多保真实验数据时，这一做法被证明简便、有效且极具启发性。

物理信息神经网络（PINN）近来备受关注，因为它们能够为复杂偏微分方程系统提供高效且具有预测能力的模型 [10] ，而这类模型迄今已在线性椭圆型和抛物型偏微分方程的背景下获得严格的理论论证支持 [23]。鉴于此类网络训练具有多任务性质，且在对刚性和高度振荡的偏微分方程进行建模时面临诸多挑战 [12, 24], ，近期的大部分研究工作都集中于：（a）对损失函数进行自适应权衡 [12, 25, 26, 27, 28, 29, 13], ；（b）解决梯度病态问题 [24, 13] ，例如采用学习率退火 [30] 和定制网络架构 [11, 31, 32]。在本研究中，我们最初采用精简的实现方式，利用合成波形和实验波形训练物理信息神经网络，但几乎无一例外地以失败告终。进一步调查发现，主要障碍包括：（a）大波数导致梯度场的范数较高；（b）实验室实验涉及高阶控制偏微分方程；（c）损失函数中的目标不平衡。我们尝试分布式重建不连续偏微分方程参数时，这些问题变得更加突出；在实验室实验中，测量数据还受到污染且不光滑。以下措施有效应对了其中一些挑战：（i）在特定尺度框架下训练物理信息神经网络，其中主导波数作为参考长度尺度；（ii）使用波数相关的 Sobolev 范数量化数据失配；（iii）利用控制偏微分方程中的惯性项，自然平衡损失函数中的各项目标；（iv）在训练前对实验数据进行去噪。

本文结构如下。第 2 节阐述与合成实验和实验室实验相关的直接散射问题，并概述数据反演逻辑。第 3 节介绍直接反演和物理信息神经网络的计算实现，利用面内位移场重建均匀及非均匀模型中 L´ame 参数的分布。第 4 节详细介绍实验室实验、尺度律、信号处理，以及反平面质点速度场的反演，以恢复薄板弯曲波相关物理参数的分布。随后通过一系列互补实验验证重建结果。

2. 概念

本节将介绍：(i) 适用于后续（合成及实验）全场表征的通用直接散射问题形式，以及 (ii) 数据反演逻辑。

2.1. 正向散射问题

考虑超声测试，其中试样 $\Pi \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2$, 3 在入射面 $S^{\mathrm{inc}} \subset \Pi$ 上受到（边界或内部）激励，诱发的（质点位移或速度）场 $\mathbf{u}$: $\Pi \times [0\ T] \to \mathbb{R}^{N_\Lambda}$ ($N_\Lambda \leqslant d$) 在观测面 $S^{\mathrm{obs}} \subset \Pi$ 上、长度为 T 的时间范围内被采集。这里， Π 是一个开集，其闭包记为 $\overline{\Pi}$，传感配置满足 $S^{\mathrm{inc}} \cap S^{\mathrm{obs}} = \emptyset$。在此条件下，观测波形的频谱 $\hat{}\mathbf{u}$: $S^{\mathrm{obs}} \times \Omega \to \mathbb{C}^{N_\Lambda}$ 由下式决定

$$\Lambda[\hat{\mathbf{u}}; \boldsymbol{\vartheta}](\boldsymbol{\xi}, \omega) = \mathbf{0}, \quad \hat{\mathbf{u}} := \mathscr{F}[\mathbf{u}](\boldsymbol{\xi}, \omega), \quad \boldsymbol{\xi} \in S^{\mathrm{obs}}, \omega \in \Omega, \tag{1}$$

其中， Λ （大小为 $N_\Lambda \times 1$ ）表示频率空间中的微分算子； $\mathscr{F}$ 表示时间傅里叶变换；维度为 $N_\vartheta \times 1$ 的 $\boldsymbol{\vartheta}$ 是相关几何参数和弹性参数的向量，例如 Lam´e 常数和质量密度； $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$ 是位置向量； $\omega > 0$ 是指定带宽 Ω 内波动的频率。

2.2. 量纲平台

通过将 $\rho_\circ$、 $\sigma_\circ$和 $\ell_\circ$ 分别确定为质量密度、弹性模量和长度的参考尺度 [33] ，即可将式（1）中的所有量转换为无量纲形式；这些参考尺度的具体取值将在后文说明。

2.3. 数据反演

给定 $S^{\mathrm{obs}} \times \Omega$ 上的全波形数据 $\hat{}\mathbf{u}$，目标是确定 S^{obs} 上材料属性的分布。为此，本研究采用两种基于神经网络的重建范式，即：(i) 直接反演，以及 (ii) 基于物理的神经网络。受弹性成像

方法启发，(i) 中的 [18, 19], 感兴趣量由 $S^{\text{obs}} \times \Omega$ 上的神经映射确定，这些映射使式 (1) 中 Λ 的正则化测度最小化。然而，(ii) 中的神经网络在设计上是波形数据（即 $\hat{\mathbf{u}}$）的预测映射，通过最小化数据失配，并将式 (1) 作为软约束或硬约束。在此设定下，Λ 的未知属性可在训练期间通过多任务优化，作为（数据）网络的分布参数加以恢复。下文将在简要回顾相关网络后，详细说明 (i) 和 (ii) 中采用的代价函数。

2.3.1. 波形与参数网络

激光超声实验在 $S^{\text{obs}} \times \Omega$ 上提供了密集的数据集。鉴于多层感知机（MLP）具有密集的取值范围 [34]，因此可能适合用于逼近复杂波场和分布式偏微分方程参数。此外，这种架构已在物理信息神经网络框架 [15] 中的众多应用中证明了其有效性。在本研究中，MLP 既用作数据映射，也用作属性映射；其输入由离散化的空间坐标和频率坐标（$\boldsymbol{\xi}_i, \omega_j$）、 $i = 1, 2, \ldots, N_\xi$, $j = 1, 2, \ldots, N_\omega$, 以及不同的实验参数（例如源位置）组成，这些参数被提取为域 $\mathscr{T}$ 上的一个向量 τ_k，其中 $k = 1, 2, \ldots, N_\tau$；输出则表示波形数据 $\mathscr{D}_{ijk} = [\Re\hat{\mathbf{u}}\ \Im\hat{\mathbf{u}}](\boldsymbol{\xi}_i, \omega_j; \tau_k) \in \mathbb{R}^{N_\Lambda} \times \mathbb{R}^{N_\Lambda}$，和/或待求的力学性能 $\mathscr{P}_{ijn} = [\Re\vartheta_n, \Im\vartheta_n](\boldsymbol{\xi}_i, \omega_j) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, $n = 1, 2, \ldots, N_\vartheta$。请注意，根据 [35], ，将式（1）中的实部 $\Re$ 和虚部 $\Im$ 以及每个复值变量分离，因此正问题和反问题都被重新表述为实值量。在此设定下，每个含有 N_l 个神经元的全连接多层感知机层都与前向映射 Υ_l: $\mathbb{R}^{N_{l-1}} \to \mathbb{R}^{N_l}$ 相关联，

$$\Upsilon_l(\boldsymbol{x}^{l-1}) \;=\; \tanh(\boldsymbol{W}^l \boldsymbol{x}^{l-1} + \boldsymbol{b}^l), \quad \boldsymbol{x}^{l-1} \in \mathbb{R}^{N_{l-1}}, \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{W}^l \in \mathbb{R}^{N_l \times N_{l-1}}$ 和 $\boldsymbol{b}^l \in \mathbb{R}^{N_l}$ 分别表示 l^{th} 层的权重和偏置。连续复合 Υ_l（$l = 1$、2、.....、N_m）构建网络映射，其中 N_m 表示层数。

2.3.2. 直接反演

受弹性成像方法的逻辑启发，图1所示的直接反演方法利用测试数据所蕴含的主导阶物理原理，恢复空频域（即测量域）内相关物理量的分布。基于机器学习的直接反演包括三个步骤：(a) 根据式(1)中的（n阶）控制偏微分方程，对 $S^{\text{obs}} \times \Omega$上的（n次可微）波形$\hat{\mathbf{u}}$ 进行谱去噪和微分；(b) 构建适当的多层感知机映射，以估计正问题的未知物理参数分布以及反问题解的正则化参数；(c) 通过将数据正则化拟合到相应的偏微分方程，训练多层感知机。

请注意，合成数据集——例如通过计算机建模或制造解法生成的数据集——通常因数值积分或假设解的解析形式而具有光滑性，因此可直接用于 (c) 中的拟合过程。

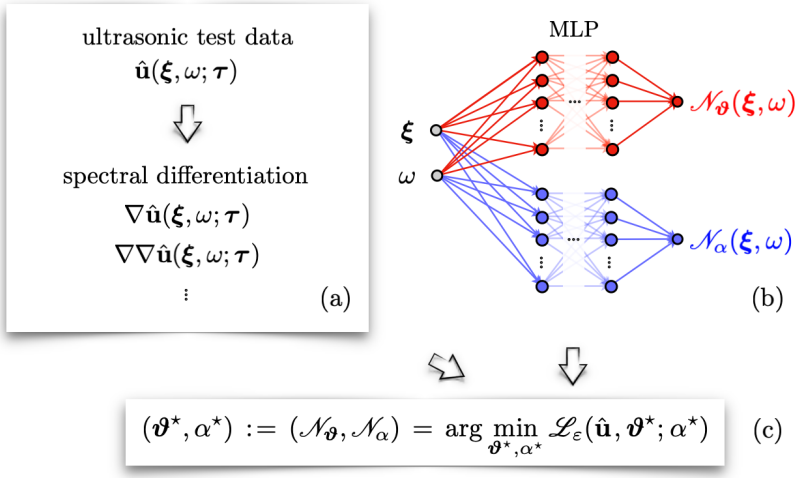


图 1：直接反演：(a) 根据算子 Λ 对全场数据进行基于快速傅里叶变换的空间微分；(b) 在各自的定义域上，使用多层感知机近似未知的偏微分方程和正则化参数（$\boldsymbol{\vartheta}$, α）；(c) 根据公式 (3)，通过最小化弹性成像损失 $\mathscr{L}_\varepsilon$ 来训练多层感知机。

然而，实验室测试数据通常会受到噪声和不确定性的影响，因此，谱微分对于满足 (c) 中的光滑性要求至关重要。实验数据的四级信号处理与 [36,第 3 节1] 中的处理过程基本一致，为完整起见，现概述如下：(1) 在每个接收点，对测得的时间信号应用与激励频谱相符的带通滤波器；(2) 随后对获得的时间平滑信号进行微分或积分，以得到相关场变量；(3) 在每个时间快照上，先应用中值滤波器和移动平均滤波器进行空间平滑，再计算处理后波形在空间上的傅里叶表示；(4) 根据相关物理定律，可在傅里叶空间中对所得平滑场进行任意次数的解析微分，为步骤 (c) 中的全场重建做准备。需要指出的是，实验数据可能存在固有的不连续性，例如由材料非均质性或接触界面导致的情况。在这种情况下，必须在 S^{obs} 中完成不连续面的几何重建后，按分段方式实施步骤 (3) 中的空间平滑。借助全场测量，这一过程相当直接，参见例如 [36, 第 3 节2]。

接下来，如第 2.3.1 节所述，采用全连接多层感知机网络 $\boldsymbol{\vartheta}$ 对未知偏微分方程参数 $\boldsymbol{\vartheta}^\star$ 进行近似：$=\mathscr{N}_{\boldsymbol{\vartheta}}(\boldsymbol{\xi},\ \omega)$。通过最小化损失函数来训练该网络

$$\mathscr{L}_\varepsilon(\hat{\mathbf{u}},\boldsymbol{\vartheta}^\star;\alpha)\ =\ \|\Lambda(\hat{\mathbf{u}};\boldsymbol{\vartheta}^\star)\|^2_{L^2(S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\times\mathscr{T})^{N_\Lambda}}\ +\ \|\alpha\mathbb{1}_{\vartheta}\odot\boldsymbol{\vartheta}^\star\|^2_{L^2(S^{\mathrm{obs}}\times\Omega)^{N_{\vartheta}}},\tag{3}$$

其中，$\mathbb{1}_{\vartheta}$ 表示维度为 $N_{\vartheta}\times 1$ 的全 1 向量，$\odot$ 表示（逐元素）哈达玛积。这里，基于式 (1) 的偏微分方程残差通过未知参数的范数进行惩罚。注意，后者是神经网络权重和偏置的函数，这可能有助于在优化过程中稳定多层感知机估计值。鉴于其已确立的正则化性质，此类 Tikhonov 型泛函在波形层析成像应用中十分常见 [37, 38, 39] [21, 22]。在此框架下，$\mathbb{R}\ni\alpha>0$ 为正则化参数，可通过三种方式确定，即：(i) Morozov 偏差原理 [40, 41], ；(ii) 将其设定为 $\boldsymbol{\vartheta}^\star$网络的（常数或分布式）参数，随后在训练过程中进行学习；以及 (iii) 将其作为单独的多层感知机网络 $\alpha^\star:\ =\mathscr{N}_\alpha(\boldsymbol{\xi},\ \omega)$ 进行独立重建，如图 1(b) 所示，并通过最小化式 (3) 与 $\boldsymbol{\vartheta}^\star$ 同时训练。在本研究中，基于 (ii) 和 (iii)，对合成数据和实验室测试数据采用了直接反演，分别使用 $\alpha=0$ 和 $\alpha>0$。研究一致发现，正则化参数 α 在控制多层感知机估计值方面起着关键作用。在场 $\hat{}\mathbf{u}$ 在某些邻域内强烈偏振或接近于零的情况下，这一点尤为明显，因为这会导致不稳定性，即这些区域中的 $\boldsymbol{\vartheta}^\star$ 估计值非常大。因此，本文所有直接反演结果均对应于由多层感知机网络 $\alpha^\star$确定的 $\alpha>0$ 情形。

