多尺度计算建模中机器学习的挑战与机遇

Phong C.H. Nguyen[1], Joseph B. Choi[1], H.S. Udaykumar[2,*], Stephen Baek[1,3,*]

[1]美国弗吉尼亚大学数据科学学院，弗吉尼亚州夏洛茨维尔，邮编22904[2]美国爱荷华大学机械工程系，爱荷华州爱荷华城，邮编52242[3]美国弗吉尼亚大学机械与航空航天工程系，弗吉尼亚州夏洛茨维尔，邮编22903

*通讯作者：hs-kumar@uiowa.edu，baek@virginia.edu

摘要：

许多机械工程应用都需要进行多尺度计算建模与仿真。然而，由于解空间的维度很高，求解复杂的多尺度系统仍然需要耗费大量计算资源。近年来，机器学习（ML）已成为一种颇具前景的解决方案，可用作代理模型、加速或增强传统数值方法。开创性研究表明，机器学习能够求解控制方程组，所得精度与直接数值方法相当，但计算速度显著更快。这些高速、高保真度的估算结果可为传统求解器提供更好的初始解，从而有助于求解复杂的多尺度系统。本文探讨了将机器学习用于复杂多尺度建模与仿真的机遇和挑战。我们首先概述了当前用于仿真多尺度系统的最先进机器学习方法，并重点介绍若干里程碑式进展。随后，我们讨论机器学习在多尺度计算建模中面临的当前挑战，例如对数据和离散化的依赖、可解释性，以及数据共享与协作平台开发。最后，我们提出了若干未来可能的研究方向。

关键词：机器学习、人工智能、计算建模、多尺度建模

1 引言

近年来，多尺度计算建模已成为许多机械工程应用的核心组成部分。之所以需要多尺度模型，是因为单尺度模型在描述不同空间和/或时间尺度上的物理定律与现象时存在局限。仅靠较大尺度的模型无法捕捉细尺度特征，也无法解析复杂机械系统中的关键细节；而较小尺度的模型在模拟发生于更大系统尺度上的物理现象时，计算效率低下。多尺度建模通过使用不同的数值模型来表示不同尺度上的物理定律与现象，并借助闭合模型连接各个尺度，从而权衡物理保真度与计算效率。在过去十年中，越来越多的研究采用了多尺度建模，并成功展示了其预测复杂现象的能力，应用领域包括流体力学 [1], [2], 材料建模与设计 [3], [4], 制造与过程建模[5], [6]。

广义而言，连接不同尺度模型主要有两种策略。层次多尺度建模方法[5], [7]–[9], 也称为序贯或解耦多尺度建模，会利用精细尺度模型预先计算本构关系（例如弹性常数、能量释放率）。这些精细尺度的感兴趣量（QoI）通常在“离线”状态下计算，随后用于系统尺度计算，以模拟可观测和可测量的更大尺度现象。相反，并发多尺度建模方法会计算粗尺度模型所需的感兴趣量

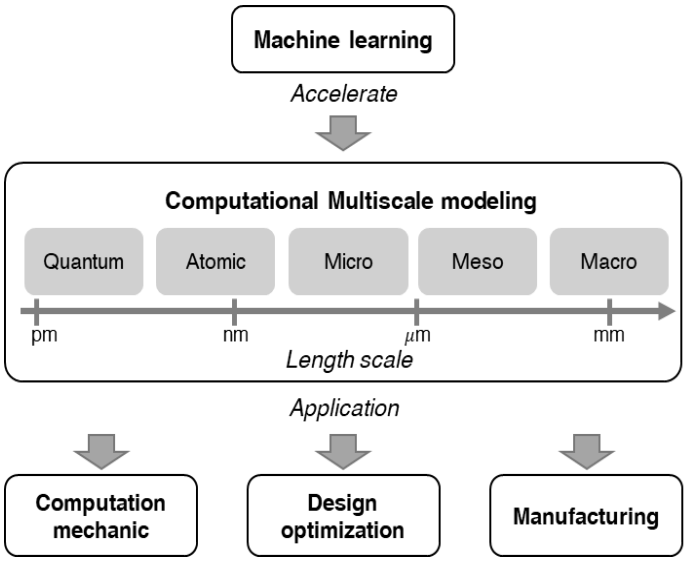

图 1. 机器学习可用于加速多尺度计算建模。应用示例包括计算力学、设计优化和制造建模。

“即时”计算所需量，并通过与精细尺度模型耦合，按需进行 [10]–[13]。层次化方法需要大量内存和存储空间来保存预先计算的感兴趣量，而随着问题规模增大，并发方法则面临高昂的计算成本。这些挑战限制了多尺度计算建模在现实世界应用中的可扩展性和实用性。

近期研究表明，机器学习（ML）有望克服传统多尺度建模方法的局限性。例如，为解决层次化建模中的内存和存储需求问题，可以应用机器学习技术学习一种粗略、低保真度且成本低廉的表示，即对预先计算的 QoI 进行表示学习 [14]。这样便可快速检索信息，而无需占用大量内存和存储空间。并发多尺度建模也能受益于现代深度学习（DL）[15] 模型，这些模型可以取代传统数值求解器，实现 QoI 的“即时”计算。先前研究表明，基于机器学习的仿真能够达到与直接数值模拟相当的保真度，同时大幅缩短计算时间 [16]。此外，机器学习还能加速逆问题的求解，直接提供符合设计约束的设计方案，无需采用传统的迭代优化流程[17]。

尽管在多尺度建模中应用机器学习前景广阔，先驱性研究也揭示了若干关键挑战。其中最显著的障碍之一是机器学习对数据的依赖性，现代深度学习模型尤其如此。机器学习/深度学习借助带有高质量标注的大规模数据集（例如图像标签和图像说明），在计算机视觉领域取得了显著成功。然而，多尺度建模问题通常并非如此，因为这类问题需要大量计算和繁重的数据收集工作。因此，在开发快速高效的数据生成方法的同时，研究界也可以采用“小样本学习”技术，例如迁移学习和元学习（第 3.1.1 节和第 3.1.2 节），以及协作式/共享学习方法（第 3.4 节）。

此外，大多数机器学习模型都依赖于训练过程中使用的离散化方式，这可能会限制它们在多尺度问题中的可扩展性和实用性，而这类问题往往会采用不同的离散化设置

使用。这个问题可以通过开发与离散化无关的机器学习模型来解决，例如采用连续卷积或神经算子的模型（第 3.2 节）。这类方法前景广阔，值得进一步研究。

最后，机器学习模型的“黑箱”性质给其在实际应用中的可信度和可解释性带来了挑战。机器学习预测虽然可能很准确，但训练过程中吸收并用于驱动预测的信息未必总能反映潜在的物理现象。因此，除了评估其统计性能之外，还必须解释预测是如何得出的，并考察模型的物理感知性。为此，开发解读机器学习预测的技术（如神经网络可视化，见第 3.3 节）至关重要，也需要付出更多努力。

本文探讨了机器学习在加速多尺度计算建模发展方面的潜力，并提出了应对相关挑战的潜在解决方案。本文结构如下：第 2 节介绍机器学习在多尺度建模中的若干成功应用案例。第 3 节讨论以往研究揭示的挑战，以及我们对潜在解决方案的看法。最后，第 4 节给出结论和评述。

