观点

利用物理信息与数据驱动发现非均质介质中复杂现象的控制方程

Muhammad Sahimi

美国加利福尼亚州洛杉矶南加州大学莫克家族化学工程与材料科学系，邮编 *90089-1211*

arXiv:2305.01653v1 [cs.CE] 15 Apr 2023

传感器技术的快速发展、仪器技术的进步，以及数据采集软件/硬件设计方面的进展，正在为各种复杂现象提供海量数据，这些现象涵盖了从大气环境到大规模多孔地层，再到生物系统等不同领域。科学计算速度的显著提升，也使得模拟各种包含随机性因素的高维、多尺度和多物理场现象成为可能，并能够为非均质系统生成大量数值数据。然而，困难在于，此类现象的控制方程往往是未知的。一个典型例子是宏观非均质材料和地质介质中的流动、输运和变形过程。在其他情况下，控制方程仅部分已知，即其中包含各种必须基于数据进行评估的系数，或者需要本构关系，例如，在动量守恒方程中，非牛顿流体的应力张量与速度梯度之间的关系，以使这些方程能够用于建模。为解决此类问题，目前正在涌现出多类方法，这些方法基于机器学习、符号回归、Mori-Zwanzig投影算子公式、非线性动力学稀疏识别、数据同化以及随机优化与分析，或结合上述两种或多种方法。本文展望了这一极其重要领域的最新进展，并探讨了未来可能的发展方向。

一、引言

许多对科学、工业和社会具有重要意义的系统，都体现为非均质、多相和多尺度介质。相关实例涵盖大尺度多孔地层、复合材料、生物系统以及地球大气等。此类系统中还会发生许多复杂现象，包括流体流动、输运、反应和变形。鉴于这类系统对人类和社会进步至关重要，数十年来，人们一直致力于开发模型，不仅描述多尺度和多相系统本身，也描述其中发生的现象。

以大型城市地区的空气污染问题为例。化学氧化剂，尤其是臭氧，是对流层[1]中各种来源排放的一次污染物发生光化学氧化（受太阳影响的反应）后产生的主要产物。虽然平流层中的臭氧有助于地球生命的延续，但对流层中的臭氧会危害人体健康，并损害国家和国际经济 [2]。要有效控制污染物，就必须准确、全面地了解大气中反应物的排放和输运速率，以及这些反应物参与的化学反应。具体而言，由于在氮氧化物 NO_x存在时，臭氧的生成量会大幅增加 [1]，而这正是光化学烟雾形成的主要原因，因此需要掌握其浓度的详细信息，以便加以控制。

全球大型城市地区的大量传感器持续采集此类数据，相关数据也日益公开可用。为了分析和理解持续采集的海量数据，数十年来，人们一直致力于对此类现象进行建模。然而，大型城市地区是高度复杂的介质。例如，伊朗首都大德黑兰地区，北起高耸的厄尔布尔士山脉，南至沙漠；又如大洛杉矶地区，夹在圣贝纳迪诺山脉、圣盖博山脉、圣费尔南多山脉与太平洋之间。显然，这些大型城市地区的地形和地貌都极为崎岖复杂。对这两个地区的大气污染进行建模，必须考虑的不仅是大面积崎岖地形——大德黑兰地区和洛杉矶地区的面积分别约为 1300 和 87,000 km^2 ——及其崎岖地貌的影响，还包括动态变化

这些变化以每小时、每日、每月和每季为周期持续发生，因为这两个地区不仅在空间上，而且在时间上都属于多尺度系统，其跨度至少达到 10–15 个数量级。因此，即使已知控制方程，对这类复杂现象进行数值模拟也极为困难，因为模拟涉及湍流、具有高度非线性动力学的反应、数量庞大的反应物（通常有五十种或更多）及其反应产物（超过一百种）、风速场的存在或缺失、动态变化的边界条件，以及许多其他复杂因素 [1,3]。