2.3.3. 物理信息神经网络

通过利用潜在物理机制的知识，物理信息神经网络 [14, 15] 能够为复杂的偏微分方程系统构建具有预测能力的高效神经网络模型。据此，本文按照图 2 设计了一个多任务学习过程，其中：(a) 场变量 $\hat{}\mathbf{u}$ ——即 $S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\ \times\mathscr{T}$ 上的测量数据——由多层感知机映射 $\hat{}\mathbf{u}^\star:=\mathscr{N}_{\hat{\mathbf{u}}}(\boldsymbol{\xi},\omega;\ \boldsymbol{\tau})$ 建模，该映射配有与损失函数 (4) 相关的辅助参数 $\gamma(\boldsymbol{\xi},\omega;\ \boldsymbol{\tau})$；(b) 物理未知量 $\boldsymbol{\vartheta}$ 既可以定义为 $\hat{}\mathbf{u}^\star$的参数，如图 2 (i) 所示，也可以定义为一个独立的多层感知机 $\boldsymbol{\vartheta}^\star:\ =\mathscr{N}_{\boldsymbol{\vartheta}}(\boldsymbol{\xi},\omega)$，如图 2 (ii) 所示；(c) 通过最小化数据失配度量来学习多层感知机及其相关参数，同时将控制偏微分方程作为软／硬约束，并通过自动微分 [42]计算 $\hat{}\mathbf{u}^\star$的空间导数。需要指出的是，在本研究中，所有多层感知机网络均定义在 $S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\ \times\mathscr{T}$（或其子集）上，其中 $S^{\mathrm{obs}}\cap\partial\Pi=\emptyset$。因此，初始条件和边界条件——它们本可作为损失函数中的附加约束 [15], ——在此处均予以忽略。在这种设定下，物理信息神经网络损失的形式为

$$\mathscr{L}_{\varpi}(\hat{\mathbf{u}}^\star,\boldsymbol{\vartheta}^\star|\gamma)\ =\ \|\hat{\mathbf{u}}-\hat{\mathbf{u}}^\star\|^2_{\mathfrak{N}(S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\times\mathscr{T})^{N_\Lambda}}\ +\ \|\gamma\mathbb{1}_\Lambda\odot\Lambda(\hat{\mathbf{u}}^\star;\boldsymbol{\vartheta}^\star)\|^2_{L^2(S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\times\mathscr{T})^{N_\Lambda}},\ \mathfrak{N}=L^2,\widehat{H}^\iota,\ \iota\leqslant\mathrm{n},\tag{4}$$

$\hat{}$其中 $\mathbb{1}_\Lambda$ 是一个由 1 构成的 $N_\Lambda\times 1$ 向量；n 是 Λ的阶数，H^ι 表示定义如下的自适应 H^ι 范数

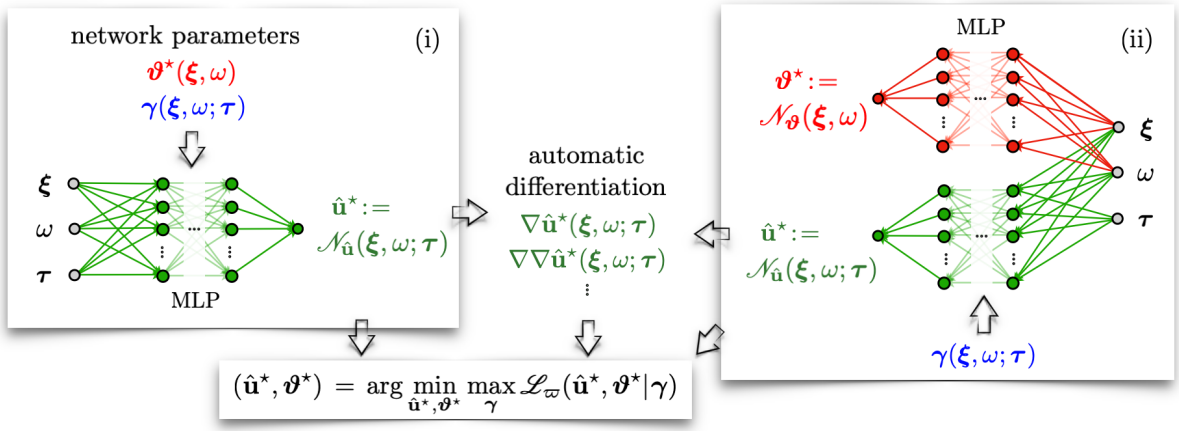


图 2：具有分布参数的物理信息神经网络（PINN）的两种逻辑：（i）通过多层感知机映射对测试数据 $\hat{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\xi},\omega;\boldsymbol{\tau})$ 建模，而未知物理参数 $\boldsymbol{\vartheta}$ – 在 $S^{\text{obs}}\times\Omega$ 上，以及损失函数权重 γ – 在 $S^{\text{obs}}\times\Omega\times\mathscr{T}$ 上，均定义为网络参数；（ii）$\hat{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\xi},\omega;\boldsymbol{\tau})$ 和 $\boldsymbol{\vartheta}(\boldsymbol{\xi},\omega)$ 分别由独立的多层感知机识别，而 γ 是 $\mathcal{N}_{\hat{\mathbf{u}}}$ 的一个参数。随后，通过在数据和偏微分方程参数空间中最小化式（4）的 $\mathscr{L}_{\varpi}$，训练（i）和（ii）中的多层感知机。

$$\|\cdot\|_{\widehat{H}^\iota} := \sqrt{\sum_{1\leqslant|\boldsymbol{e}|\leqslant\iota}\gamma^{\boldsymbol{e}}\|\nabla^{\boldsymbol{e}}(\cdot)\|^2_{L^2}+\|\cdot\|^2_{L^2}}, \quad \nabla^{\boldsymbol{e}} = \frac{\partial^{|\boldsymbol{e}|}}{\partial\xi_1^{e_1}\partial\xi_2^{e_2}\cdots\partial\xi_d^{e_d}}, \quad |\boldsymbol{e}| := \sum_{\mathrm{i}=1}^{d} e_{\mathrm{i}}. \tag{5}$$

这里，$\boldsymbol{e} := \{e_1, e_2, \dots e_d\}$ 是一个整数向量 $e_{\mathrm{i}}\geqslant 0$。若满足 $\forall\boldsymbol{e},\ \gamma^{\boldsymbol{e}}=1$，则根据定义，$H^\iota$ 等于 H^ι [43]。然而需要注意的是，在高波数下，H^ι 由最高阶导数 $\nabla^{\boldsymbol{e}}\hat{\mathbf{u}}^\star, |\boldsymbol{e}|=\iota$ 主导；由于自动微分会造成不受控的误差放大，这可能使训练过程变得复杂（甚至导致训练失败），尤其是在训练早期的轮次中。可通过对式 (5) 中的导数进行适当加权来解决这一问题。鉴于 [44, 37], 中的频率相关索博列夫范数，一种可行的策略是采用如下波数相关权重

$$\gamma^{\boldsymbol{e}} = \left(\frac{1}{\kappa_1^{e_1}\kappa_2^{e_2}\cdots\kappa_d^{e_d}}\right)^2, \quad 1\leqslant|\boldsymbol{e}|\leqslant\iota,$$

其中，κ_{i} 是沿 ξ_{i} 的波数度量，$\mathrm{i}=1,\dots,d$。在这种设定下，式（5）中导数的加权范数与数据失配的 L^2 范数大致处于同一数量级。要自动达到这一效果，还可以将参考尺度 ℓ。设为满足 $\kappa_{\mathrm{i}}\sim 1$。请注意，加权范数会直接向物理信息神经网络提供关于“预期”场导数的信息，同时防止其不受控制地增大。这可能有助于稳定学习过程，因为这些导数通过 $\Lambda(\hat{\mathbf{u}}^\star;\boldsymbol{\vartheta}^\star)$ 直接参与物理信息神经网络损失。需要指出的是，当 $\mathfrak{N}=\widehat{H}^\iota$ 在式（4）中时，导数 $\nabla^{\boldsymbol{e}}\hat{\mathbf{u}}$ 的“真实”估计值可按照第 2.3.2 节所述，通过谱微分获得。

式 (4) 中的拉格朗日乘子 [45, 46] $\gamma(\boldsymbol{\xi},\ \omega;\ \boldsymbol{\tau})$ 对于在训练过程中平衡损失分量至关重要。然而，其最优值在很大程度上取决于 (a) Λ [12]的性质，以及 (b) 未知参数 $\boldsymbol{\vartheta}$的分布。需要指出的是，在本研究中，设置 $\gamma=1$ 几乎导致所有 PINN 的合成和实验实现均告失败。损失函数权重的确定一直是近期广泛研究的主题 [12, 25, 47, 26, 27, 28]。一种系统性方法是自适应 SA-PINNs [12]，其中乘子 $\gamma(\boldsymbol{\xi},\ \omega;\ \boldsymbol{\tau})$ 是 $\hat{\mathbf{u}}^\star$ 的分布参数，其值依据极小极大加权范式在每个训练轮次中更新。在此框架下，数据网络（和参数网络）通过最小化相对于 $\hat{\mathbf{u}}^\star$ 和 $\boldsymbol{\vartheta}^\star$的 $\mathscr{L}_{\varpi}$ 进行训练，同时最大化相对于γ 的损失，如图 2 所示。

根据物理信息神经网络的主要目标，可以选择非自适应加权或自适应加权。更具体地说，如果目的是通过神经网络进行高保真正向建模，其中 $\boldsymbol{\vartheta}$事先已知，且物理信息神经网络旨在充当 Λ的预测代理模型，那么以约束优化为基础的思路（例如极小极大加权）在理论上是合理的。然而，如果主要目标是反向求解，即根据“真实世界”或实验室测试数据识别 $\boldsymbol{\vartheta}(\boldsymbol{\xi},\ \omega)$，尤其是在对 $\boldsymbol{\vartheta}$ 光滑性的任何假设和/或 Λ 的适用性可能（至少在局部）不成立的情况下，例如由于未知的材料

非均质性或界面不连续性，那么试图在 $S^{\text{obs}} \times \Omega \times \mathscr{T}$ 上处处强制满足 Λ（通过逐点自适应加权），可能导致不稳定性，并使数据反演失败。在这种情况下，非自适应加权可能更合适。有鉴于此，下文中的 γ 是一种非自适应权重，通过利用偏微分方程结构来自然平衡各项损失目标。

3. 合成实现

通过一系列数值实验，研究了基于直接反演和物理信息神经网络的全场表征。本节中的波形数据由 FreeFem++ [48]代码生成，该代码是 [49]的一部分。

3.1. 问题陈述

图 3(a) 按照两个线性、弹性、分段均匀且各向同性的试样，对平面应变波动进行建模。将激励频率记为 ω，令 $\ell_r = \frac{2\pi}{\omega}\sqrt{\mu_r/\rho_r}$、$\rho_r = 1$ 和 $\mu_r = 1$分别为长度、质量密度和应力的参考尺度。在此框架下，两个试样的尺寸均为 16×16，且密度均匀，为 $\rho = 1$。第一个试样 $\Pi_1 \subset \mathbb{R}^2$ 由恒定的 Lam´e 参数 $\mu_\circ = 1$ 和 $\lambda_\circ = 0.47$表征；第二个试样 $\Pi_2 \subset \mathbb{R}^2$ 由四个完美黏结的均匀组分 Π_{2_j} 组成，其参数为 $\mu_j = j$ 和 $\lambda_j = 2j/3$、$j = \{1,2,3,4\}$，满足 $\Pi_2 = \bigcup_{j=1}^{4} \Pi_{2_j}$。因此，剪切波速和纵波波速分别为：在 $\overline{\Pi_1}$中，$\mathsf{c}_{\text{s}}^{\circ} = 1$、$\mathsf{c}_{\text{p}}^{\circ} = 1.57$；在 Π_{2_j}中，$\mathsf{c}_{\text{s}}^{j} = \sqrt{j}$、$\mathsf{c}_{\text{p}}^{j} = 1.63\sqrt{j}$。每次数值实验均通过位于 S^{inc}上的点源，在 $\omega = 3.91$ 处施加面内谐波激励（14×14 正方形的周边，该正方形以原点为中心）。随后，在 Π_α 中计算得到位移场 $\boldsymbol{u}^\alpha = (u_1^\alpha,\ u_2^\alpha)$、$\alpha = 1,\ 2$，其计算区域为 S^{obs}（边长为 8×8的同心正方形），使得

$$
\begin{aligned}
&\mu_\alpha \Delta \boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi}) + (\lambda_\alpha + \mu_\alpha)\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi}) + \rho\omega^2\boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi}) = \delta(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{x})\boldsymbol{d}, \qquad \boldsymbol{\xi}\in\Pi_\alpha, \boldsymbol{x}\in S^{\text{inc}},\\
&\left[\lambda_\alpha \nabla\cdot\boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{I}_2 + 2\mu_\alpha\nabla_{\text{sym}}\boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi})\right]\cdot\boldsymbol{n}(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{\xi}\in\partial\Pi_\alpha,
\end{aligned}
\tag{6}
$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 分别表示源位置和极化向量；$\boldsymbol{n}$ 是试样外表面的单位外法向量，并且

$$
\begin{cases}
\mu_\alpha = \mu_\circ,\ \lambda_\alpha = \lambda_\circ, & \alpha = 1\\
\mu_\alpha = \mu_j,\ \lambda_\alpha = \lambda_j, & \alpha = 2 \wedge \boldsymbol{\xi}\in\Pi_{2_{j\in\{1,2,3,4\}}}
\end{cases}.
$$

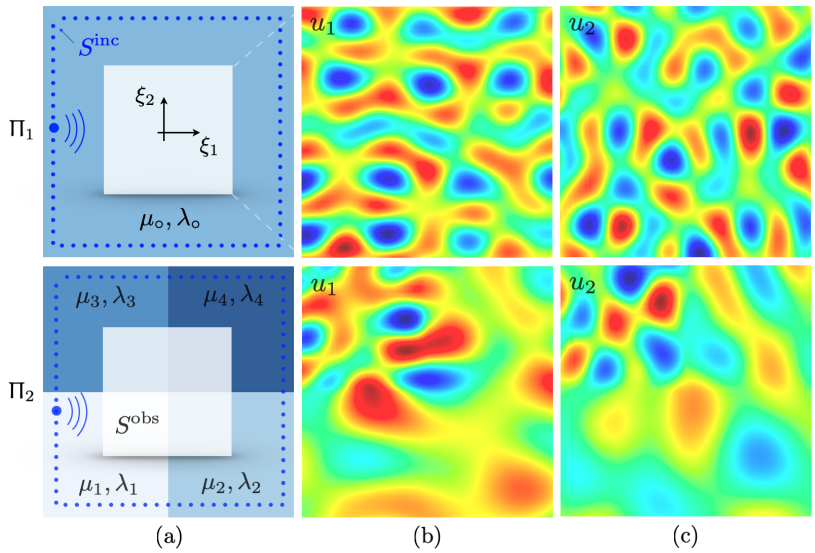


图 3：模拟均匀（左上）和非均匀（左下）试样中平面应变波动的合成实验：(a) 测试配置，模型由位于 S^{inc} 上的点源以频率 ω 激励，并在 S^{obs} 上沿 ξ_1 和 ξ_2 计算所产生的位移场 $\boldsymbol{u}$，分别如 (b) 和 (c) 所示。

当 $\alpha = 2$时，式（6）中的第一个方程应理解为关于 Π_{2_j}、 $j = \{1,2,3,4\}$的四个控制方程的简写，并根据具体情况补充跨越$\partial\Pi_{2_j}\backslash\partial\Pi_2$ 的位移和牵引力连续性条件。

在此设定下，通用形式 (1) 可表示为如下形式

$$\begin{aligned} \Lambda &= \Lambda_\alpha := \mu_\alpha\Delta + (\lambda_\alpha + \mu_\alpha)\nabla\nabla\cdot + \rho\omega^2\boldsymbol{I}_2, && \alpha = 1,2, \\ \hat{\mathbf{u}} &= \boldsymbol{u}^\alpha(\boldsymbol{\xi},\omega;\boldsymbol{\tau}), \quad \boldsymbol{\vartheta} = [\mu_\alpha,\lambda_\alpha](\boldsymbol{\xi},\omega), && \boldsymbol{\xi}\in S^{\mathrm{obs}},\, \omega\in\Omega,\boldsymbol{\tau}\in\mathscr{T}, \end{aligned} \tag{7}$$