2 多尺度计算建模中的机器学习示例

2.1 计算力学

2.1.1 流体建模 机器学习与

流体力学的交汇产生了天然的协同效应，因为二者在处理大型复杂数据集方面具有相似性。在传统流体力学中，人们需要处理大量来自不同来源的数据，包括实验、现场测量或大规模模拟。流体力学数据的分析仍主要依赖领域专业知识和传统统计分析，而这些方法涉及许多简化假设 [18]。近年来，机器学习的兴起，尤其是深度学习，已成为推动流体力学研究的重要力量，为解决更复杂的流体力学问题（如湍流及其建模）带来了机遇。借助机器学习的计算效率，可以推动流体流动建模取得进展，并对生物医学工程、航空航天工程、空中/水下机器人和自主系统等众多应用领域产生深远影响。

事实上，早在20世纪90年代，人工神经网络（ANN）等深度学习技术就已被用于模拟流体动力学 [19], [20] ，此后仍在不断发展 [21]。随着深度学习架构开发取得突破，流体流动建模的进展显著加快。循环神经网络（RNN）等机器学习方法已被用于对极端环境中的流动进行建模 [22], [23] 。与传统前馈神经网络不同，循环神经网络具有循环结构，能够将信息从网络的一个步骤传递到下一个步骤，使其保留先前输入的信息并影响当前输出。这一特性使循环神经网络能够考虑数据固有的顺序，因此非常适合流体力学建模；在这种建模中，关于演变流场的数据以图像、视频或时间序列的形式提供给机器学习算法。

另一种在流体建模中也取得成功的深度学习技术是生成对抗网络（GAN）。GAN 框架由两个神经网络组成，即生成器和判别器，它们通过对抗训练来生成高质量的合成数据。受 GAN 能够捕捉并生成逼真的复杂几何模式这一能力的启发，Kim 等人 [24] 已

应用 GAN 对各种复杂的流体行为进行建模。这些作者证明，GAN 能够准确捕捉速度场，从而为进一步应用创造了诸多机会，包括快速重建流体流动、时间重采样或流体数据压缩。

尽管目前基于深度学习的方法已取得成功，但仍存在一项局限：训练好的模型通常仅擅长对数据点进行插值，超出已知数据范围进行外推时，可靠性可能不足 [18]。这降低了训练模型的泛化能力和适用性，也阻碍了它们在现实世界应用中的使用。为解决这一局限，不仅需要扩展训练数据集，确保未来的大多数预测任务都落在训练数据的插值范围内，还需要开发外推能力更强的新建模方法。

2.1.2 材料微观结构建模 材料微观结构建模是机器学习进步所惠及的另一个领域

。机器学习能够通过提供高效、准确的方法，预测给定材料组成 [25] 或微观结构 [26] 的材料属性和行为，极大地促进材料微观结构建模过程。机器学习之所以具备这种建模能力，是因为它能够识别并从数据中学习复杂模式，而这些模式可能难以通过传统统计方法捕捉。这种建模能力使机器学习算法能够学习多种微观结构形貌参数（例如晶粒尺寸、晶粒取向或缺陷分布）与输出的材料属性或力学响应之间的复杂关系。随后，这些快速而准确的预测可用于设计具有特定属性的新材料，或优化现有材料以提升性能 [27], [28]。

近年来，随着神经网络逼近能力的提升，深度学习（DL）取得的进展进一步加速了基于机器学习（ML）的材料微观结构建模。现代深度学习方法（如卷积神经网络（CNN））能够高保真地估算载荷作用下的材料微观结构响应，其精度可与传统数值方法相媲美，但计算速度快数个数量级 [16], [29]。物理信息机器学习 [30]–[32] （PIML）是深度学习方法的另一分支，已广泛用于模拟多尺度材料建模中的复杂控制方程，并取得了越来越显著的成效。在 PIML 中，先验物理知识通过学习目标 [30], 或架构设计 [16], [31]融入深度学习算法的设计中。开创性研究 [16],表明，融入先验物理知识有助于减少对大型数据集的需求，同时保持深度学习模型的预测精度和泛化能力。基于深度学习的方法具有强大的预测能力和高计算效率，因此非常适合作为设计优化 [33], 、多尺度 SPP 关联建模 [29], [34], [35], 和不确定性量化任务[36]的代理模型。

2.1.3 降低动力系统的非线性 许多复杂机械系统具有很强的非线性，具备正.....

为获得稳定可靠的数值解带来了重大挑战，这通常需要极高的网格分辨率，才能解析激波、界面和反应前沿等特征处的物理现象。非线性以及时空尺度层级中可能出现的特征，使这类问题的计算耗时很长。为应对这些挑战，Koopman 算子理论 [37], [38], 近年来日益受到关注；其基本思想是，任何高度非线性动力系统都可以用一个无限维线性算子来表示，该算子称为 Koopman 算子。这种对非线性动力系统的线性表示，有助于分析、设计和控制复杂

系统，运用成熟的线性系统方法。这里的挑战在于如何从数据中近似 Koopman 算子。由此推动了动态模态分解（DMD）等数值方法的发展 [39], , 该方法利用线性观测函数；其扩展版本（eDMD） [40],则通过引入非线性观测函数扩展了原始 DMD。这些方法在对非线性流进行建模方面已取得成功 [39], , 例如杜芬振子和 Kuramoto-Sivashinsky 偏微分方程 [40], 等。DMD 能提取丰富且具有物理意义的基函数，显著提升涉及时间序列数据的多种分类和预测任务的准确性 [40], [41]。除了 DMD 及其变体之外，凭借神经网络的表征能力，深度学习也被专门用于对观测函数的 Koopman 不变子空间建模 [38], [42], [43]。基于 Koopman 的方法的优势在于，无需先验知识或明确定义的模型，因此能够扩展应用于各种物理机制未知的问题。

2.2 拓扑优化 拓扑优化（TO）是

另一类能够从机器学习中显著获益的计算设计问题。拓扑优化旨在确定给定设计域内材料的最优分布，以实现设计目标（例如高强度），同时满足设计约束（例如低重量） [44]。凭借这些能力，拓扑优化在许多材料与结构设计应用中发挥着关键作用 [4], [37]–[39]。然而，许多拓扑优化方法面临着反复计算代价高昂的目标函数这一挑战，该函数在每次迭代中都需要调用有限元求解器 [17]。这些计算过程可能耗时很长，并且需要大量计算资源，尤其是在涉及非线性分析的问题中，例如塑性、黏弹性和动力学问题。为此，机器学习模型可以充当代理模型，替代目标函数中计算成本高昂的有限元计算，从而加速设计优化过程 [45]–[47]。此外，基于机器学习的模型计算成本低且可微，因此适用于基于梯度的拓扑优化方法，进而能够进一步促进优化过程 [48]。