海量数据的可用性并非仅限于大气污染问题。据估计，未来十年，数千亿个传感器将通过机载、海基和卫星遥感，采集有关多种现象的海量数据，例如植被与种植园，以及受旱灾影响地区的特征；后者正日益成为全球关注的重要问题。大型地质介质以及地震学、裂纹扩展和地震等复杂问题也同样如此。分析这类数据，尤其是信噪比较低的数据（即含噪数据），理解其中可能蕴含的细微洞见，并将其纳入精确的物理模型，是一项艰巨的任务，需要范式转变。

这种范式转变已开始逐步显现，目前正在发展两类方法。一类方法利用深度学习（DP），更广义地说，利用机器学习（ML）算法来解决这一问题。这种方法的动因在于，许多情况下，机器学习算法 [4,5]能够从具有时空覆盖范围的大量数据中提取重要特征；例如，参见 Reichstein 等人 [6]。在某些情况下，收集数据所针对的复杂现象的控制方程可能是已知的，此时可将这些方程纳入机器学习方法，以开发预测工具，用于研究远超现有数据采集时空尺度的现象。这类方法的两个典型例子分别是 Kamrava 等人 [7] 对多孔材料中流体流动的建模，以及 Alber 等人 [8] 对生物物理和生物医学系统的建模。在其他情况下，控制方程可能是已知的，但其中包含取决于复杂现象发生所在系统形态的输运系数及其他类型的系数，或者需要本构关系；若没有这些关系，控制方程就不太实用，除非采用纯经验方法。因此，本构

关系和/或控制方程中包含的系数都必须被发现。

第二类方法适用于这样一类系统：其中物理现象的控制方程以及因此与之相关的数据均未知。因此，人们试图利用当前可获取的大量数据来发现这些方程。对于涉及某种形式随机性的多尺度非均质性现象而言，控制方程的缺失尤为常见。过去几十年来，发现这类方程一直是物理科学和工程学领域的重点，因为它们能够预测系统行为。

经典方法以基本守恒定律为基础，即描述质量、动量和能量守恒的方程。对于非均质系统，需要对其所有可能实现形式所构成的系综中的微观尺度守恒定律进行平均，以推导出宏观尺度方程。然而，这种方法仅在存在明确界定的代表性体积单元（REV）或特征尺度时才成立，即存在一个体积或长度尺度，使得在该尺度上，非均质系统可被视为宏观均质，并且在大于代表性体积单元的长度尺度上保持平稳。

但是，如果代表性体积单元不存在，或者其尺寸大于系统的尺寸，会怎样？在这种情况下，系统是非平稳的，也就是说，其概率分布函数（PDF）会随空间位置而变化，在不同区域呈现不同分布？对许多重要系统的考察表明，非平稳更像是常态，而非例外。天然多孔介质在较大（区域）尺度下就是一个很好的例子。已知 [9] 此类介质的物理性质，如渗透率和弹性常数，近似遵循非平稳随机函数 [10]。因此，问题在于：这类介质中的流动、输运和变形过程的控制方程是什么？

其他显而易见的例子包括生物系统以及纳米与神经科学系统。对于这些系统，目前要进行第一性原理计算极为困难，甚至几乎不可能，但相关数据正日益丰富，而且在许多情况下质量极高。此外，计算能力的飞速提升，使得模拟各种高维、多尺度、随机的复杂系统的行为成为可能。那么，如何发现既能忠实反映并更好地解释数据，又能对未来或更大长度和时间尺度上的情况做出预测的控制方程呢？显然，在许多现代科学与工程学问题中，直接基于

数据发现控制方程至关重要。

本文展望了物理信息与数据驱动（PIDD）的多尺度、多物理场系统及现象建模这一新兴领域，尤其关注如何从给定的数据集中发现控制方程，这些数据集表征了非均质介质中复杂现象的特征。我们介绍新兴方法，讨论其优势与不足，并指出这一快速发展且意义重大的研究领域未来可能的发展方向。

II. 三类系统

一般而言，要预测多尺度非均质介质中复杂现象的宏观性质，任何 PIDD 方法能否成功，一方面取决于可用数据量，另一方面取决于系统本身的结构与复杂性。因此，我们将关注的系统分为三类:

（i）物理现象的控制方程已知，但可用数据有限的系统。例如，达西定律与斯托克斯方程共同描述了微观上无序、但宏观上均质的多孔介质中牛顿流体的缓慢流动，而对流-扩散方程则描述同一介质中的溶质输运与传质 [9]。这三个方程包含流动与输运系数——渗透率和弥散系数——它们表征流动与输运过程，原则上取决于孔隙空间的无序形态。必须对这些系数进行预测或计算（计算时需假设合理的孔隙空间模型），也可以通过谨慎的实验测量。在这种情况下，目标是开发一种 PIDD 方法，将渗透率和弥散系数与孔隙空间的形态关联起来（见下文）。

（ii）与（i）截然相反的是，有大量数据可用，但宏观尺度上感兴趣的物理现象所遵循的控制方程尚不明确的系统。因此，目标是开发一种 PIDD算法，以理解这类系统及其数据，并发现感兴趣现象的控制方程。

(iii) 介于 (i) 和 (ii) 之间的是一些系统：可获得适量的数据——既不太多也不太少——而且对感兴趣现象的物理学也有部分了解。例如，任何流体流动都受描述质量的方程支配。

以及用应力张量表示的动量守恒方程，但如果流体是非牛顿流体，那么描述应力张量与速度场之间关系的本构关系可能是未知的。当前许多备受关注的系统都属于这一类系统。然而，属于第（ii）类的系统不仅数量庞大，而且随着数据采集和观测技术的迅速进步，其数量也在快速增加。

III. 数据同化

首先介绍数据同化。这是一个成熟的概念，已广泛应用于大气科学和地质科学研究，用于对天气、海洋、气候、生态系统以及地质介质的属性进行具体预测。由于数据同化技术能够改进预测，或帮助构建更准确的模型，从而加深我们对这类复杂系统的理解，因此它在气候变化、环境污染、海洋以及地质系统的研究中发挥着重要作用。

数据同化将观测数据与动力学原理（即支配所关注系统的方程或模型）结合起来，以获得比仅使用数据或物理模型更准确的系统状态估计。因此，从本质上说，数据同化适用于第 III 节所述的第一类系统，也就是能够获得一定数量合理数据，且所关注现象的物理学至少部分已知的系统。然而，数据和模型都存在误差。正如 Zhang 和 Moore [11], 所讨论的，数据误差包括随机误差、系统误差和代表性误差。模型也会产生误差，因为为了使计算成本可控，模型往往经过简化，或者从一开始就不够完备，这反过来又会造成误差。

我们无意详细评述数据同化方法，因为这些方法已广为人知。因此，我们仅对其进行简要提及和描述，因为在本文后续部分我们将展示如何将数据同化方法与机器学习算法相结合，从而不仅改进预测，还能显著降低计算负担。

数据同化至少有四种方法：Cressman 方法、最优插值方法、三维或四维变分分析，以及卡尔曼滤波器。它们都属于最小二乘法，其最终估计值的选取方式是

使其不确定性最小化。在这四种方法中，表示系统状态的数据集记为 $\mathbf{x}$。实际或真实状态 $\mathbf{x}_t$ 不同于由物理模型生成、称为背景状态的最佳可能表示 $\mathbf{x}_b$。为了分析系统和数据，会将观测向量 $\mathbf{y}$ 与状态向量进行比较。

在克雷斯曼方法 [12], （属于一类称为客观分析的方法）中，假设模型状态是单变量的，并由该变量在离散网格点上的取值表示。假设模型状态的先前估计是一个 n 维向量，$\mathbf{x}_b = [x_b(1) \cdots, x_b(n)]^{\mathrm{T}}$，而观测向量是一个 n 维向量，$\mathbf{y} = [y(1) \cdots, y(n)]^{\mathrm{T}}$。克雷斯曼方法通过以下方程给出更新后的模型，$\mathbf{x})a = [x_a(1) \cdots, x_a(n)]^{\mathrm{T}}$。

$$\mathbf{x}_a(j) = \mathbf{x}_b(j) + \frac{\sum_{i=1}^{n} \omega_{ij}[\mathbf{y}(i) - \mathbf{x}_b(i)]}{\sum_{i=1}^{n} \omega_{ij}} , \tag{1}$$