其中， $\boldsymbol{I}_2$为二阶单位张量； $\boldsymbol{\tau} = (\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{d}) \in S^{\mathrm{inc}}\times\mathscr{B}_1 = \mathscr{T}$，其中 $\mathscr{B}_1$表示极化方向的单位圆。请注意，此处将 ρ 视为一个已知参数。

在数值实验中， S^{inc}（分别 S^{obs}）离散为由均匀网格上的 32 个（分别 50×50）点构成的网格，而 Ω 和 $\mathscr{B}_1$ 分别在 $\omega = 3.91$ 和 $\boldsymbol{d} = (1,\ 0)$ 处采样。

本研究中的所有反演均在 PyTorch 框架 [50]中实现。

3.2. 直接反演

采用第 2.3.2 节的三层逻辑来重建 μ_α 和 λ_α, $\alpha = 1,\ 2$ 在 S^{obs}上的分布，具体包括：(a) 对位移场 $\boldsymbol{u}^\alpha$ 进行谱微分，以便按照 (6) 计算 $\Delta\boldsymbol{u}^\alpha$ 和$\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\alpha$；(b) 构建三个正定多层感知器网络 $\mu^\star$、 $\lambda^\star$和 $\alpha^\star$，每个网络均包含一个由 64 个神经元组成的隐藏层；(c) 通过 ADAM算法 [51]，最小化 (3) 和 (7) 中的 $\mathscr{L}_\varepsilon$ ，以此训练多层感知机。为避免 $\Delta\boldsymbol{u}^\alpha$和 $\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u}^\alpha$中单边快速傅里叶变换微分所导致的近边界误差，训练时采用同心的 40×40配点子集对 S^{obs}进行采样。还需指出，在非均质情形下，即 $\alpha = 2$，$\partial\Pi_{2_{j\in\{1,2,3,4\}}}$两侧导数的不连续性要求采用分段谱微分。根据第 2.3.1 节， $\mathscr{P}^\star = \mathscr{N}_{\mathscr{P}}(\boldsymbol{\xi},\ \omega)$、 $\mathscr{P} = \mu,\ \lambda$以及 $\alpha^\star = \mathscr{N}_\alpha(\boldsymbol{\xi},\ \omega)$ 的输入大小为 $N_\xi N_\tau\times N_\omega = 1600N_s\times1$，其中 $N_s\leqslant32$为用于生成不同训练波形的模拟次数，即源位置数。在此设定下，由于感兴趣的物理量与 $\boldsymbol{\tau}$无关，多层感知机的实值输出维度为 1600×1，从而可在 S^{obs}上的指定采样点处提供 L´ame 参数和正则化参数的局部估计。每个训练轮次均使用完整数据集，学习率为 0.005。

在本研究中，重构误差以法向失配来衡量

$$\Xi(\mathrm{q}^\star) = \frac{\|\mathrm{q}^\star - \mathrm{q}\|_{L^2}}{\|\mathrm{q}\|_{L^\infty}}, \tag{8}$$

其中 $\mathrm{q}^\star$ 是对某个量的多层感知机估计值，该量的“真实”值为 q。

令 S^{inc} 在一个点处采样，即 $N_s = 1$，从而在 Π_α, $\alpha = 1,2$ 中进行一次正向模拟，生成训练数据集。所得重建结果见图4和图5。从两幅图中可以明显看出，单源重建在近零位移的位置处失效，这或许可以解释恢复得到的正则化参数 $\alpha^\star$为何相对较大。表1详细列出了真实值，以及根据图4（*resp.* 图5）得到的 Π_1（*resp.* Π_{2_j}针对 $j = 1,2,3,4$）的重建 L´ame 分布 $\boldsymbol{\vartheta}^\star = (\mu^\star,\lambda^\star)$的均值和标准差。

该问题可以通过丰富训练数据集来解决，例如增加 N_s。图6和图7展示了在 $N_s = 5$ 个源点处对 S^{inc} 进行采样时的重建结果。重建分布的均值和标准差见表2。值得注意的是，在这种情况下，所识别的正则化参数 $\alpha^\star$取值要小得多——相比图4和图5中的取值而言。这更接近正向模拟中计算误差的量级。

为考察噪声对重建的影响，我们向用于生成图6和图7的多源数据集添加了5%的白噪声。含噪数据的后续直接反演结果见图8和图9，相关统计数据列于表3。请注意，谱微分作为直接反演的第一步，在波形去噪以及随后对重建过程进行正则化方面起着关键作用。这或许可以解释为何在图8和图9的含噪数据情况下，多层感知机恢复的 $\alpha^\star$幅值较低。尽管如此，噪声的存在会影响经处理的空间位移场的傅里叶表示中各项的幅值，进而影响其组成；该傅里叶表示用于微分。这反过来可能导致重建场中出现波动。

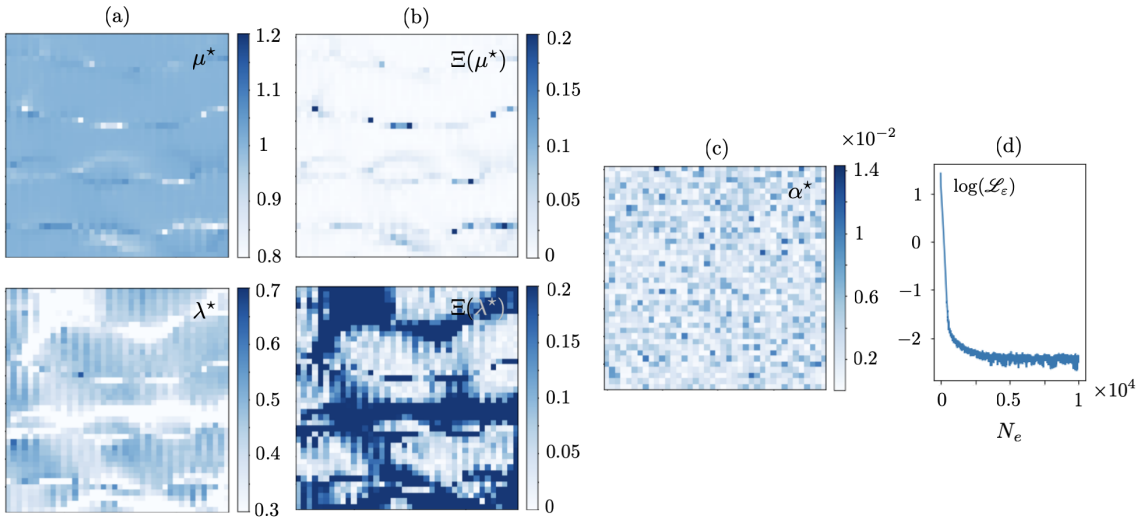


图 4：使用来自单一源的无噪声数据直接反演 Π_1 中的 L´ame 参数：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$，(b) 相对于真实值 $\mu_\circ = 1$ 和 $\lambda_\circ = 0.47$ 的重构误差 (8)，(c) 多层感知机恢复的正则化参数分布 $\alpha^\star$，以及 (d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$ 对数刻度下的训练轮次 N_e，见日志 $= \log_{10}$。

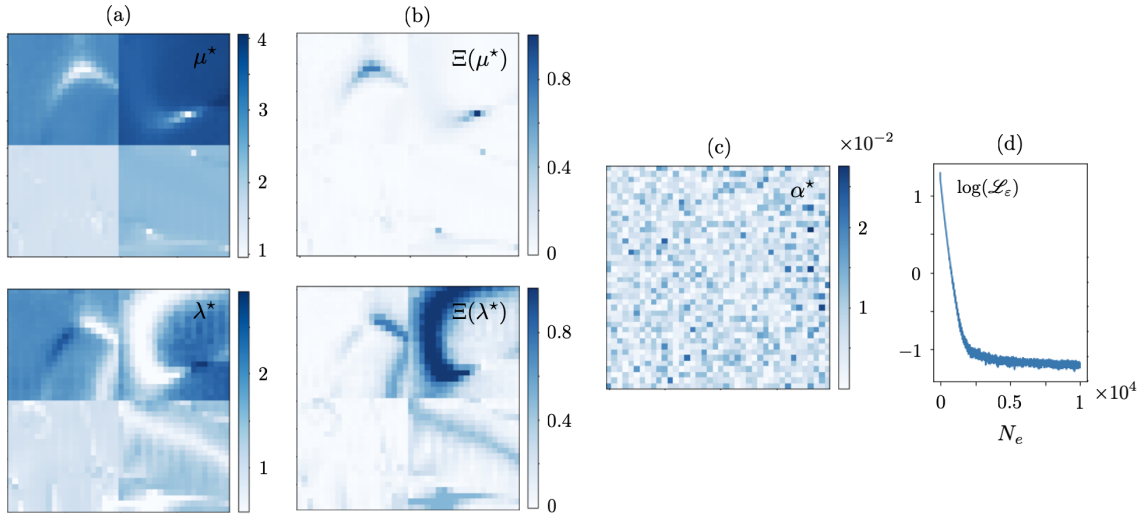


图 5：使用来自单一源的无噪声数据直接反演 Π_2 中的 L´ame 参数：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$，(b) 相对于真实值 $\mu_j = j$ 和 $\lambda_j = 2j/3$ 的重构误差 (8)，$j = \{1, 2, 3, 4\}$，(c) 多层感知机恢复的正则化参数 $\alpha^\star$，以及 (d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$ 训练轮次 $N_{e\circ}$

表1：重建的L´ame分布的均值 $\langle\cdot\rangle_{\mathscr{D}}$ 和标准差 $\sigma(\cdot|_{\mathscr{D}})$，适用于 $\mathscr{D} = \Pi_1$，$\Pi_{2_{j=1,\ 2,\ 3,\ 4_\circ}}$ 此处，直接反演应用于来自单一源的无噪声数据，如图4和图5所示。

$\mathscr{D}$	Π_1	Π_{2_1}	Π_{2_2}	Π_{2_3}	Π_{2_4}
μ	$\mu_\circ = 1$	$\mu_1 = 1$	$\mu_2 = 2$	$\mu_3 = 3$	$\mu_4 = 4$
$\langle\mu^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	0.998	0.991	1.983	2.825	3.835
$\sigma(\mu^\star\|_{\mathscr{D}})$	0.024	0.083	0.182	0.441	0.325
λ	$\lambda_\circ = 0.47$	$\lambda_1 = 0.67$	$\lambda_2 = 1.33$	$\lambda_3 = 2$	$\lambda_4 = 2.66$
$\langle\lambda^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	0.376	0.615	0.850	1.746	1.412
$\sigma(\lambda^\star\|_{\mathscr{D}})$	0.128	0.161	0.399	0.486	0.864

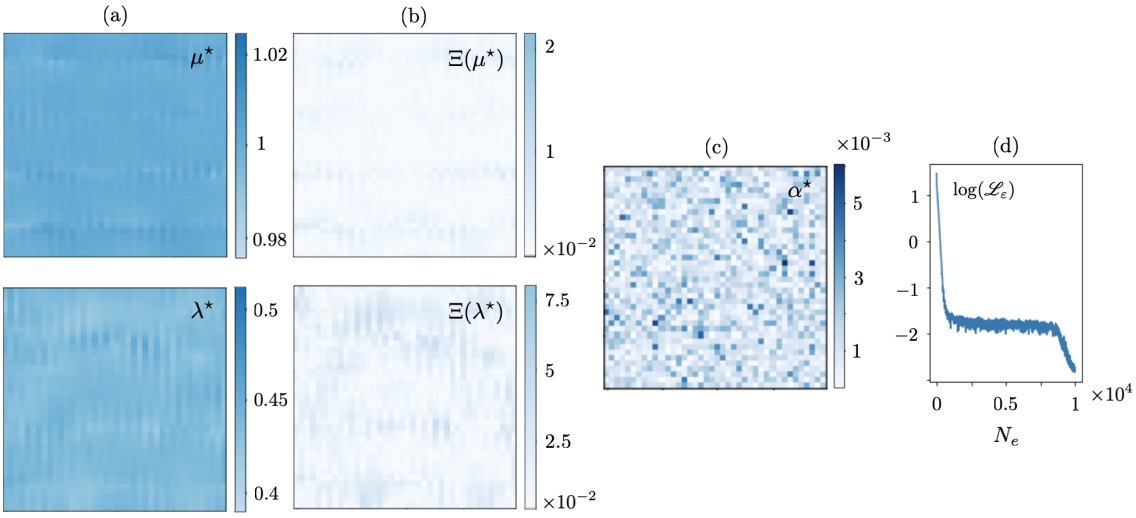


图6：使用来自五次不同模拟的无噪声数据，对 Π_1 中的 L´ame 参数进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$；(b) 相对于真实值 $\mu_\circ = 1$ 和 $\lambda_\circ = 0.47$的重构误差 (8)；(c) 多层感知机恢复的正则化参数 $\alpha^\star$；(d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$ 训练轮次 $N_{e\circ}$

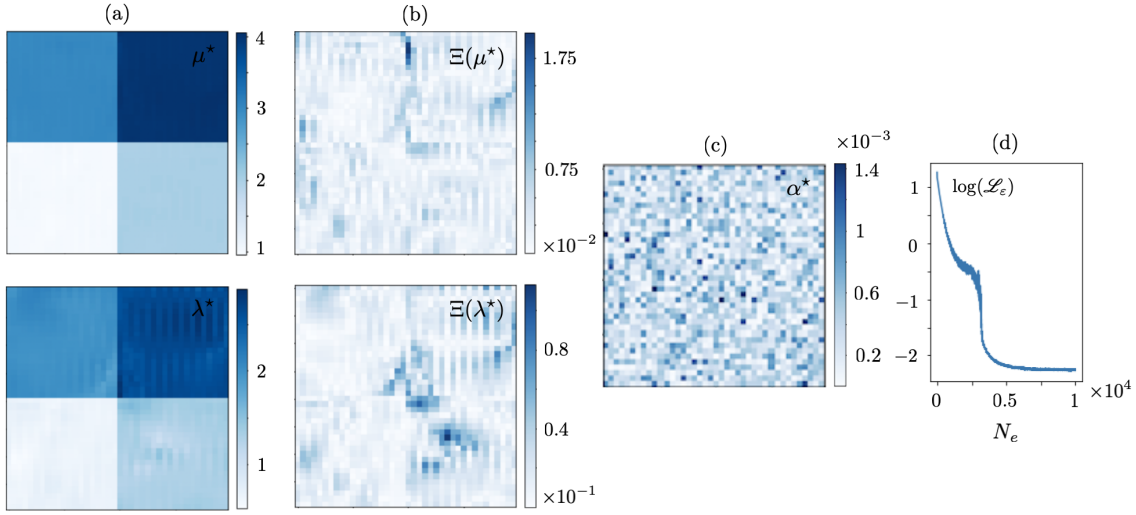


图7：使用五个无噪声数据集，对 Π_2 中的 L´ame 参数进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$和$\lambda^\star$；(b) 相对于真实值 $\mu_j = j$ 和 $\lambda_j = 2j/3$的重构误差 (8) $j = \{1, 2, 3, 4\}$；(c) 多层感知机恢复的正则化参数 $\alpha^\star$；(d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$ 训练轮次 $N_{e\circ}$