除了用作替代计算成本高昂的数值模型的代理模型外，机器学习还可用于直接建模拓扑优化过程。在这种方法中，机器学习模型以设计目标和约束条件为输入，并输出最终的拓扑设计。从承受静载荷的结构 [49] 到导热问题 [50], , 各种拓扑优化问题都已通过基于卷积神经网络的方法得到有效解决。深度生成模型（如生成对抗网络）也可根据设计目标和约束条件预测最优拓扑设计。文献报道表明，基于生成对抗网络的方法在针对特定性能优化材料微观结构方面取得了显著成效 [17], [51], [52]。最后，强化学习也已在重复优化问题中取得了一些成功，相关成果见先前的研究 [28], [53]。

2.3 面向制造的设计 基于机器学习的方法也具有优势

由于具备强大的建模能力和较高的计算效率，机器学习在面向制造的设计（DFM）中颇具优势。在面向制造的设计的计算建模中，融合工艺-结构-性能关联是一项关键任务，但仍面临挑战。金属增材制造等先进制造技术涉及多种物理和化学过程，这些过程在原材料转化过程中跨多个尺度发生。由于这些过程十分复杂，有限元分析（FEA）或元胞自动机等传统数值方法在工艺优化、监测和控制方面成本高昂且效果不佳。在这种情况下，可以使用机器学习

简化计算模型，将其用作代理模型，甚至完全替代成本高昂的数值模型[54]。

例如，Tapia 等人 [55] 采用高斯过程（GP）预测激光粉末床熔融制造 316L 不锈钢时的熔池深度。该 GP 模型利用基于物理的高保真数值模拟数据进行训练，能够根据激光功率、速度和光斑尺寸等输入，准确预测单道打印件的熔池深度。此外，使用 GP 还可以评估预测中的不确定性，从而有助于制定稳健可靠的设计与控制决策 [56]。同样，Wang 等人 [57] 提出了一种物理信息驱动的数据建模框架，可连接不同层级的多个数据驱动代理模型，从而有效估计制造不确定性。

简而言之，将机器学习应用于面向制造的设计，有望改进复杂制造过程的优化与控制。然而，目前这一研究领域尚未受到足够关注，仍需投入更多努力以推动其进一步发展。

3 多尺度计算建模中机器学习面临的挑战及潜在解决方案 如前所述，文献中已有不少将机器学习应用于多尺度计算建模并取得显著成果的报道。然而，在机器学习能够应用于现实世界之前，仍有若干关键障碍需要克服。本节将探讨这些挑战，并提出潜在的解决方案。

3.1 数据依赖性

将机器学习用于多尺度计算建模面临着若干需要关注的挑战。尽管深度学习等现代机器学习技术能够实现较高的预测性能，但它们需要大量训练数据。然而，收集此类训练数据往往既昂贵又耗时，尤其是在处理实验数据时。通过数值模拟生成的合成数据或许能提供一种替代方案，但由于多尺度问题十分复杂，生成这类数据也可能需要大量计算资源 [16], [58]。训练数据不足可能导致预测错误或过拟合，从而降低机器学习算法的泛化能力和可信度。

除了训练数据的数量，数据质量对机器学习算法的成功也至关重要。包含缺失值或大量离群值/噪声的训练数据可能导致机器学习模型学习到错误的模式，进而造成预测性能不佳，阻碍机器学习在实际场景中的应用。

在下面的小节中，我们将讨论这一方面的若干潜在方向，包括迁移学习和元学习。

3.1.1 迁移学习：利用以往训练中的先验知识

训练用于计算建模的机器学习模型需要大量数据，而收集这些数据往往需要耗费大量时间和精力。遗憾的是，当出现新问题时，必须重复相同的数据收集过程，并使用新收集的数据集重新训练机器学习模型。然而，重复这一漫长而繁琐的数据收集过程并不可取，因为为用于

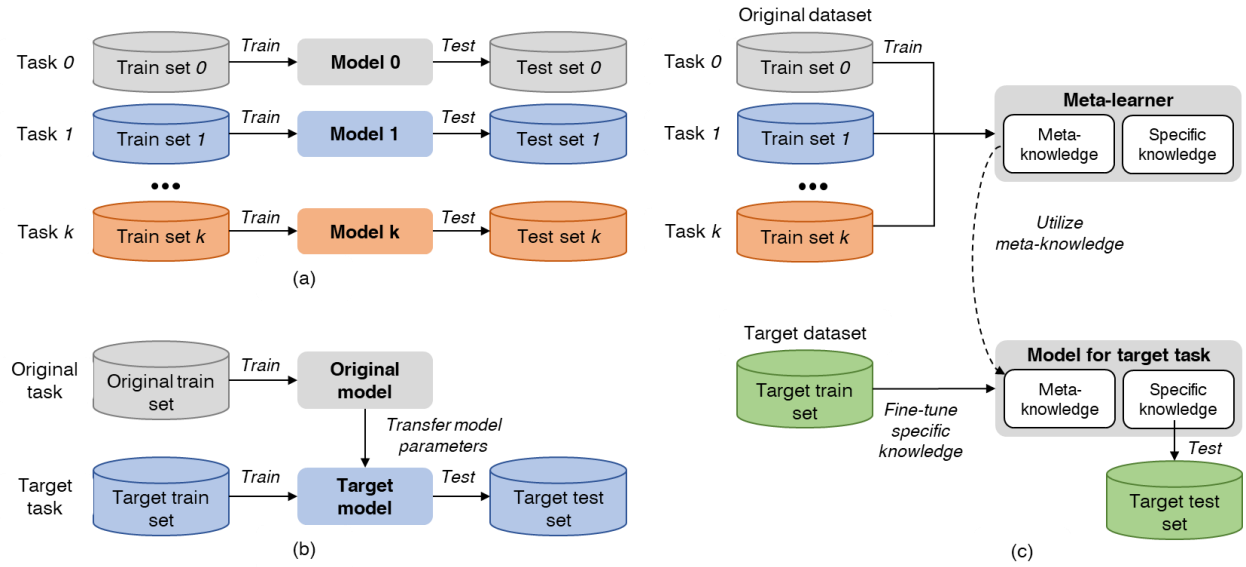

图2. 训练机器学习模型的三种类型。(a) 针对每项任务从头开始训练。(b) 迁移学习。(c) 元学习。

多尺度 计算建模的机器学习模型收集数据通常成本高昂。此外，从头开始重新训练机器学习模型（图2(a)）未必总能获得与先前训练结果相近的统计性能。在这种情况下，可以考虑利用从以往训练会话中获得的先验知识，以减少为新问题获取大型训练数据集的需求。

在此背景下，迁移学习 [59] （图2(b)）已在许多通用机器学习应用中证明行之有效，例如图像识别 [60] 和语言建模 [61]。在迁移学习中，将预训练机器学习模型的模型参数作为当前训练过程的起点；该模型是在相似但不同的数据集上训练得到的。在新的训练过程中，只对一部分模型参数进行较小幅度的调整，而大部分模型参数可以“冻结”，不作更新。这样，机器学习模型只需利用少量新增数据微调模型参数，即可学习新的问题。迁移学习能够减少对大型数据集的需求，同时保持机器学习模型的预测性能。先前研究表明，迁移学习有助于训练机器学习模型，使其能够预测结构在新的加载情景 [62]下承受静载荷时的变形。研究还发现，迁移学习能够成功预测含能材料微观结构在新的冲击加载条件 [34]下的响应。