表2：根据图6和图7，对五个不同无噪声数据集重建的 L´ame 分布的均值和标准差。

$\mathscr{D}$	Π_1	Π_{2_1}	Π_{2_2}	Π_{2_3}	Π_{2_4}
μ	1	1	2	3	4
$\langle\mu^\star\rangle_\mathscr{D}$	1.000	0.999	2.003	2.999	3.999
$\sigma(\mu^\star\|_\mathscr{D})$	0.001	0.012	0.011	0.012	0.016
λ	0.47	0.67	1.33	2	2.66
$\langle\lambda^\star\rangle_\mathscr{D}$	0.464	0.660	1.302	1.997	2.635
$\sigma(\lambda^\star\|_\mathscr{D})$	0.012	0.039	0.071	0.048	0.068

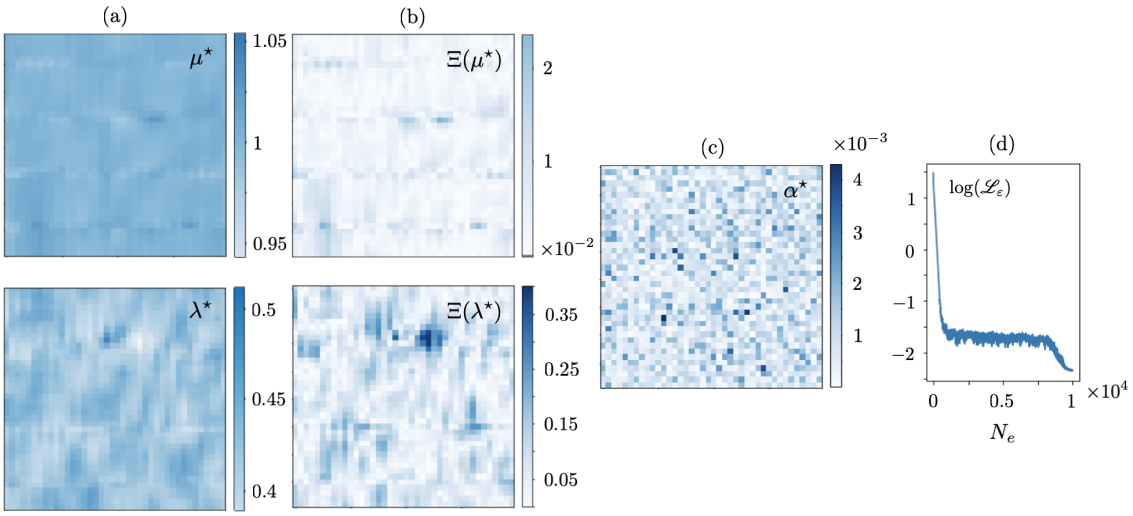


图8：使用受 5% 白噪声扰动的五个数据集，对 Π_1 中的 L´ame 参数进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$，(b) 相对于真实值 $\mu_\circ = 1$ 和 $\lambda_\circ = 0.47$的重构误差 (8)，(c) 多层感知机恢复的正则化参数 $\alpha^\star$，以及 (d) 训练轮次 N_e下的损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$

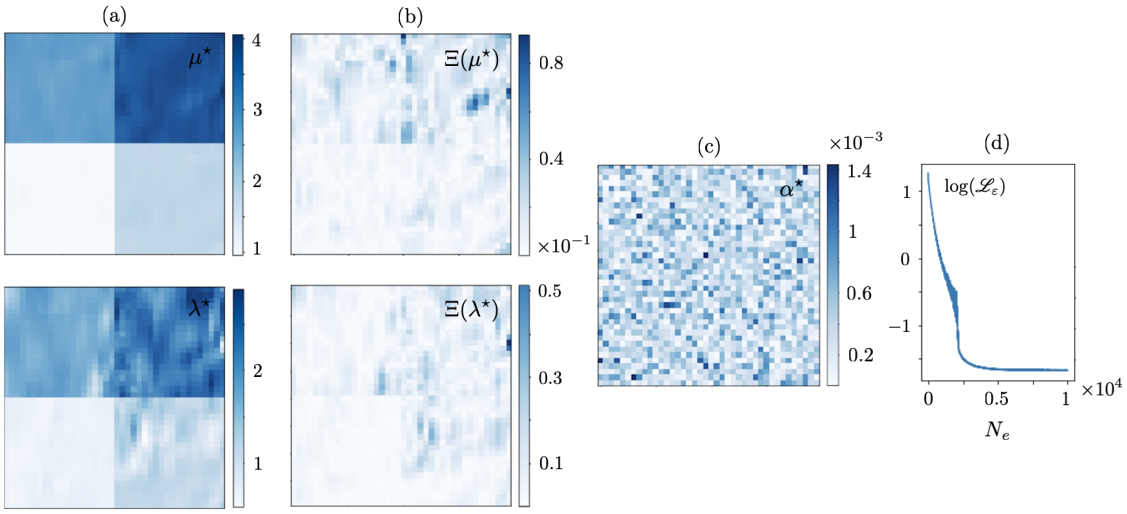


图9：使用受 5% 白噪声扰动的五个数据集，对 Π_2 中的 L´ame 参数进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$，(b) 相对于真实值 $\mu_j = j$和 $\lambda_j = 2j/3$的重构误差 (8) $j = \{1, 2, 3, 4\}$，(c) 多层感知机恢复的正则化参数 $\alpha^\star$，以及 (d) 训练轮次 N_e下的损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ $vs_\circ$

表3：均值和标准 根据图8，由含噪数据重建的 L´ame 分布的标准差和9。

$\mathscr{D}$	Π_1	Π_{2_1}	Π_{2_2}	Π_{2_3}	Π_{2_4}
μ	1	1	2	3	4
$\langle\mu^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	1.001	1.002	2.005	2.996	3.996
$\sigma(\mu^\star\|_{\mathscr{D}})$	0.005	0.016	0.035	0.054	0.088
λ	0.47	0.67	1.33	2	2.66
$\langle\lambda^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	0.462	0.650	1.263	2.006	2.654
$\sigma(\lambda^\star\|_{\mathscr{D}})$	0.042	0.051	0.225	0.182	0.300

3.3. 物理信息神经网络

第 2.3.3 节的学习过程如下：(a) 构建多层感知机网络 $\boldsymbol{u}^{\alpha\star} = \mathscr{N}_{\boldsymbol{u}^\alpha}(\boldsymbol{\xi},\ \omega,\ \boldsymbol{x}\,|\,\gamma,\ \boldsymbol{\vartheta}^\star)$，并赋予其正定参数 γ 和 $\boldsymbol{\vartheta}^\star = (\mu^\star,\ \lambda^\star)$，使输入 $\boldsymbol{x}$ 标记源位置，辅助权重 γ 为非自适应标量；(b) 根据图 2 (i)，$\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$ 可指定为网络的标量或分布参数；(c) 使用第 3.1 节的合成波形，通过 ADAM 优化器最小化 (4) 中的 $\mathscr{L}_\varpi$，以训练 $\boldsymbol{u}^{\alpha\star}$。重建结果在与第 3.2 节相同的一组配点上进行，这些配点对 $S^{\mathrm{obs}}\times\Omega\times\mathscr{T}$进行采样。因此，$\boldsymbol{u}^{\alpha\star}$ 的输入大小为 $N_\xi\times N_\omega\times N_\tau = 1600\times 1\times N_s$，而其输出维度为 $(1600\times 1\times N_s)^2$，用于对采样区域内沿 ξ_1 和 ξ_2 的位移场进行建模。与第 3.2 节类似，每个训练轮次都使用完整数据集进行训练，学习率为 0.005。本节中物理信息神经网络的 PyTorch 实现基于 GitHub 代码仓库 [52]中的现有代码构建。

采用具有三个隐藏层的多层感知机网络 $\boldsymbol{u}^{1\star} = \boldsymbol{u}^{1\star}(\boldsymbol{\xi},\ \omega,\ \boldsymbol{x}\,|\,\gamma,\ \boldsymbol{\vartheta}^\star)$，各层分别包含 20、40 和 20 个神经元，用于映射与频率为$\omega = 3.91$ 、位于 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 \in S^{\mathrm{inc}}$的单个点源相关联的位移场 $\boldsymbol{u}^1$ (以 Π_1 为单位)。L´ame 常数被定义为网络的未知标量 参数，即 $\boldsymbol{\vartheta}^\star = \{\mu^\star, \lambda^\star\}$；拉格朗日乘子 γ 则按以下论述指定。在本节的量纲框架内，参照式 (7)，可以看到，令 $\gamma = \frac{1}{\rho\omega^2}$ (即 $\gamma = 0.065$) 时，损失函数 $\mathscr{L}_\varpi$ 在 4 中的两个组成部分（偏微分方程残差和数据失配）都呈现为位移场方面的某种平衡。这自然有助于在训练过程中使各损失项保持相同的尺度，从而无需调整额外参数 γ，简化学习过程。请注意，$\boldsymbol{u}^{1\star}$ 的输入大小为 $1600\times 1\times 1$，而其输出维度为 $(1600\times 1\times 1)^2$。在此设定下，训练目标有两个：(a) 为 $\boldsymbol{u}^1$构建代理映射；(b) 识别 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$。

图 10 展示了：（i）基于无噪声数据的物理信息神经网络（PINN）估计值在 Π_1 中位移场竖直分量 u_2^1 方面的准确性；以及（ii）自动微分 [42] 根据控制偏微分方程 7 中出现的分量，即 $u^1_{2,\ ij} = \partial^2 u_2^1/(\partial\xi_i\partial\xi_j)$,$i$, $j = 1,\ 2$，捕捉场导数的性能。根据第 2.3.2 节，（ii）中的比较对象是有限元法（FEM）场的谱导数。值得注意的是，与基于傅里叶的微分类似，自动微分中最显著的误差出现在近边界区域，即单侧导数的支撑区域。观察发现，增加训练轮数可以显著减小此类差异的幅度。然而，显著误差的位置仍位于试样外边界或裂纹、材料界面等内部不连续处。图 10 还结合了图 11 的重建结果，其中均质试样的结果为 $(\mu^\star,\ \lambda^\star) = (1.000,\ 0.486)$，其真实拉梅常数为 $(\mu_\circ,\ \lambda_\circ) = (1.0.47)$。通过向与图 10 相关的无噪声数据中加入 5% 的白噪声，考察噪声对训练的影响，结果得到 $(\mu^\star,\ \lambda^\star) = (0.999,\ 0.510)$，如图 12 所示。

接下来，构建具有三个隐藏层（分别包含 120、120 和 80 个神经元）的 PINN $\boldsymbol{u}^{2\star} = \boldsymbol{u}^{2\star}(\boldsymbol{\xi},\ \omega,\ \boldsymbol{x}\,|\,\boldsymbol{\vartheta}^\star)$，以重建 (i) 非均质试样 Π_2中的位移场 $\boldsymbol{u}^2$，以及 (ii) 观测面上 L´ame 参数的分布。为此，使用与五个点源 $\{\boldsymbol{x}_i\} \in S^{\mathrm{inc}}$, $i = 1$、2、.....、5 在 $\omega = 3.91$ 处相关的合成波形数据进行训练。这里，$\boldsymbol{\vartheta}^\star$ 是网络的未知分布式参数，维度为 $(40\times 40)^2$, ；而 $\gamma = 0.065$ 则是根据试样的均匀密度 $\rho = 1$设定的非自适应标量权重。在此设置中，$\boldsymbol{u}^{2\star}$ 的输入大小为 $1600\times 1\times 5$，输出维度为 $(1600\times 1\times 5)^2$。图 13 对比了有限元法和 PINN 得到的 Π_2 中水平位移 u_2^1 图，以及分别通过频谱和自动微分计算得到的空间导数。

表4: 根据图14，五个不同无噪声数据集重建的 PINN L´ame 分布的均值和标准差。

$\mathscr{D}$	Π_{2_1}	Π_{2_2}	Π_{2_3}	Π_{2_4}
$\langle\mu^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	0.975	1.973	2.941	·3。918
$\sigma(\mu^\star\vert_{\mathscr{D}})$	0.054	0.123	0.135	0.226
$\langle\lambda^\star\rangle_{\mathscr{D}}$	0.686	1.250	2.045	2.065
$\sigma(\lambda^\star\vert_{\mathscr{D}})$	0.247	0.400	0.520	0.857

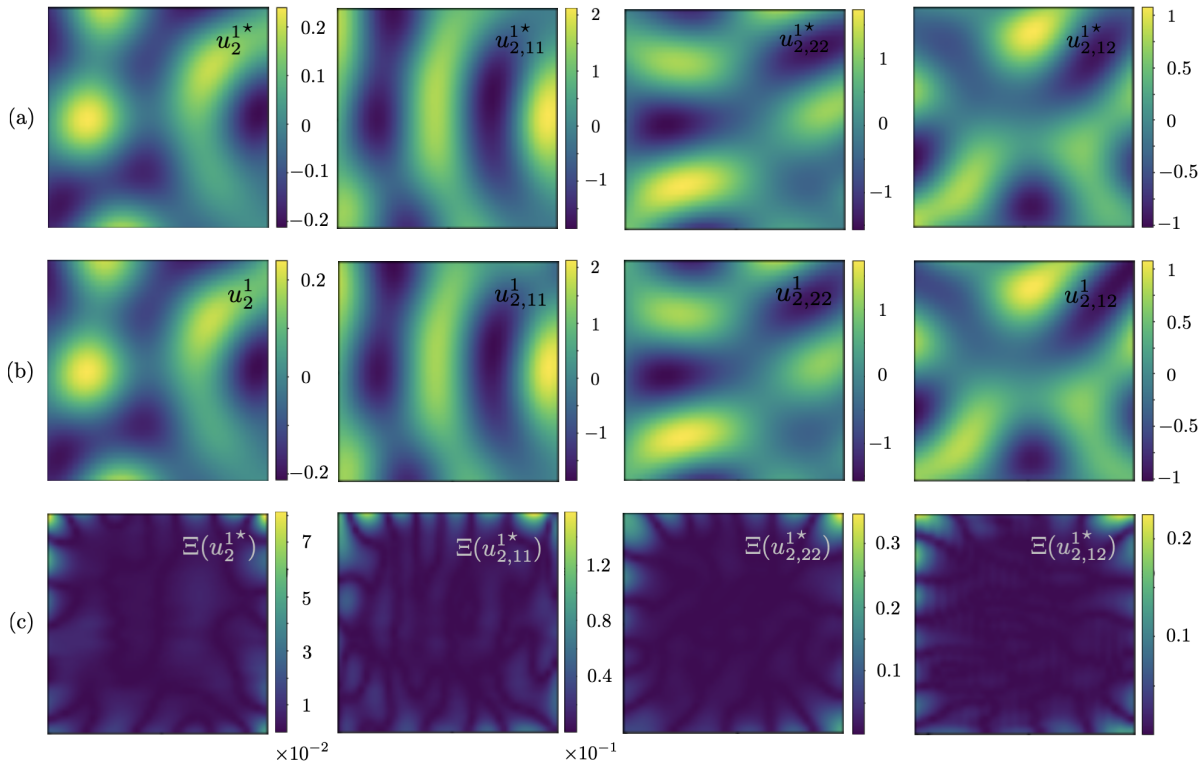


图 10：PINN $vs_{\circ}$ Π_1中竖向位移及其导数的有限元法图谱：(a) 基于无噪声数据的多层感知机估计值，对于$\{u_2^{1\star}, u_{2,11}^{1\star}, u_{2,22}^{1\star}, u_{2,12}^{1\star}\}$，其中导数 $u_2^{1\star}$、$_{ij}$ i、 $j = 1$，2 通过自动微分获得；(b) $\{u_2^1, u_{2,11}^1, u_{2,22}^1, u_{2,12}^1\}$的有限元位移解及其谱导数；(c) (a) 与 (b) 之间的法向失配 8。

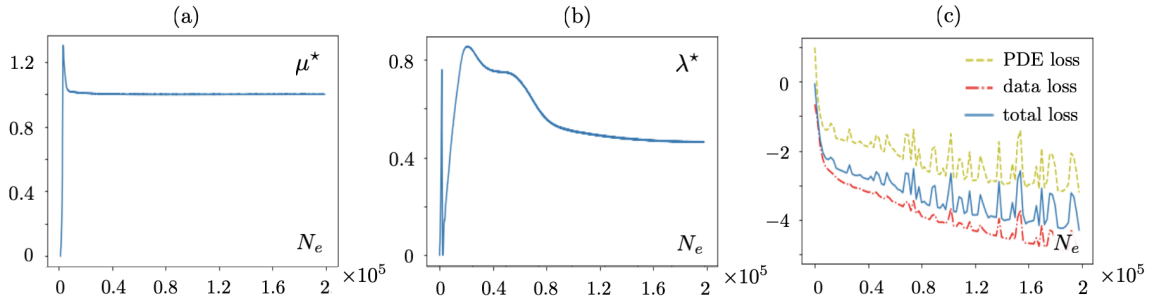


图 11：基于无噪声数据对均质板 Π_1 中 L´ame 常数进行的 PINN 重建：(a) $\mu^\star$ $vs_{\circ}$ 训练轮次数 N_e，(b) $\lambda^\star$ $vs_{\circ}$ N_e，以及 (c) 总损失 $\mathscr{L}_{\varpi}$ 及其组成部分（偏微分方程残差和数据失配） $vs.$ N_e 的对数尺度。

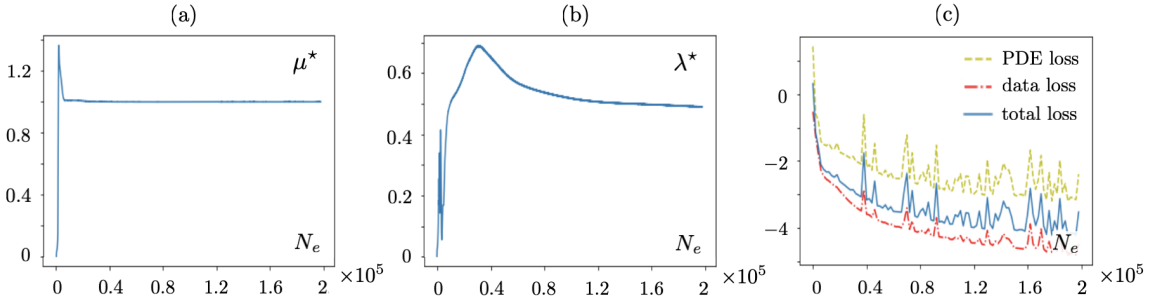


图 12：PINN 根据含噪数据重建 Π_1 中的 L´ame 常数：(a) $\mu^\star$ $vs_{\circ}$ 训练轮数 N_e；(b) $\lambda^\star$ $vs_{\circ}$ N_e；(c) 总损失 $\mathscr{L}_{\varpi}$ 及其组成部分（偏微分方程残差和数据失配） $vs.$ N_e，采用对数尺度。

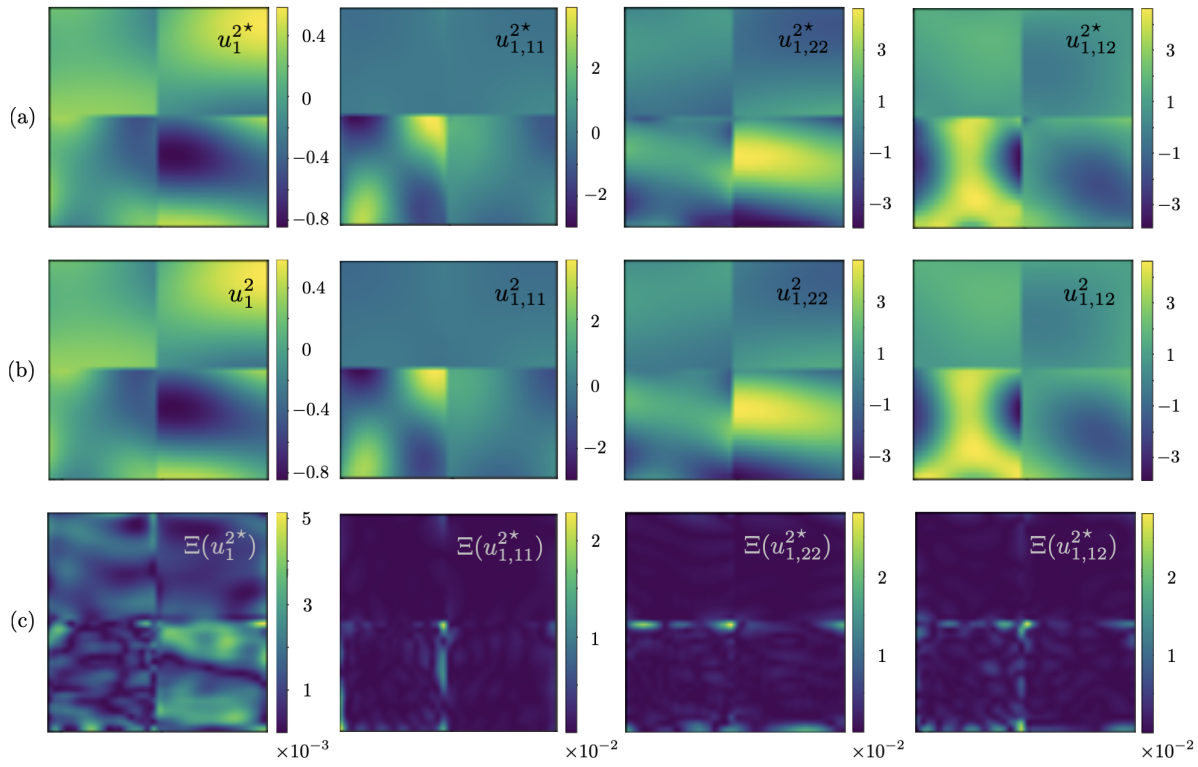


图 13：PINN $vs_{\circ}$ Π_2中水平位移及其导数的有限元映射：(a) 基于无噪声数据得到的 PINN 估计值，对于$\{u_1^{2\star}, u_{1,11}^{2\star}, u_{1,22}^{2\star}, u_{1,12}^{2\star}\}$，其中导数 $u_1^{2\star}{}_{,ij}, i,\ j = 1,\ 2$ 由自动微分求得；(b) $\{u_1^2, u_{1,11}^2, u_{1,22}^2, u_{1,12}^2\}$的有限元位移解及其谱导数；(c) (a) 与 (b) 之间的法向失配 $8_{\circ}$

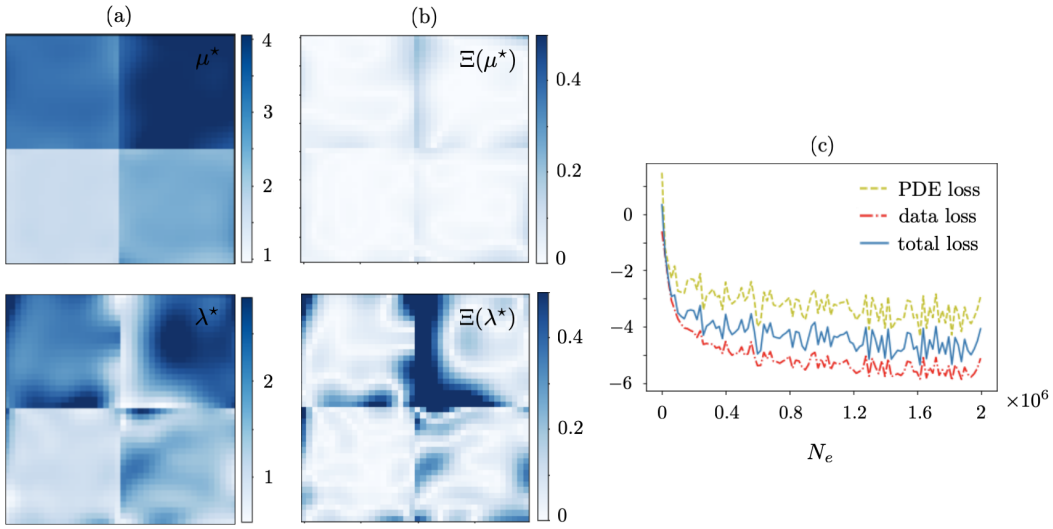


图 14：使用五个无噪声数据集对 Π_2 中的 L´ame 参数进行 PINN 重构：(a) PINN 预测的分布 $\mu^\star$和$\lambda^\star$；(b) 相对于真实值 $\mu_j = j$ 和 $\lambda_j = 2j/3,\ j = \{1, 2, 3, 4\}$的重构误差 (8)；(c) 对数尺度下的总损失 $\mathscr{L}_{\varpi}$ 及其组成部分（偏微分方程残差和数据失配） $vs.\ N_e$ 。

物理信息神经网络重构的偏微分方程参数分布如图 14 所示，其统计数据详见表 4。值得一提的是，针对一组权重$\gamma = \{0.01, 0.025, 0.1, 0.25, 0.5, 1.5, 2, 5, 10, 15\}$，重复了学习过程。在所有情况下，结果要么非常相似，要么比图 13 和图 14 中的结果更差。

4. 实验室实施

本节考察了在实验室环境下，直接反演和物理信息神经网络用于全场超声表征的性能。下文中，按照第 2.3.2 节所述，在反演前对实验数据进行处理；该节在 [36] 中总结了详细流程。为验证反演结果，还分别通过频散分析，从一组辅助实验中重构了感兴趣的量。

4.1. 测试设置

实验在两个（均质和非均质）试样上进行：Π_1^{exp} 一块由 T6 6061铝制成的 27 cm×27 cm×1.5 mm 板材，以及Π_2^{exp} 由以下材料组成的试样：(a) 一块 5 cm×27 cm×1.5 mm 的 2级钛板材，(b) 一块 2.5 cm ×27 cm ×1.5 mm 的 4130钢板材，以及 (c) 一块 5 cm×27 cm ×1.5 mm 的 260-H02黄铜板材，各层通过金属环氧胶连接。供后续参考，制造商提供的 Al、Ti、St、Br 的密度 ρ_μ、杨氏模量 E_μ 和泊松比 ν_μ 列于表5中。

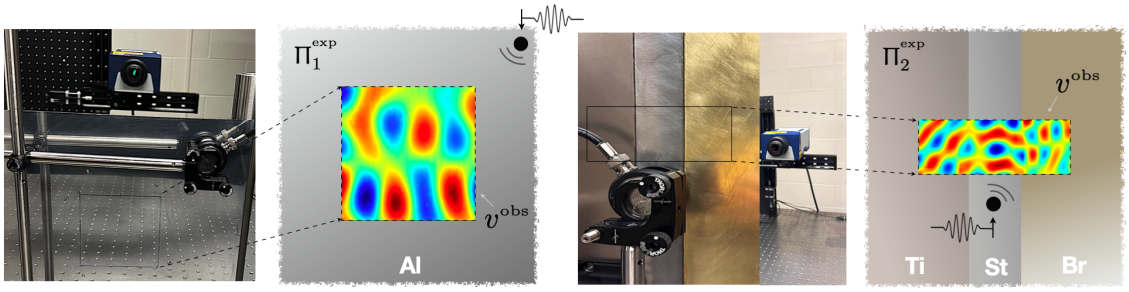
对两个试样进行超声实验时，传感配置和激励小波的设置相似。两种情况下，均由 0.5 MHz 纵波压电陶瓷换能器（Olympus公司的 V101RB）在图15所示的指定源位置 S^{inc} 激励试样，产生面外 剪切波。入射信号是一个五周期脉冲，其形式为

$$H(f_c t)\, H(5-f_c t)\, \sin\left(0.2\pi f_c t\right)\, \sin\left(2\pi f_c t\right), \tag{9}$$

其中， H 表示 Heaviside阶跃函数，中心频率 f_c设为 165 千赫（分别为。 $\{80, 300\}$ 千赫），对应于 Π_1^{exp} （分别为。 Π_2^{exp} ）。通过扫描网格 $\mathscr{G}_\beta$ 上采样的 S^{obs} （其中 $S^{\text{obs}} \cap S^{\text{inc}} = S^{\text{obs}} \cap \partial\Pi_\beta^{\text{exp}} = \emptyset$），以粒子速度 v^β, $\beta = 1,\ 2$ 的形式测量所诱发的波动。测量采用安装在二维机器人平移架上的激光多普勒测振仪（LDV）进行，该平移架用于扫描。Polytec公司的 VibroFlex Xtra VFX-I-120激光多普勒测振系统能够沿激光束测量粒子速度，频率范围为~直流至 -24 兆赫；本研究中，激光束垂直于试样表面。

扫描网格 $\mathscr{G}_1 \subset \Pi_1^{\text{exp}}$ 为边长 2 厘米×2 厘米的正方形，由 100×100 个均匀分布的测量点采样。因此，两个空间方向上的空间分辨率均为 0.2 毫米。同时，$\mathscr{G}_2 \subset \Pi_2^{\text{exp}}$ 为一个 2.5 厘米×7.5 厘米的矩形，其位置如图 15 (b) 所示，并由均匀网格上的180×60 个扫描点采样，空间分辨率为 0.42 毫米。每个扫描点的数据采集时长为 400 μ秒，采样率为 250 兆赫。为尽量减小系统中光学噪声和机械噪声的影响，每个扫描点的测量结果均取 80 次重复测量的平均值。请注意，直接反演和物理信息神经网络均采用归一化速度 场 v^{obs} 的频谱进行数据反演。图15展示了 Π_1^{exp} （分别为。 Π_2^{exp} ）中频率为 165 千赫（分别为。80 千赫）时面外质点速度的此类分布。