3.1.2 元学习：学习泛化知识以快速适应

在迁移学习的基础上更进一步的，是更具泛化性的“元学习”概念（图2(c)）。元学习使机器学习算法能够利用解决相似任务所积累的经验，快速学习并适应新任务。在此背景下，迁移学习可以视为元学习的一种特定情况。

从概念上讲，在元学习中，会构建一个元学习器，以学习不同学习任务中的通用知识（元知识），并将其作为先验来学习每项任务的特定知识，从而最大化似然：

$$P(\theta_i|D_i, D_0) = \int_{\phi} P(\theta_i|\phi, D_i)P(\phi|D_0)d\phi \approx P(\theta_i|\phi^*, D_i)P(\phi^*|D_0) \quad (1)$$

在式（1）中，特定任务 σ_i 上的元知识可表示为元知识 ϕ 与特定知识 θ_i 的组合。元知识通过在参考数据集 D_0 上训练获得，以最大化后验 $\phi^* = \text{argmax}_{\phi} P(\phi|D_0)$。具体而言，给定参考数据集 D_0，算法将首先利用参考数据集 D_0 的丰富信息来学习可泛化的知识，然后以此为基础，仅使用少量数据集 D_i 来学习特定任务 σ_i 的特定知识 θ_i^*。

以往研究表明，尽管元学习方法只使用相对较小的数据集进行训练，但仍能在未见过的任务上取得良好的预测性能。例如，Liu 等人 [63] 使用 Reptile 算法（一种元学习初始化方法）对物理信息神经网络（PINN）进行初始化。作者证明，与传统的随机初始化方法相比，采用元学习算法引导的初始化可以加快 PINN 的训练速度。这种新型 PINN 训练范式已在多种正问题和反问题中成功验证。另一项研究中，Li 等人 [64] 针对铣削过程建模中的刀具磨损预测问题，提出了一种物理信息元学习（PIML）模型。作者引入了一个物理信息损失项，以确保元学习器学会刀具磨损率与切削力之间的稳健关系，从而促进参数估计并增强 PIML 模型的可解释性。

以往的示例表明，元学习非常适合多尺度问题计算建模中机器学习的小数据情境。元学习无需大量训练数据集，便能快速适应新的运行条件，例如新材料、几何域或边界条件。此外，“学会学习”的过程也有助于弥合模拟与真实世界实验之间的知识鸿沟。目前，机器学习模型通常使用模拟数据进行训练，因为物理实验获得的观测数据往往有限且成本高昂。然而，数值模拟的理想化环境与物理实验的真实世界环境存在显著差异，这可能导致机器学习模型在真实世界环境中表现不佳。在这种情况下，可以利用元学习将预训练的机器学习模型从数值模拟快速适配到真实世界环境。具体而言，可以训练元学习器，使其同时学习代表底层物理定律的元知识，以及代表数据集运行环境的特定知识，即数值模拟的理想假设或真实世界环境。在部署阶段，元学习便可利用少量真实世界实验数据，快速将基于理想环境假设的机器学习模型适配到真实世界环境。通过这种方法，仅使用数值模拟进行训练的机器学习模型也能快速适配并在真实世界环境中运行。

3.2 离散化至关重要：离散化无关模型的必要性

将机器学习应用于多尺度计算建模还面临另一项挑战，即对.....的依赖
机器学习算法对分析域离散化的依赖性。训练完成后，大多数常见的机器学习技术（如卷积神经网络）仅适用于特定的离散化设置（图 3(a)），对于不同于训练数据离散化设置的情况，泛化能力较差。这种离散化依赖性给多尺度计算建模中的机器学习模型训练带来了重大挑战。

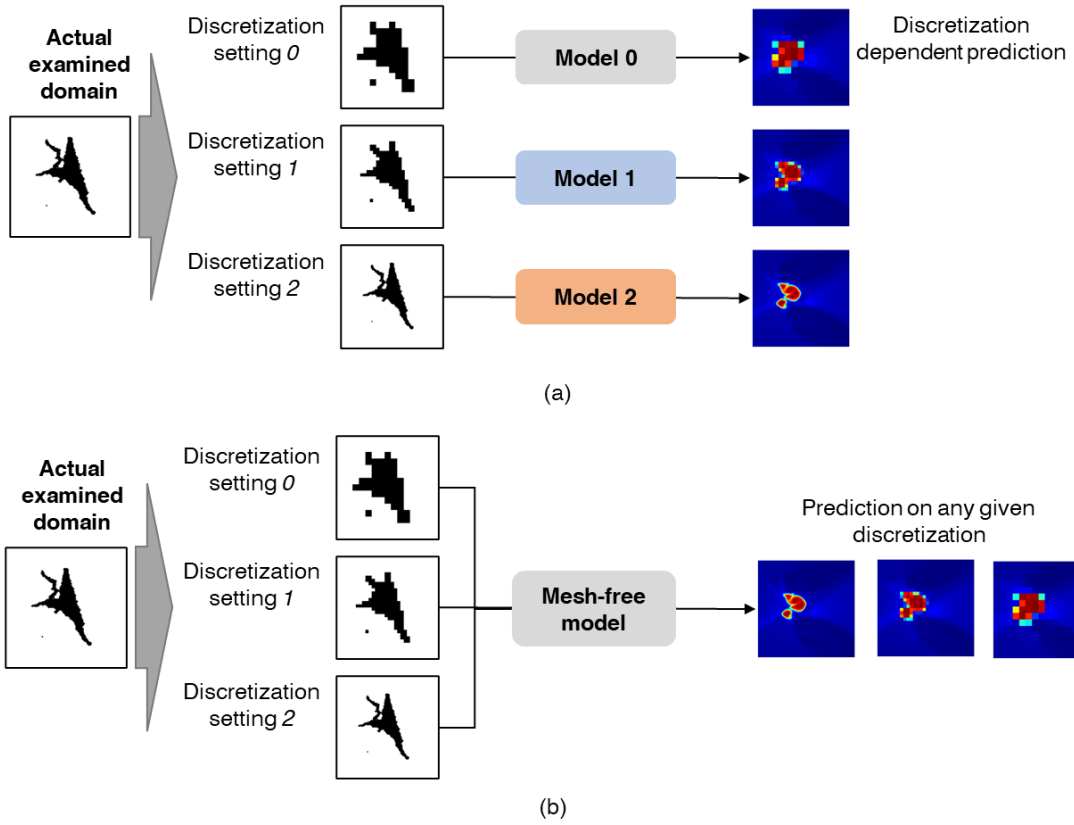

图 3：离散化可变模型（a）与离散化不变模型（b）的区别。离散化可变模型无法泛化到训练数据的离散化设置之外。相比之下，离散化不变模型可以在多种离散化设置下进行训练，其预测结果不依赖于输入场的离散化方式。

机器学习算法对离散化的依赖性，要求人们投入精力，为数据集中的所有数据样本确定能够确保收敛性的最优离散化设置。然而，待研究域的收敛性在很大程度上取决于其几何特征，而这些特征在训练数据集的所有数据样本中存在显著差异。因此，寻找最优离散化设置的成本极高且非常耗时。为此，开发不依赖离散化的机器学习模型（图 3(b)）更为可取，因为这类模型无论被考察域采用何种离散化方式，都能进行预测。

人们已着手开发与离散化无关的机器学习模型，用于物理问题的计算建模。例如，Wandel 等人[65] 通过使用埃尔米特样条核进行插值，将状态变量场的离散表示转换为连续表示。每个离散网格点均存储埃尔米特样条常数，并可由卷积神经网络处理。该方法成功模拟了多种复杂流动现象，例如卡门涡街、马格努斯效应、多普勒效应、干涉图样和波反射。定量评估还表明，对状态变量的连续表示使用卷积神经网络，能够提高机器学习模型的准确性，同时保持其计算效率优势。在另一项研究中，Sun 等人[66] 提出使用基于泽尼克多项式的连续卷积核进行标量场回归。与传统方法相比，该方法的预测性能有所提升

——采用离散图卷积的方法——，并且能够在具有不同离散化设置的任意几何域上进行预测。神经算子是另一种具有与离散化无关特性的方法[67]–[71]。在这种方法中，神经网络经过训练以学习算子，即神经算子，从而在无限维输入函数空间与输出函数空间之间建立映射。由于神经算子经过训练，可在函数空间上运行，因此其预测不受所研究域的离散化设置影响，同时仍能保证预测精度[71]。

3.3 机器学习模型的可解释性 机器学习在多尺度

计算建模中展现出巨大潜力，前文已有讨论。然而，这些预测的可信度仍令人十分担忧，因而阻碍了它们在现实世界应用中的使用。这种担忧源于机器学习预测的“黑箱”特性。机器学习模型通常经过训练以优化预先设定的目标函数，但这些函数可能无法充分描述现实世界物理，因此机器学习模型可能只是在“记忆”观测数据，却未能意识到或表征其背后的物理现象。正如 Nguyen 等人所报告的， [16], 尽管为通用目的开发的机器学习模型采用了物理学无关架构，且预测性能相对较高，但往往无法捕捉潜在的物理定律。因此，在将这些模型用于实际计算建模之前，确保机器学习预测的可信度和物理感知性至关重要。

要证明机器学习预测的可信度，就必须开发能够解释机器学习模型预测的方法，即理解机器学习预测背后的依据。目前，物理科学领域已开展了一些初步工作，致力于开发解释机器学习预测的方法。例如， Nguyen 等人[16], 利用显著性图可视化，突出显示在含能材料建模中对能量局域化形成有重大影响的“关键”微观结构位置。研究人员将解释结果与以往发现进行了比较，结果表明，显著性图识别结果与文献中关于“关键”含能材料微观结构特征的描述高度一致。在另一项研究中，Lellep 等人[72] 使用 Shapley 加性解释（SHAP）算法，探究影响流体动力学中机器学习预测的主要因素。作者展示了该方法在多种流体动力学数据集中的适用性，其中包括对平面库埃特流的评估。

3.4 数据共享与协作的集中式平台 大型数据库（如 ImageNet [73], MNIST [74], 等）

在计算机视觉和语言建模领域的机器学习取得成功方面发挥着至关重要的作用。类似地，集中式数据库为解决计算建模中机器学习算法缺乏高质量训练数据这一难题提供了潜在方案。此外，随着云计算技术的发展，这些平台可以扩展为用于共享和协同学习的平台，将计算分析人员、实验人员和机器学习研究人员汇聚在一起，以促进有效协作。遗憾的是，目前尚缺乏这样的平台。

图 4 展示了我们提出的、用于计算建模中机器学习数据共享与协作的集中式平台。该平台受到 OpenML [75], 的启发，OpenML 是机器学习社区中一个成功的共享平台示例。该平台由三个主要组件构成。与若干现有的科学数据共享平台类似 [76], [77], ，我们提出的平台包含一个开放式科学数据库，用于共享和检索数据。此外，平台还包含机器学习模型库，以便共享此前表现良好的机器学习模型。最后，该平台还包含一个交互式

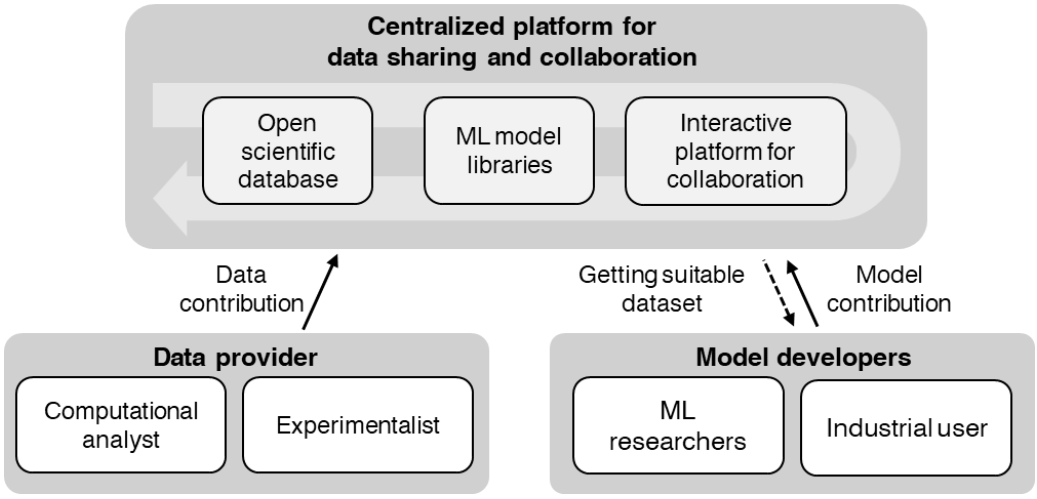

图 4：集中式平台对于数据与模型共享以及支持数据提供者和模型开发人员之间的协作是必不可少的。

环境，使科学家能够围绕特定项目开展协作。凭借上述功能，所提出的集中式数据共享平台能够建立通用格式和协议，以促进数据与模型共享。由于工程数据通常具有异质性，且可能来自多个来源，这类共享平台能够丰富可用于训练机器学习模型的数据集，从而帮助缓解训练数据短缺的问题。

拟议共享平台的另一项重要功能，是通过交互式平台促进协作。在这一协作平台中，可以向研究人员推荐若干最适合特定问题的数据集和机器学习模型。研究人员随后可以决定是否采用推荐的数据集和模型，或使用自己的数据集和模型。此外，该平台还允许机器学习开发人员根据模型在当前数据集上的表现，请求或推荐用于仿真或实验的其他数据样本。因此，实验人员或计算分析人员可以凭借其专业知识确认这些数据样本的有效性，或推荐替代的数据样本。

与传统数据共享方法相比，这种协作机制具有多项优势。首先，由于协作平台推荐的训练数据集质量已通过先前的训练会话得到验证，该机制可以缩短收集和预处理训练数据所需的时间。此外，通过这一机制，机器学习开发人员能够获取有意义且有价值的数据，从而提升最终机器学习模型的预测性能。最后，这种机制有助于验证机器学习算法的鲁棒性。在计算建模中，机器学习模型通常基于单个数据集进行训练，这可能导致机器学习预测偏向该训练数据集。在这种协作环境下，机器学习模型可以在多个不同的数据集上进行训练和验证，从而增强其鲁棒性和泛化能力。