需要指出的是，在上述实验中，以位移表示的测量信号幅值为 O(纳米)，因此可以适当地假设其处于线性传播区间。尽管如此，反平面波运动具有色散特性。因此，为确定各组成部分中相关的长度尺度，我们通过第 4.4.1 节所述的一系列互补实验，获得相应的色散曲线，如图19所示。相应地，对于中心频率为 $\{f_{c_1}、f_{c_2}、f_{c_3}\} = \{165, 80, 300\}$ 千赫的激励，表6列出了铝、钛、钢、黄铜} 对应的相速度 c_μ 和波长 λ_μ 。



(a) (b)

图 15：超声全场表征的测试设置：(a) 铝板 Π_1^{exp} 由压电换能器激发，产生频率为 165 千赫的反平面剪切波；随后，激光多普勒测振仪安装在机器人上，在观测面上扫描并采集面外质点速度场；(b) 钛-钢-黄铜板 Π_2^{exp} 接受类似测试，测试频率为 80 千赫和 300 千赫。

4.2. 量纲框架

回顾第2.2节，设 $\ell_r := \lambda_{\mathrm{Al}} = 0.01$ 米、 $\mu_r := \mathsf{E}_{\mathrm{Al}} = 68.9$ 吉帕，以及 $\rho_r := \rho_{\mathrm{Al}} = 2700$ 千克/米^3 分别为长度、应力和质量密度的参考尺度。在此设定下，以下映射将物理量转换为无量纲值

$$\begin{aligned}
&(\rho_\mu, \mathsf{E}_\mu, \nu_\mu) \;\to\; (\rho_\mu, E_\mu, \nu_\mu) := \big(\frac{1}{\rho_r}\rho_\mu, \frac{1}{\mu_r}\mathsf{E}_\mu, \nu_\mu\big), && \mu = \{\mathrm{Al},\ \mathrm{Ti},\ \mathrm{St},\ \mathrm{Br}\},\\
&(\mathsf{f}_{c_\iota}, \lambda_\mu, \mathsf{c}_\mu) \;\to\; (f_{c_\iota}, \lambda_\mu, c_\mu) := \big(\ell_r\sqrt{\frac{\rho_r}{\mu_r}}\mathsf{f}_{c_\iota}, \frac{1}{\ell_r}\lambda_\mu, \sqrt{\frac{\rho_r}{\mu_r}}\mathsf{c}_\mu\big), && \iota = 1,2,3,\\
&(\mathsf{h}, \mathsf{f}, \mathsf{v}^\beta) \;\to\; (h, f, v^\beta) := \big(\frac{1}{\ell_r}\mathsf{h}, \ell_r\sqrt{\frac{\rho_r}{\mu_r}}\mathsf{f}, \sqrt{\frac{\rho_r}{\mu_r}}\mathsf{v}^\beta\big), && \beta = 1,2,
\end{aligned} \tag{10}$$

其中，$\mathsf{h} = 1.5$ mm 和 f 分别表示试样的厚度和波动的循环频率。表5（即表6）详细列出了（10）中第一项（即第二项）的标准值。正常厚度和中心频率如下:

$$\{f_{c_1}, f_{c_2}, f_{c_3}\} = \{0.33, 0.16, 0.59\}, \quad h = 0.15. \tag{11}$$

表5: 铝、钛、钢和黄铜薄板的制造商规定属性。此处，$\chi_\mu := E_\mu/\rho_\mu$。

	μ	Al	Ti	St	Br
物理量	E_μ [吉帕]	68.9	105	199.95	110
	ρ_μ [千克/米^3]	2700	4510	7850	8530
	ν_μ	0.33	0.34	0.29	0.31
正常值	E_μ	1	1.52	2.90	1.60
	ρ_μ	1	1.67	2.91	3.16
	χ_μ	1	0.91	1	0.51

表6: 铝、钛、钢、黄铜在 $\{\mathsf{f}_{c_1}, \mathsf{f}_{c_2}, \mathsf{f}_{c_3}\} = \{165, 80, 300\}$ 千赫下的相速度 c_μ 和波长 λ_μ，如图19所示，以及根据式（10）得到的归一化对应量。

物理量

μ	Al	Ti	St	Br
λ_μ (f_{c_1}) [厘米]	1	–	–	–
c_μ(f_{c_1}) [米/秒]	1610.4	–	–	–
λ_μ (f_{c_2}) [厘米]	–	1.4	1.4	1.17
c_μ(f_{c_2}) [米/秒]	–	1140	1126	936
λ_μ (f_{c_3}) [厘米]	–	0.65	0.64	0.5
c_μ(f_{c_3}) [米/秒]	–	1960.8	1929	1501.6

正常值

μ	Al	Ti	St	Br
$\lambda_\mu(f_{c_1})$	1	–	–	–
$c_\mu(f_{c_1})$	0.32	–	–	–
$\lambda_\mu(f_{c_2})$	–	1.4	1.4	1.17
$c_\mu(f_{c_2})$	–	0.23	0.22	0.19
$\lambda_\mu(f_{c_3})$	–	0.65	0.64	0.5
$c_\mu(f_{c_3})$	–	0.39	0.38	0.3

4.3. 控制方程

根据式（11）和表6可见，在所有测试中，铝、钛、钢和黄铜的波长厚度比均为 $\frac{\lambda_\mu}{h} \in [3.33\ \ 9.33], \mu = \{\}$。因此，可以采用薄板中弯曲波的控制方程 [53] 来近似描述测量数据的物理机制。在此框架下，式（1）可改写为

$$\begin{aligned}
&\Lambda \;=\; \Lambda_\beta \;:=\; \frac{\chi_\beta h^3}{12(1-\nu_\beta^2)}\nabla^4 \;-\; h(2\pi f)^2, && \chi_\beta := \frac{E_\beta}{\rho_\beta},\ \beta = 1,2,\\
&\hat{\mathrm{u}} \;=\; v^\beta(\boldsymbol{\xi}, f; \boldsymbol{\tau}), \quad \boldsymbol{\vartheta} \;=\; \chi_\beta(\boldsymbol{\xi}, f), && \boldsymbol{\xi} \in S^{\mathrm{obs}},\ \boldsymbol{\tau} \in S^{\mathrm{inc}},\ f \in [0.8\ \ 1.2] f_{c_\iota},\ \iota = 1,2,3,
\end{aligned} \tag{12}$$

其中 ρ_β、E_β和ν_β 分别表示 $\Pi_\beta^{\exp}$ 、 β =1、2 中的法向密度、杨氏模量和泊松比，而 $\boldsymbol{\tau}$表示源位置。注意，根据表5， $\nu_\beta \sim 0.32$ 与 $1-\nu_\beta^2$相关的 Λ,

对泊松比的小幅变化不太敏感。因此，在下文中， ν_β 被视为已知参数。给定 $v^\beta(\boldsymbol{\xi}、 f; \boldsymbol{\tau})$，目标是重建 $\chi_\beta(\boldsymbol{\xi}、 f)$。

4.4. 直接反演

按照第 3.2 节的重建过程，可在特定频率下获得 χ_β 在 $\mathscr{G}_\beta$, $\beta = 1,2$ 中的分布。为此，根据图1构建正定多层感知器网络 $\chi_\beta^\star = \mathscr{N}_{\chi_\beta}(\boldsymbol{\xi}, \omega)$ 和 $\alpha^\star = \mathscr{N}_\alpha(\boldsymbol{\xi}, \omega)$，它们分别由三个隐藏层组成，每层包含 20、40 和 20 个神经元。本节所有多层感知机训练中，每个训练轮次均使用完整数据集，学习率为 0.005。

当 $\beta = 1$ 时，在 $f_1 = 0.336$ 处进行反演。 S^{inc} 在一个点处采样，即在铝板测试期间压电换能器保持固定，因此 $N_\tau = 1$；训练时则采用一个同心的 60×60 配点子集对 S^{obs} 进行采样。在此设置下， $\chi_1^\star$ 和 $\alpha^\star$ 的输入大小为 $N_\xi N_\tau \times N_\omega = 3600 \times 1$，其输出均为相同大小的实数值。结果如图16所示。当 $\beta = 2$ 时，在 $f_2 = 0.17$ 和 $f_3 = 0.61$ 处进行直接反演。对于低频重建， S^{inc} 在一个点处采样，同时使用 $\mathscr{G}_2$ 中由 40×120 扫描点构成的子集进行训练，使得 $\chi_2^\star$ 和 $\alpha^\star$ 的输入/输出大小为 4600×1。重建的场及相应的法向误差见图17。表7列出了图16和图17中 Π_β^{exp} 、 $\beta = 1$, 2 的重建分布 $\chi_\beta^\star$ 的真实值、均值和标准差。对于高频重建，当$\beta = 2$时， S^{inc} 在三个点处采样，即在压电换能器的三个不同位置进行实验，同时训练时使用相同的扫描点子集。在这种情况下，$\chi_2^\star$ 和 $\alpha^\star$ 的输入为 13800×1，其输出维度为 4600×1。高频重建结果如图18所示，相应的均值和标准差列于表 8。需要指出的是，图16、图17和图18中的计算法向误差是相对于第 4.4.1 节的验证值而言的。请注意，来自实验室测试数据的重建 $\alpha^\star$ 比第 3.2 节中由合成数据重建的结果平滑得多。这可能归因于式（12）具有标量性质，且仅包含一个未知参数；而描述面内波动的向量方程则包含两个未知参数。更具体地说，此处， $\alpha^\star$ 控制单个网络 $\chi_\beta^\star$ 的权重和偏置；而在第 3.2 节中， $\alpha^\star$ 同时控制两个独立网络 $\mu^\star$ 和 $\lambda^\star$的参数。对图17和图18进行比较分析可知：(a) 通过增加源的数量来丰富波形数据，可显著降低重构误差；(b) 式（3）中的正则化参数 α 确实具有分布特性，因为黄铜中重建的 $\alpha^\star$ 幅值是钛和钢中相应幅值的十倍，这是不同材料表面相关测量噪声水平不同所致；(c) 重建的场 $\chi_2^\star$ ——根据式（12），它是材料属性 E_2/ρ_2——显著依赖于重建频率。后者意味着必须对结果进行适当验证，这正是第 4.4.1 节讨论的内容。

4.4.1. 验证为了深入了解低频和高频重建结果之间的性质差异，

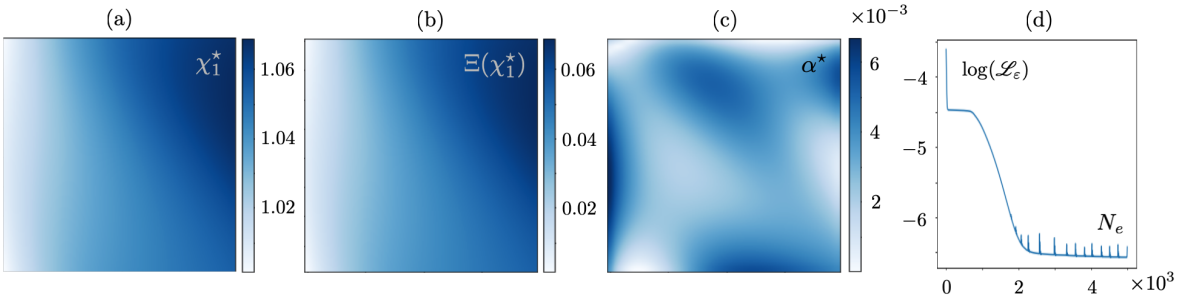


图16：使用频率为 $f_1 = 0.336$ 的单一源测试数据对偏微分方程参数 χ_1 在 Π_1^{exp} 中进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布 $\chi_1(\boldsymbol{\xi}, f_1)$，位于 $\boldsymbol{\xi} \in \mathscr{G}_1$ 中；(b) 相对于真实值 $\chi_1 = \chi_{\text{A1}} = 1$ 的重构误差 (8)；(c) 多层感知机恢复的正则化参数分布 $\alpha^\star$；(d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ vs。训练轮数 N_e 采用对数尺度。

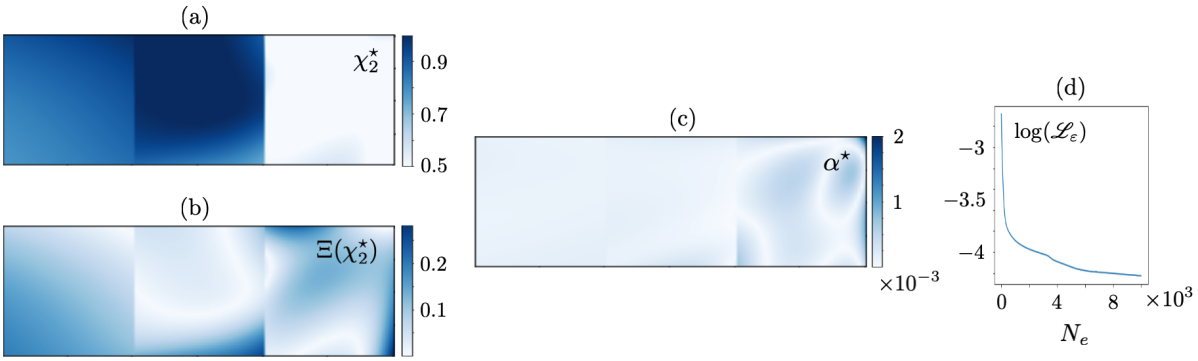


图17：使用频率为 $f_2 = 0.17$ 的单一源测试数据，对 $\Pi_2^{\exp}$ 中的偏微分方程参数 χ_2 进行直接反演：(a) 多层感知机预测的 $\chi_2 \in \{\chi_{\mathrm{Ti}}, \chi_{\mathrm{St}}, \chi_{\mathrm{Br}}\} = \{0.91, 1, 0.51\}$ 分布，位于 $\xi \in \mathscr{D}_2$；(b) 相对于表中真实值的重构误差 $\Xi(\chi_2^\star)$；(c) 多层感知机恢复的正则化参数分布 $\alpha^\star$；(d) 损失函数 $\mathscr{L}_\varepsilon$ 与训练轮数 N_e 采用对数尺度。

表7：通过对单源测试数据进行直接反演，得到图16和图17中重建分布的均值和标准差。

β	1	2_{Ti}	2_{St}	2_{Br}
χ_β	1	0.91	1	0.51
$\langle \chi_\beta^\star \rangle_{\Pi_\beta^{\exp}}$	1.041	0.872	0.978	0.443
$\sigma(\chi_\beta^\star \vert_{\Pi_\beta^{\exp}})$	0.017	0.044	0.060	0.052