4 结论 多尺度计算

计算建模在许多机械工程应用中发挥着关键作用，例如计算力学、机械设计与优化，以及制造/过程建模。尽管多尺度计算建模有望捕捉复杂的物理现象，但高昂的计算成本阻碍了相关研究的进展。为此，机器学习可以成为一种可行的选择，

可通过增强多尺度计算模型，或作为多尺度计算模型的代理模型，助力多尺度物理系统的分析。

然而，要成功将机器学习应用于多尺度物理系统的计算建模，仍需克服若干障碍。首要且亟待解决的问题是大数据依赖性。与图像或文本分类等传统机器学习问题不同，科学数据的收集既困难又成本高昂，对于多尺度物理系统而言尤其如此。缺少大规模、高质量的训练数据集，会显著降低机器学习模型的泛化能力和鲁棒性。探索通过物理信息机器学习、迁移学习和元学习利用先验知识，都是应对这一挑战的可行方案。另一个问题是，如何处理机器学习算法对研究对象离散化设置的依赖。为解决这一问题，基于连续表示开发机器学习方法或应用神经算子，都是未来可能的发展方向。除了提升基于机器学习的计算模型的统计性能，同样重要的是验证机器学习预测对物理规律的认知能力及其可信度。最后，有必要建立一个用于数据与模型共享的集中式平台，以促进算法开发并推动多尺度计算建模领域的协作。

除少数开创性研究外，上述问题仍缺乏充分研究。因此，未来研究有机会探索更好的解决方案，以应对这些挑战。一旦克服这些障碍，机器学习有望显著加快多尺度计算建模的发展，并促进新颖且更有效的机械系统的发现。

致谢

本文研究工作获得了美国空军科学研究办公室（AFOSR）多学科大学研究计划（MURI）项目的资助（资助编号：FA9550-19-1-0318），以及美国国家科学基金会（NSF）“设计材料以革新和构建我们的未来”（DMREF）项目的资助（资助编号：2203580）。

参考文献

[1] N. S. Martys 和 J. G. Hagedorn，“采用离散玻尔兹曼方法对非均质材料中的流体输运进行多尺度建模”，Mater Struct，第 35 卷，第 10 期，第 650–658 页，2002年，doi: 10.1007/BF02480358。[2] S. Chen、M. Wang 和 Z. Xia，“多尺度流体力学与建模”，Procedia IUTAM，第 10 卷，第 100–114 页，2014年，doi: https://doi.org/10.1016/j.piutam.2014.01.012。[3] J. Fish、G. J. Wagner 和 S. Keten，“材料中的介观与多尺度建模”，Nat Mater，第 20 卷，第 6 期，第 774–786 页，2021年，doi: 10.1038/s41563-020-00913-0。[4] R. Sivapuram、P. D. Dunning 和 H. A. Kim，“通过多尺度拓扑优化同时进行材料与结构优化”，《结构与多学科优化》，第 54 卷，第 5 期，第 1267–1281 页，2016 年，doi: https://doi.org/10.1007/s00158-016-1519-x。[5] J. Gawad、A. van Bael、P. Eyckens、G. Samaey、P. van Houtte 和 D. Roose，“板材成形中织构诱导塑性各向异性的分层多尺度建模”，Comput Mater Sci，第 66 卷，第 65–83 页，2013年，doi: https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.05.056。

[6] M. Markl 和 C. Körner，“粉末床增材制造的多尺度建模”，Annu Rev Mater Res，第 46 卷，第 1 期，第 93–123 页，2016年，doi: 10.1146/annurev-matsci-070115-032158。[7] A. Sridhar、V. G. Kouznetsova 和 M. G. D. Geers，“局域共振声学超材料的均质化：迈向新兴富集连续体”，计算力学，第 57 卷，第 3 期，第 423–435 页，2016年，doi: 10.1007/s00466-015-1254-y。[8] C. Oskay 和 J. Fish，“基于特征变形的降阶均质化：非均质材料的失效分析”，计算方法与应用力学工程，第 196 卷，第 7 期，第 1216–1243 页，2007年，doi: https://doi.org/10.1016/j.cma.2006.08.015。[9] Q. Yu 和 J. Fish，“针对具有多重空间和时间尺度的多物理场问题的多尺度渐近均质化：热黏弹性耦合示例问题”，Int J Solids Struct，第 39 卷，第 26 期，第 6429–6452 页，2002年，doi: https://doi.org/10.1016/S0020-7683(02)00255-X。[10] Krishna Muralidharan、P A Deymier 和 J H Simmons，“一种用于连接弹性连续体与原子系统的并发多尺度有限差分时域/分子动力学方法”，Model Simul Mat Sci Eng，第 11 卷，第 4 期，第 487 页，2003年，doi: 10.1088/0965-0393/11/4/306。[11] J. Fish 和 W. Chen，“基于多重网格原理的离散到连续体的桥接”，计算方法与应用力学工程，第 193 卷，第 17 期，第 1693–1711 页，2004年，doi: https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.022。[12] G. S. Smith、E. B. Tadmor、N. Bernstein 和 E. Kaxiras，“硅纳米压痕的多尺度模拟”，Acta Mater，第 49 卷，第 19 期，第 4089–4101 页，2001年，doi: https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00267-1。[13] A. K. Nair、D. H. Warner、R. G. Hennig 和 W. A. Curtin，“耦合量子尺度和连续体尺度以预测裂纹尖端的位错形核”，Scr Mater，第 63 卷，第 12 期，第 1212–1215 页，2010年，doi: https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.08.038。[14] Y.-C. Chan、F. Ahmed、L. Wang 和 W. Chen，“METASET：探索形状与属性空间，实现数据驱动的超材料设计”，《机械设计杂志》，第 143 卷，第 3 期，2020年11月，doi: 10.1115/1.4048629。[15] I. Goodfellow、Y. Bengio 和 A. Courville，《深度学习》。麻省理工学院出版社，2016年。[16] P. C. H. Nguyen、Y.-T. Nguyen、J. B. Choi、P. K. Seshadri、H. S. Udaykumar 和 S. Baek，“PARC：物理感知循环卷积神经网络，用于同化含能材料的介观反应力学”，arXiv，第 arXiv:2204.07234 卷，2022年4月，doi: 10.48550/arxiv.2204.07234。[17] H. T. Kollmann、D. W. Abueidda、S. Koric、E. Guleryuz 和 N. A. Sobh，“深度学习在二维超材料拓扑优化中的应用”，Mater Des，第 196 卷，第 109098 页，2020年，doi: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.109098。[18] S. L. Brunton、B. R. Noack 和 P. Koumoutsakos，“流体力学中的机器学习”，Annu Rev Fluid Mech，第 52 卷，第 1 期，第 477–508 页，2020年1月，doi: 10.1146/annurev-fluid-010719-060214。[19] I. Grant 和 X. Pan，“用于粒子图像测速图像分析的多层神经网络性能研究”，Exp Fluids，第 19 卷，第 3 期，第 159–166 页，1995年，doi: 10.1007/BF00189704。

[20] C. L. Teo、K. B. Lim、G. S. Hong 和 M. H. T. Yeo，“一种用于分析粒子图像测速照片的神经网络方法”，载于《1991年IEEE系统、人类与控制论国际会议论文集》，1991年，第1535–1538页，第3卷。doi：10.1109/ICSMC.1991.169906。[21] S. L. Brunton、B. R. Noack 和 P. Koumoutsakos，“流体力学中的机器学习”，《流体力学年度评论》，第52卷，第1期，第477–508页，2020年1月，doi：10.1146/annurev-fluid-010719-060214。[22] Z. Y. Wan、P. Vlachas、P. Koumoutsakos 和 T. Sapsis，“复杂动力系统中极端事件的数据辅助降阶建模”，《公共科学图书馆·综合》，第

13, 5, 0197704 2018, 卷,
[ ] 10 1371 0197704
第 13, 5, 0197704 2018, 期,
[ ] 10 1371 0197704

页码 e -，在线发表于5月。可访问：https://doi.org/ 。 /journal.pone。[23] P. R. Vlachas、W. Byeon、Z. Y. Wan、T. P. Sapsis 和 P. Koumoutsakos，“利用长短期记忆网络对高维混沌系统进行数据驱动预测”，《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》，第474卷，第2213期，文章编号20170844，2018年，doi：10.1098/rspa.2017.0844。[24] B. Kim、V. C. Azevedo、N. Thuerey、T. Kim、M. Gross 和 B. Solenthaler，“深度流体：用于参数化流体模拟的生成网络”，2018年6月，doi：10.1111/cgf.13619。[25] B. Meredig 等，“利用机器学习在无约束成分空间中组合筛选新材料”，《物理评论B》，第89卷，第9期，文章编号94104，2014年3月，doi：10.1103/PhysRevB.89.094104。[26] A. Bhaduri、A. Gupta 和 L. Graham-Brady，“利用深度学习方法预测纤维增强复合材料中的应力场”，《复合材料B：工程》，第238卷，文章编号109879，2022年，doi：https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.109879。[27] Z. Rao 等，“机器学习助力高熵合金发现”，《科学》（1979），第378卷，第6615期，第78–85页，2022年10月，doi：10.1126/science.abo4940。[28] P. C. H. Nguyen、N. N. Vlassis、B. Bahmani、W. Sun、H. S. Udaykumar 和 S. S. Baek，“利用生成对抗网络和强化学习合成多孔介质的可控微观结构”，《科学报告》，第12卷，第1期，文章编号9034，2022年，doi：10.1038/s41598-022-12845-7。[29] A. Gupta、A. Bhaduri 和 L. Graham-Brady，“基于深度学习框架的加速多尺度力学建模”，2022年12月，doi：10.48550/arxiv.2212.14601。[30] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，“物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架”，《计算物理学杂志》，第378卷，第686–707页，2019年，doi：https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045。[31] R. Pokharel、A. Pandey 和 A. Scheinker，“面向多晶材料全场三维微观结构及微观力学场演化的物理信息数据驱动代理建模”，JOM，第73卷，第11期，第3371–3382页，2021年，doi：10.1007/s11837-021-04889-3。[32] E. Haghighat、M. Raissi、A. Moure、H. Gomez 和 R. Juanes，“用于固体力学反演与代理建模的物理信息深度学习框架”，《计算方法与应用力学工程》，第379卷，文章编号113741，2021年，doi：https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113741。

[33] X. Zhang、F. Xie、T. Ji、Z. Zhu 和 Y. Zheng，“用于气动外形优化的多保真深度神经网络代理模型”，《计算方法与应用力学工程》，第373卷，文章编号113485，2021年，doi：https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113485。[34] P. C. H. Nguyen、Y.-T. Nguyen、P. K. Seshadri、J. B. Choi、H. S. Udaykumar 和 S. Baek，“用于非均质含能材料多尺度冲击波至爆轰模拟中能量局域化的物理感知深度学习模型”，2022年11月，doi：10.48550/arxiv.2211.04561。[35] W. Yan 等，“用于推导增材制造工艺–结构–性能关系的数据驱动多尺度多物理场模型”，《计算力学》，第61卷，第5期，第521–541页，2018年，doi：10.1007/s00466-018-1539-z。[36] A. Olivier、M. D. Shields 和 L. Graham-Brady，“用于数据驱动材料建模中不确定性量化的贝叶斯神经网络”，《计算方法与应用力学工程》，第386卷，文章编号114079，2021年，doi：https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114079。[37] B. O. Koopman，“希尔伯特空间中的哈密顿系统与变换”，《美国国家科学院院刊》，第17卷第5期，第315–8页，1931年。[38] B. Lusch、J. N. Kutz 和 S. L. Brunton，“用于非线性动力学通用线性嵌入的深度学习”，《自然·通讯》，第9卷，第1期，文章编号4950，2018年，doi：10.1038/s41467-018-07210-0。[39] C. W. Rowley、I. Mezic、S. Bagheri、P. Schlatter 和 D. S. Henningson，“非线性流的谱分析”，《流体力学杂志》，第641卷，第115–127页，2009年，doi：DOI：10.1017/S0022112009992059。[40] Q. Li、F. Dietrich、E. M. Bollt 和 I. G. Kevrekidis，“结合字典学习的扩展动态模态分解：Koopman 算子的自适应数据驱动谱分解”，《混沌：非线性科学跨学科期刊》，第27卷，第10期，文章编号103111，2017年10月，doi：10.1063/1.4993854。[41] A. Surana，“用于时间序列建模与分析的 Koopman 算子框架”，《非线性科学杂志》，第30卷，第5期，第1973–2006页，2020年，doi：10.1007/s00332-017-9441-y。[42] E. Yeung、S. Kundu 和 N. O. Hodas，“学习非线性动力系统 Koopman 算子的深度神经网络表示”，《2019年美国控制会议（ACC）》，第4832–4839页，2017年。[43] N. Takeishi、Y. Kawahara 和 T. Yairi，“为动态模态分解学习 Koopman 不变子空间”，载于《第31届神经信息处理系统国际会议论文集》，2017年，第1130–1140页。[44] M. P. Bendsøe 和 O. Sigmund，《拓扑优化》，2004年。doi：https://doi.org/10.1007/978-3-662-05086-6。[45] R. v Woldseth、N. Aage、J. A. Bærentzen 和 O. Sigmund，“论人工神经网络在拓扑优化中的应用”，《结构与多学科优化》，第65卷，294，2022年，10，10 1007 00158 022 03347 1 第[45] 期，第[45] 页。doi：. /s - - - .[46] D. A. White、W. J. Arrighi、J. Kudo 和 S. E. Watts，“利用神经网络代理模型进行多尺度拓扑优化”，《计算方法与应用力学工程》，第346卷，第1118–1135页，2019年，doi：10.1016/j.cma.2018.09.007。