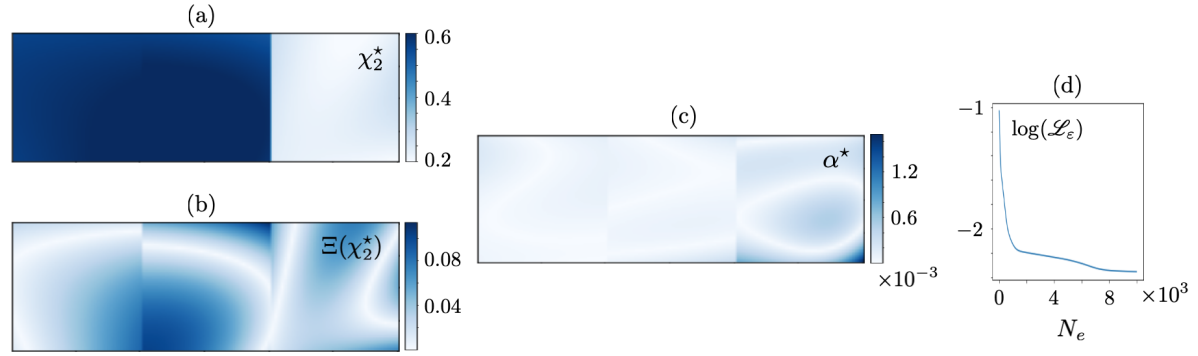


图 18 0.61 χ_2 $\Pi_2^{\exp}$ f_3 $=$：使用频率为 的三个源位置测试数据，对 中的偏微分 $\chi_2 \in f_3$ $\xi \in \mathscr{D}_2$ 8 方程参数进行直接反演：(a) 多层感知机预测的分布，位于； (b) 相对于图 20, $\alpha^\star$ $\mathscr{L}_\varepsilon$ 所示相关估计值 $\{0.57, 0.59, 0.24\}$ 的重构误差（）；(c) vs N_e 多层感知机恢复的正则化参数分布；(d) 损失函数。训练轮数采用对数尺度。

表 8：对来自三个不同的源的高频测试数据应用直接反演后，图 18 中重建分布的均值和标准差。

β	2_{Ti}	2_{St}	2_{Br}
χ'_β	0.57	0.59	0.24
$\langle \chi_\beta^\star \rangle_{\Pi_\beta^{\exp}}$	0.585	0.606	0.227
$\sigma(\chi_\beta^\star \vert_{\Pi_\beta^{\exp}})$	0.015	0.029	0.016

图17和图18中，为测试装置的每个组件进行了一组次级测试，以获得其色散曲线。为此，在 $\mathrm{f}_{\mathrm{c_j}} = 50j$ 千赫、$j = 1$，2、.....、7 处激发形式为 (9) 的反平面剪切波，

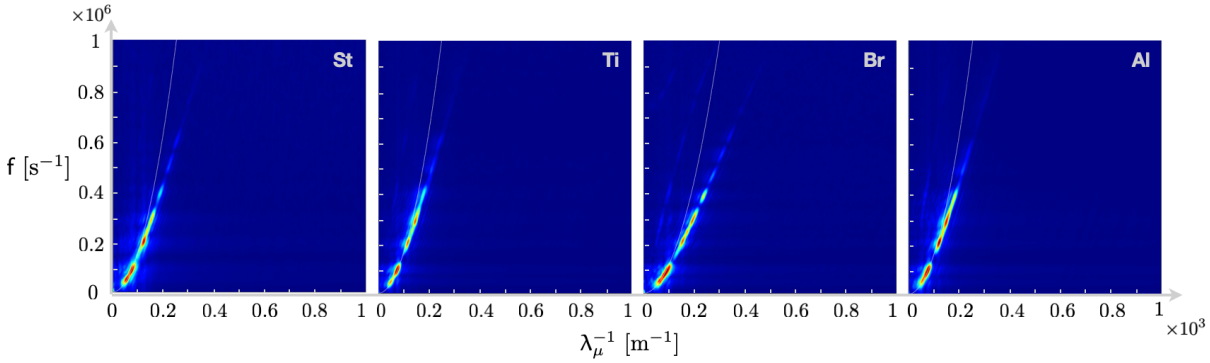


图19：实验 v s。 $\mu = \{$铝、钛、钢、黄铜$\}$的理论色散曲线 f(λ_μ^{-1})。解析曲线（实线）由（13）计算得出，采用 表5中的相关属性。

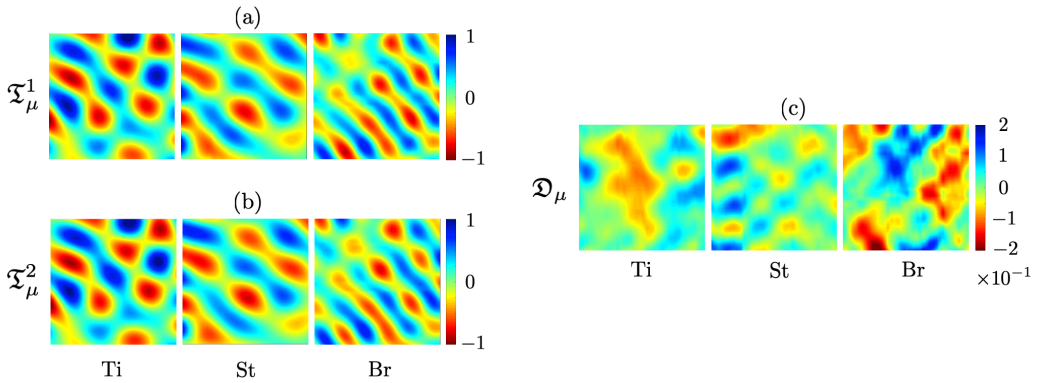


图20： $f_3 = 0.61$处平衡定律（12）的偏差：(a) 根据（14）得到的弹性力场 $\mathfrak{T}_\mu^1$， $\mu = \{$钛、钢、黄铜$\}$，系数经调整为 $\{\chi_{\mathrm{Ti}}, \chi_{\mathrm{St}}, \chi_{\mathrm{Br}}\} = \{0.57, 0.59, 0.24\}$；(b) 惯性场 $\mathfrak{T}_\mu^2$；(c) 法向偏差 $\mathfrak{D}_\mu$。

在主要测试（图15）中使用的铝、钛、钢和黄铜薄板上切取 60 cm × 60 cm 的试样。每次实验中，压电换能器均置于试样中部（远离外边界），并沿一条长度为 8 cm、以 400 个扫描点采样的直线，在换能器附近采集面外波动。对时空信号进行傅里叶变换后，得到图19中的色散关系。同时，根据 (12) 计算相应的理论色散曲线，

$$\mathsf{f} \;=\; 2\pi(\lambda_\mu)^{-2}\sqrt{\frac{\chi_\mu \mathsf{h}^2}{12(1-\nu_\mu^2)}}, \quad \chi_\mu \;=\; \frac{\mathsf{E}_\mu}{\rho_\mu}, \quad \mu = \{\mathrm{Al},\ \mathrm{Ti},\ \mathrm{St},\ \mathrm{Br}\}, \tag{13}$$

使用表5中针对χ_μ 和ν_μ 以及 h = 1.5毫米的数值。图19中实验色散曲线与理论色散曲线 f(λ_μ^{-1}) 的比较，验证了波动在低频率范围内的理论以及表5中针对χ_μ 的数值。这也与图16和图17的直接反演结果一致。此外，图19表明，对于 $\mu = \{$铝、钛、钢、黄铜$\}$，在约 $\mathsf{f}_\mu = \{170, 200, 120, 110\}$ 千赫处，具有物理系数的控制偏微分方程（12）无法预测实验结果，这或许能为图18中的高频重建结果提供一些参考。进一步研究图20所示的平衡定律（12）发现，312千赫处的测试数据满足——根据材料不同，偏差小于 $10-20\%$——具有修正系数的（12）形式偏微分方程。更具体地说，图20通过直接调节偏微分方程参数 χ_2' 以最小化偏差 $\mathfrak{D}_\mu$，展示了（12）中弹性力分布 $\mathfrak{T}_\mu^1$ 与惯性场 $\mathfrak{T}_\mu^2$之间可实现的平衡，具体如下

$$\mathfrak{T}_\mu^1 \;:=\; \frac{\chi_2' h^3}{12(1-\nu_2^2)}\nabla^4 v^2, \quad \mathfrak{T}_\mu^2 \;:=\; h(2\pi f)^2 v^2, \quad \mathfrak{D}_\mu \;:=\; \frac{|\mathfrak{T}_\mu^1 - \mathfrak{T}_\mu^2|}{\max|\mathfrak{T}_\mu^2|}. \tag{14}$$

参考表8，在 $f = f_3 = 0.61$ 处恢复的系数 χ_2' 验证了图18的直接反演结果。这意味着，为了使数据与“感知到的”底层物理机制实现最佳拟合，直接反演（或物理信息神经网络）可能会得到非物理解。因此，必须确定数据驱动建模中所规定物理原理的有效范围。在此，系统在 f_3 处的物理机制正处于过渡阶段，但仍足够接近主阶近似（12），因此偏差小于20%。然而，目前尚不清楚是否可以将这一具有非物理系数的方程用作预测工具。若能通过高阶连续介质理论以及一组用于确认的独立实验，从不同角度进一步研究这些结果，将会很有意义；这也可以作为未来研究的主题。

4.5. 物理信息神经网络

按照第 3.3 节，使用第 4.4 节的实验测试数据构建并训练物理信息神经网络。构建多层感知机网络 $v^{1^\star} = v^{1^\star}(\boldsymbol{\xi},\ f,\ \boldsymbol{x}\,|\,\gamma,\ \chi_1^\star)$，其中包含六个隐藏层，神经元数量依次为 40、40、120、80、40 和 40，用于映射与单个换能器位置 $\boldsymbol{x}_1$ 及频率 $f_1 = 0.336$相关的面外速度场 v^1 (在 $\Pi_1^{\exp}$ 中)。偏微分方程参数 χ_1 定义为网络的未知标量参数；按照第 3.3 节中的论述，拉格朗日乘子 γ 被设定为大小为 $h^{-1}_{(2\pi f_1)_2} = 1.5$的非自适应标量权重。~~$v^{1^\star}$~~的输入/输出维度为 $N_\xi \times N_\omega \times N_\tau = 3600 \times 1 \times 1$，每个训练轮次均使用完整数据集进行训练，学习率为 0.005。请注意，此处的目标是 (a) 为 v^1构建代理映射，以及 (b) 识别 $\chi_1^\star$。

图 21 展示了：(a) PINN 估计的场 $v^{1^\star}$ 与测试数据 v^1相比的准确性；(b) 自动微分在捕捉四阶场导数方面的表现，例如控制偏微分方程 (12) 中出现的 $v^{1^\star}{}_{,\,1111}$；以及 (c) 参数 $\chi_1^\star$的演化。图 (b) 中的比较是根据第 2.3.2 节，针对测试数据的频谱导数进行的。与第 3.3 节中的二阶导数相比，自动微分在估计反平面波运动涉及的高阶导数时误差更大，这并不令人意外。

此外，还构建了具有七个隐藏层的 PINN $v^{2^\star} = v^{2^\star}(\boldsymbol{\xi},\ f,\ \boldsymbol{x}\,|\,\gamma,\ \chi_2^\star)$，各层分别包含 40、40、120、120、80、40 和 40 个神经元，用于重建 (i) 层状试样 $\Pi_2^{\exp}$ 中的粒子速度场 v^2，以及 (ii) 采样区域内偏微分方程参数 χ_2 的分布。后者被定义为网络中的未知参数，其维度为 40×120；低频重建时，标量权重 γ 设为 $h^{-1}_{(2\pi f_2)_2} = 5.84$。在这种设置下，$v^{2^\star}$的输入/输出维度为 $4800 \times 1 \times 1$。图 22 对实验测得的速度和偏微分方程参数图与 PINN 预测结果进行了比较分析。相关统计数据见表 9。从图 22 (a) 的波形可以明显看出，图 22 (d) 中最显著的误差出现在粒子速度为零的位置。与第 3.2 节类似，这一问题有望通过增加测试数据来解决。

5. 结论

本文研究了基于机器学习的直接反演和物理信息神经网络在层状构件全场超声表征中的应用。直接反演利用信号处理工具，直接从激光超声实验提供的稠密数据集中计算场导数。这样可以简化并控制学习过程，通过最小化单目标损失函数，专门恢复所需的物理场。物理信息神经网络在设计上更加灵活，尤其适用于测试数据有限且力学表征需要（或必须进行）波形补全的情况。物理信息神经网络基于超声数据进行多目标学习可能更加复杂，但通过精心权衡损失函数即可实现。

在直接反演中，Tikhonov 正则化对于利用有限或多保真实验数据稳定重建分布式偏微分方程参数至关重要。由此看来，深度学习提供了一种独特的机会，可以同时将正则化参数恢复为辅助场；事实证明，这一方法在实验数据反演中尤其具有启发意义。

在训练物理信息神经网络时，有两种策略特别有效：（1）以主导波长确定参考长度尺度，以控制空间导数的范数——事实证明，这对于具有高阶偏微分方程的薄板弯曲波至关重要；（2）利用控制偏微分方程中的惯性项估算拉格朗日乘子。