[47] F. Ghavamian 和 A. Simone，“使用循环神经网络加速具有历史依赖性的材料的多尺度有限元模拟”，计算方法与应用力学工程，第357卷，2019年，10 1016 2019 112594 doi: . /j.cma. . .[48] L. Wang、Y.-C. Chan、F. Ahmed、Z. Liu、P. Zhu 和 W. Chen，“用于超材料系统基于机理的学习与设计的深度生成建模”，计算方法与应用力学工程，第372卷，113377页，2020年，doi: https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113377.[49] D. W. Abueidda、S. Koric 和 N. A. Sobh，“利用深度学习优化具有非线性的二维结构拓扑”，计算结构，第237卷，106283页，2020年，doi: https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2020.106283.[50] Q. Lin、J. Hong、Z. Liu、B. Li 和 J. Wang，“基于深度学习方法的导热拓扑优化研究”，《国际传热与传质通讯》，第97卷，第103–109页，2018年，doi: https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2018.07.001.[51] M. M. Behzadi 和 H. T. Ilieş，“GANTL：借助条件生成对抗网络和迁移学习实现实用的实时拓扑优化”，《机械设计杂志》，第144卷，第2期，2021年12月，doi: 10.1115/1.4052757.[52] Z. Yang、X. Li、L. Catherine Brinson、A. N. Choudhary、W. Chen 和 A. Agrawal，“通过深度对抗学习方法进行微观结构材料设计”，《机械设计杂志》，第140卷，第11期，2018年10月，doi: 10.1115/1.4041371.[53] F. Sui、R. Guo、Z. Zhang、G. X. Gu 和 L. Lin，“用于数字材料设计的深度强化学习”，ACS Mater Lett，第3卷，第10期，第1433–1439页，2021年10月，doi: 10.1021/acsmaterialslett.1c00390.[54] N. S. Johnson 等人，“特邀综述：用于金属增材制造材料开发的机器学习”，增材制造，第36卷，101641页，2020年，doi: https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101641.[55] G. Tapia、S. Khairallah、M. Matthews、W. E. King 和 A. Elwany，“用于316L 不锈钢激光粉末床熔融增材制造工艺规划的基于高斯过程的代理建模框架”，《国际先进制造技术杂志》，第94卷，第9期，第3591–3603页，2018年，doi: 10.1007/s00170-017-1045-z.[56] M. A. Bessa 等人，“不确定性条件下材料数据驱动分析框架：应对维数灾难”，计算方法与应用力学工程，第320卷，第633–667页，2017年，doi: https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.03.037.[57] Z. Wang 等人，“通过物理信息数据驱动建模量化金属增材制造中的不确定性”，JOM，第71卷，第8期，第2625–2634页，2019年，doi: 10.1007/s11837- 019-03555-z.[58] S. Roy、N. K. Rai、O. Sen 和 H. S. Udaykumar，“利用基于水平集的欧拉图像到计算框架研究冲击多材料流中的结构—性能关联”，《冲击波》，第30卷，第5期，第443–472页，2020年，doi: 10.1007/s00193-020-00947-y.[59] K. Weiss、T. M. Khoshgoftaar 和 D. Wang，“迁移学习综述”，大数据杂志，第3卷，第1期，9页，2016年，doi: 10.1186/s40537-016-0043-6。

[60] J. Plested 和 T. Gedeon，“图像分类的深度迁移学习：综述”，2022年5月，doi: 10.48550/arxiv.2205.09904.[61] C. B. Do 和 A. Y. Ng，“用于文本分类的迁移学习”，载于《神经信息处理系统进展》，2005年，第18卷。[在线]。可访问：https://proceedings.neurips.cc/paper/2005/file/bf2fb7d1825a1df3ca308ad0bf48591e-Paper.pdf [62] C. Xu、B. T. Cao、Y. Yuan 和 G. Meschke，“基于迁移学习的物理信息神经网络：求解不同加载情景下工程结构的逆问题”，计算方法与应用力学工程，第405卷，115852页，2023年，doi: https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115852.[63] X. Liu、X. Zhang、W. Peng、W. Zhou 和 W. Yao，“一种用于物理信息神经网络的新型元学习初始化方法”，《神经计算与应用》，第34卷，第14511–14534页，2021年。[64] Y. Li、J. Wang、Z. Huang 和 R. X. Gao，“用于加工刀具磨损预测的物理信息元学习”，《制造系统杂志》，第62卷，第17–27页，2022年，doi: https://doi.org/10.1016/j.jmsy.2021.10.013.[65] N. Wandel、M. Weinmann、M. Neidlin 和 R. Klein，“Spline-PINN：利用快速物理信息Hermite样条卷积神经网络无数据求解偏微分方程”，arXiv，第abs/2109.07143卷，2021年。[66] Z. Sun、E. Rooke、J. Charton、Y. He、J. Lu 和 S. Baek，“ZerNet：通过Zernike局部切空间估计在任意曲面上应用卷积神经网络”，《计算机图形学论坛》，第39卷，2020年，doi: 10.1111/cgf.14012.[67] N. Kovachki 等人，“神经算子：学习函数空间之间的映射”，2021年8月，doi: 10.48550/arxiv.2108.08481.[68] M. A. Rahman、M. A. Florez、A. Anandkumar、Z. E. Ross 和 K. Azizzadenesheli，“生成对抗神经算子”，2022年5月，doi: 10.48550/arxiv.2205.03017.[69] M. A. Rahman、Z. E. Ross 和 K. Azizzadenesheli，“U-NO：U形神经算子”，2022年4月，doi: 10.48550/arxiv.2204.11127.[70] Z. Li 等人，“用于学习偏微分方程的物理信息神经算子”，2021年11月，doi: 10.48550/arxiv.2111.03794.[71] Z. Li 等人，“用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子”，2020年10月，doi: 10.48550/arxiv.2010.08895.[72] M. Lellep、J. Prexl、B. Eckhardt 和 M. Linkmann，“流体动力学中的可解释机器学习：阐释壁面约束剪切流中的再层流化事件”，《流体力学杂志》，第942卷，A2页，2022年7月，doi: 10.1017/jfm.2022.307.[73] J. Deng、W. Dong、R. Socher、L.-J. Li、K. Li 和 L. Fei-Fei，“ImageNet：大型分层图像数据库”，载于2009年IEEE计算机视觉与模式识别会议，2009年，第248–255页。doi: 10.1109/CVPR.2009.5206848.[74] L. Deng，“用于机器学习研究的MNIST手写数字图像数据库 [网络精选],”《IEEE信号处理杂志》，第29卷，第6期，第141–142页，2012年，doi: 10.1109/MSP.2012.2211477。

[75] J. Vanschoren、J. N. van Rijn、B. Bischl 和 L. Torgo，“OpenML：机器学习中的网络化科学”，SIGKDD Explor. Newsl.，第 15 卷，第 2 期，第 49–60 页，2014年6月，doi: 10.1145/2641190.2641198。[76] H. Zhao、X. Li、Y. Zhang、L. S. Schadler、W. Chen 和 L. C. Brinson，“观点：NanoMine：用于聚合物纳米复合材料分析与设计的材料基因组方法”，APL Mater，第 4 卷，第 5 期，第 53204 页，2016年，doi: 10.1063/1.4943679。[77] J. Hu 等，“MaterialsAtlas.org：用于材料发现的材料信息学网络应用平台及最新进展综述”，NPJ Comput Mater，第 8 卷，第 1 期，第 65 页，2022年，doi: 10.1038/s41524- 022-00750-6。