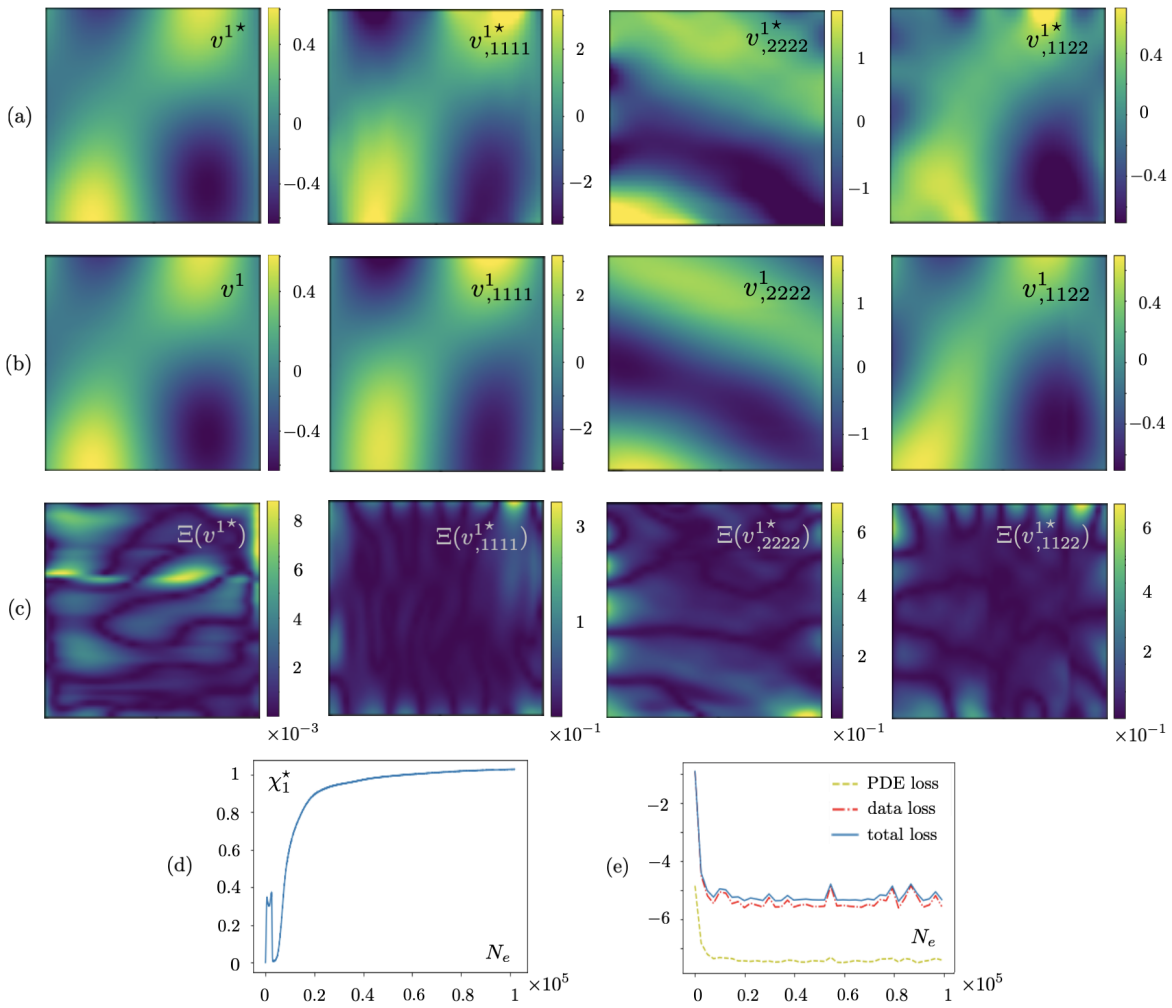


图21：PINN $vs_\circ$ $\Pi_1^{\exp}$ 中粒子速度及其导数的实验分布图：(a) PINN 对 $\{v^{1\star}, v^{1\star}_{,1111}, v^{1\star}_{,2222}, v^{1\star}_{,1122}\}$ 的估计值，其中导数通过自动微分获得；(b) 归一化的激光多普勒测速捕获的粒子速度场 v^1 及其对应的谱导数；(c) (a) 与 (b) 之间的法向失配 8；(d) PINN 重建的偏微分方程参数 $\chi_1^\star$ $vs_\circ$ 训练轮次 N_e；(e) 总损失 $\mathscr{L}_\varpi$ 及其组成部分（偏微分方程残差和数据失配）$vs.\ N_e$，采用对数尺度。

在多个频率下开展的实验室实施表明，验证与确认对于预测性数据驱动建模不可或缺。具体而言，直接反演和物理信息神经网络都会恢复未知的“物理”量，使其最符合特定方程中的数据（而这些方程的适用范围往往未明确说明）。这可能导致数学上合理、但在物理上不相容的重建结果；尤其当所认知的物理定律已接近其适用极限，导致对实际物理机制的描述存在显著偏差时，更是如此。在这种情况下，反演算法会尝试通过调整偏微分方程参数来弥补这一偏差，从而产生非物理解。因此，开展补充实验至关重要，以便（a）确定所给偏微分方程是否适用；（b）验证重建模型的预测能力。

作者贡献

Y.X. 研究、方法学、数据整理、软件、可视化、撰写——初稿；**F.P.** 概念构思、方法学、经费获取、监督指导、撰写——初稿；**J.S.**实验数据整理；**C.W.** 实验数据整理。

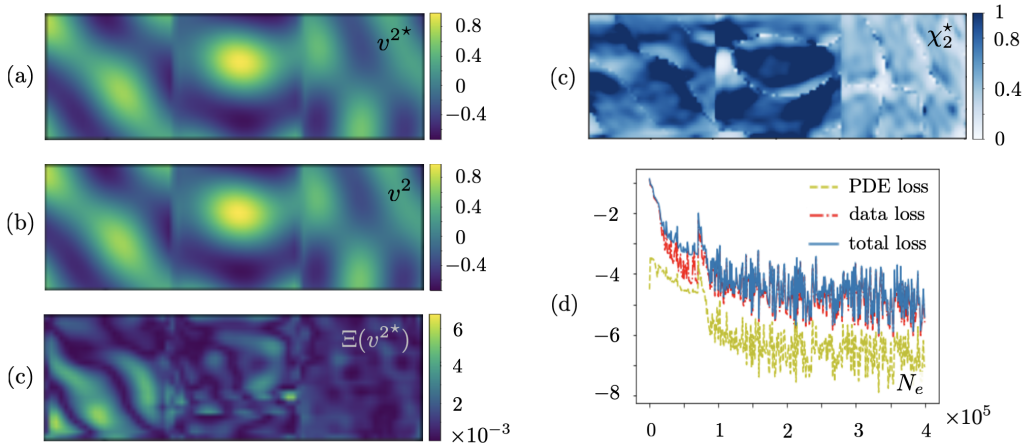


图 22：使用 Π_2^{exp} 单一源在 $f_2 = 0.17$处的测试数据进行低频物理信息神经网络重建：(a) 物理信息神经网络预测的粒子速度 $v^{2\star}$分布，(b) 经归一化的激光多普勒测速捕获的粒子速度 v^2，(c) (a) 与 (b) 之间的法向失配，(d) 物理信息神经网络预测的偏微分方程参数 $\chi_2^\star$分布，以及 (e) 总损失 $\mathscr{L}_\varpi$ 及其组成部分（偏微分方程残差和数据失配）*vs.* 随训练轮次 N_e 的变化（对数尺度）。

表 9：单源低频测试数据中图 22 所示物理信息神经网络重建分布的均值和标准差。

β	2_{Ti}	2_{St}	2_{Br}
χ_β	0.91	1	0.51
$\langle\chi_\beta^\star\rangle_{\Pi_\beta^{\text{exp}}}$	0.790	0.890	0.414
$\sigma(\chi_\beta^\star\|_{\Pi_\beta^{\text{exp}}})$	0.214	0.356	0.134

致谢

本研究由美国国家科学基金会（资助编号 1944812）和科罗拉多大学博尔德分校通过 FP 的启动经费资助。本研究使用了科罗拉多大学博尔德分校研究计算组提供的资源；该研究计算组由美国国家科学基金会（资助编号 ACI-1532235 和 ACI-1532236）、科罗拉多大学博尔德分校及科罗拉多州立大学支持。特别感谢 Kevish Napal 协助使用 FreeFem++ 代码；该代码作为 [49] 的一部分开发，用于弹性动力学模拟。

参考文献

[1] X. Liang、M. Orescanin、K. S. Toohey、M. F. Insana、S. A. Boppart，利用声驱动光学相干弹性成像测量材料力学性能，《光学快报》34 (19) (2009) 2894–2896。[2] G. Bal、C. Bellis、S. Imperiale、F. Monard，基于含噪全场测量重建各向同性线弹性本构参数，《反问题》30 (12) (2014) 125004。[3] B. S. Garra，弹性成像：发展历史、原理与技术比较，《腹部影像学》40 (4) (2015) 680–697。[4] C. Bellis、H. Moulinec，一种利用内部测量数据求解逆电导率问题的全场图像转换方法，《英国皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》472 (2187) (2016) 20150488。[5] H. Wei、T. Mukherjee、W. Zhang、J. Zuback、G. Knapp、A. De、T. DebRoy，金属构件增材制造的机理模型，《材料科学进展》116 (2021) 100703。

[6] C.-T. Chen、G. X. Gu，利用深度神经网络学习隐式弹性，美国国家科学院院刊118 (31) (2021) e2102721118。[7] H. You、Q. Zhang、C. J. Ross、C.-H. Lee、M.-C. Hsu、Y. Yu，一种基于物理引导的神经算子学习方法：根据数字图像相关测量对生物组织建模，arXiv 预印本 arXiv:2204.00205。[8] C. M. Bishop、N. M. Nasrabadi，《模式识别与机器学习》，第4卷，Springer，2006。[9] Y. LeCun、Y. Bengio、G. Hinton，深度学习，《自然》521 (7553) (2015) 436–444。[10]S. Cuomo、V. S. Di Cola、F. Giampaolo、G. Rozza、M. Raissi、F. Piccialli，通过物理信息神经网络实现科学机器学习：现状与未来展望，arXiv 预印本 arXiv:2201.05624。[11] S. Wang、H. Wang、P. Perdikaris，改进深度算子网络的架构与训练算法，《科学计算杂志》92 (2) (2022) 1–42。[12] L. McClenny、U. Braga-Neto，利用软注意力机制实现自适应物理信息神经网络，arXiv 预印本 arXiv:2009.04544。[13] Z. Chen、V. Badrinarayanan、C.-Y. Lee、A. Rabinovich，梯度归一化：深度多任务网络中用于自适应损失平衡的梯度归一化方法，载于：国际机器学习会议，机器学习研究论文集，2018，第794–803页。[14] M. Raissi、P. Perdikaris、G. E. Karniadakis，物理信息深度学习（第一部分）：非线性偏微分方程的数据驱动解，arXiv 预印本 arXiv:1711.10561。[15] M. Raissi、P. Perdikaris、G. E. Karniadakis，物理信息神经网络：一种用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和反问题的深度学习框架，《计算物理学杂志》378 (2019) 686–707。[16] E. Haghighat、M. Raissi、A. Moure、H. Gomez、R. Juanes，一种用于固体力学反演和代理建模的物理信息深度学习框架，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》379 (2021) 113741。[17] A. Henkes、H. Wessels、R. Mahnken，用于连续介质微观力学的物理信息神经网络，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》393 (2022) 114790。[18] R. Muthupillai、D. Lomas、P. Rossman、J. F. Greenleaf、A. Manduca、R. L. Ehman，通过直接可视化传播的声学应变波实现磁共振弹性成像，《科学》269 (5232) (1995) 1854–1857。[19] P. E. Barbone、N. H. Gokhale，弹性模量成像：二维弹性成像逆问题解的唯一性与非唯一性，《反问题》20 (1) (2004) 283。[20] O. A. Babaniyi、A. A. Oberai、P. E. Barbone，平面应力弹性反问题中本构方程表述的直接误差，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》314 (2017) 3–18。[21] A. N. Tikhonov、A. Goncharsky、V. Stepanov、A. G. Yagola，《不适定问题的数值求解方法》，第328卷，施普林格科学与商业媒体，1995。[22] A. Kirsch 等，《反问题数学理论导论》，第120卷，Springer，2011。[23] 物理信息神经网络在线性二阶椭圆型和抛物型偏微分方程中的收敛性，《计算物理通讯》28 (5) (2020) 2042–2074。

[24] S. Wang, X. Yu, P. Perdikaris，PINN 何时以及为何训练失败：神经切核视角，《计算物理学杂志》449 (2022) 110768。[25] Z. Xiang, W. Peng, X. Liu, W. Yao，自适应损失平衡物理信息神经网络，《神经计算》496 (2022) 11–34。[26] R. Bischof, M. Kraus，物理信息深度学习的多目标损失平衡，arXiv 预印本 arXiv:2110.09813。[27] H. Son, S. W. Cho, H. J. Hwang，Al-PINN：用于物理信息神经网络的增广拉格朗日松弛法，arXiv 预印本 arXiv:2205.01059。[28] S. Zeng, Z. Zhang, Q. Zou，求解高维偏微分方程的自适应深度神经网络方法，《计算物理学杂志》463 (2022) 111232。[29] J. Yu, L. Lu, X. Meng, G. E. Karniadakis，用于正向与逆偏微分方程问题的梯度增强物理信息神经网络，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》393 (2022) 114823。[30] S. Wang, Y. Teng, P. Perdikaris，理解并缓解物理信息神经网络中的梯度流病态，《科学计算学会评论》43 (5) (2021) A3055–A3081。[31] A. D. Jagtap, K. Kawaguchi, G. Em Karniadakis，适用于深度神经网络和物理信息神经网络的局部自适应激活函数及斜率恢复，《英国皇家学会会刊 A》476 (2239) (2020) 20200334。[32] Y. Kim, Y. Choi, D. Widemann, T. Zohdi，基于浅层掩码自编码器的快速、准确的物理信息神经网络降阶模型，《计算物理学杂志》451 (2022) 110841。[33] G. I. Barenblatt，《尺度律》（剑桥应用数学丛书），剑桥大学出版社，英国剑桥，2003。[34] K. Hornik，多层前馈网络的逼近能力，《神经网络》4 (2) (1991) 251–257。[35] Y. Chen, L. Dal Negro，利用近场数据对光子纳米结构进行成像和参数反演的物理信息神经网络，APL Photonics 7 (1) (2022) 010802。[36] F. Pourahmadian, B. B. Guzina，岩石中非均质裂缝的弹性结构，《国际岩石力学与矿业科学杂志》106 (2018) 259–268。[37] X. Liu, J. Song, F. Pourahmadian, H. Haddar，时域与频域弹性逆散射：理论与实验，arXiv 预印本 arXiv:2209.07006。[38] F. Pourahmadian, B. B. Guzina, H. Haddar，用于非均质裂缝弹性波探测的广义线性采样法，《反问题》33 (5) (2017) 055007。[39] F. Cakoni, D. Colton, H. Haddar，《逆散射理论与透射特征值》，工业与应用数学学会，2016。[40] V. A. Morozov，《求解不适定问题的方法》，施普林格科学与商业媒体，2012。[41] R. Kress，《线性积分方程》，Springer，柏林，1999。[42] A. Paszke, S. Gross, S. Chintala, G. Chanan, E. Yang, Z. DeVito, Z. Lin, A. Desmaison, L. Antiga, A. Lerer，PyTorch 中的自动微分。[43] H. Brezis，《泛函分析、索伯列夫空间与偏微分方程》，施普林格科学与商业媒体，2010。

[44] T. Ha-Duong，关于迟滞势边界积分方程及其离散化，载于：《计算波传播专题》，Springer，2003，第301–336页。[45] R. T. Rockafellar，拉格朗日乘子与最优性，《SIAM 综述》35 (2) (1993) 183–238。[46] H. Everett III，求解资源最优分配问题的广义拉格朗日乘子法，《运筹学》11 (3) (1963) 399–417。[47] D. Liu, Y. Wang，采用极小极大架构训练物理约束神经网络的双二聚体法，《神经网络》136 (2021) 112–125。[48] F. Hecht，FreeFEM 的新进展++，《数值数学杂志》20 (3-4) (2012) 251–265。网址：https://freefem.org/[49] F. Pourahmadian, K. Napal，孔隙弹性近场逆散射，《计算物理学杂志》455 (2022) 111005。[50] A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimelshein, L. Antiga, A. Desmaison, A. Kopf, E. Yang, Z. DeVito, M. Raison, A. Tejani, S. Chilamkurthy, B. Steiner, L. Fang, J. Bai, S. Chintala，PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库，《神经信息处理系统进展》第32卷。[51] D. P. Kingma, J. Ba，Adam：一种随机优化方法，arXiv 预印本 arXiv:1412.6980。[52]物理信息神经网络的 PyTorch 实现，https://github.com/jayroxis/PINNs (2022)。[53] K. F. Graff，《弹性固体中的波动》，Courier Corporation，2012。