其中，$\omega_{ij} =$ 最大值$[0,(R^2 - d_{ij}^2)/(R^2 + d_{ij}^2)]$, 和 $d_{ij} = |i - j|$。请注意，当 $i = j$ 时，$\omega_{ij} = 1$; 当 $d_{ij} > R$ 时，$\omega_{ij} = 0$。 R是由用户定义的控制参数，被称为影响参数。

在最优插值方法中，将观测向量$\mathbf{y}$ （含有 p 个分量）与背景向量$\mathbf{x}$（含有$_b$ 个分量）进行结合，其中 $n \geq p$。由于背景模型中的变量通常多于观测值，进行比较的唯一正确方法是使用观测算子 h ，将模型的 n维状态空间映射到 p维观测空间。该算子是一个 $p \times n$ 矩阵 $\mathbf{H}$，满足 $h(\mathbf{x}_b) = (h_1, \cdots, h_p)^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}\mathbf{x}_b$，其中 $h_i = \sum_{j=1}^{n} H_{ij} x_b(j)$。

假设$\mathbf{B}$ 的大小为 $n \times n$ ，且$\mathbf{R}$ 的大小为 $p \times p$ ，它们分别是背景误差$\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_t$和观测误差 $\mathbf{y} - h(\mathbf{x}_b)$的协方差矩阵。假定这两种误差不相关。 n维分析向量（即更新后的向量）$\mathbf{x}_a$ 定义如下：$\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_b + \mathbf{w}[\mathbf{y} - h(\mathbf{x}_b)]$, ，其中$\mathbf{w}$ 是一个 $n \times p$ 矩阵，其选取方式使$\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_t$ 的方差最小。可以证明，$\mathbf{w} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1}$。

在三维变分分析中，代价函数 $\sigma^2(\mathbf{x})$ 定义为

$$\sigma^2(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + [\mathbf{y} - h(\mathbf{x})]^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}[\mathbf{y} - h(\mathbf{x})] \equiv \sigma_b^2(\mathbf{x}) + \sigma_o^2(\mathbf{x}) , \tag{2}$$

其中，σ_b^2 和 σ_o^2 分别为背景代价函数和观测代价函数。已有证明表明，

如果我们写作$\mathbf{x} = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}_b + \mathbf{w}[\mathbf{y} - h(\mathbf{x})_b]$，那么代价函数将达到其全局最小值。

将该方法推广到四维变分同化是很直接的。在所关注的时间区间内，观测分布于 $(N+1)$ 个时刻。代价函数定义为

$$\sigma^2(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^{\mathrm{T}} \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + \sum_{i=0}^{N} [\mathbf{y}_i - H_i(\mathbf{x}_i)]^{\mathrm{T}} R_i^{-1} [\mathbf{y}_i - H_i(\mathbf{x}_i)] \,, \tag{3}$$

因此，具有全局最小方差的数据同化问题可归结为计算分析向量 $\mathbf{x}_a$，使得 $\sigma^2(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}\,\mathbf{x} = \mathbf{x}_a$ 处取得最小值。

卡尔曼滤波器 [13], 也称为线性二次估计，已被用于持续更新动力系统模型的参数，以同化数据。只有在系统为线性系统，且测量噪声和过程噪声服从高斯分布的假设下，该滤波器才是最优的。该算法是一种递归算法，包含两个步骤。在预测步骤中，滤波器会生成当前状态变量 $\mathbf{x}$ 的估计值及其不确定性。下一次测量的数据（可能存在误差）可用后，便开始第二步：使用加权平均更新估计值，对确定性更高（误差更小）的估计值赋予更大的权重。该算法实时运行，仅使用当前的输入测量值、先前计算的状态及其不确定性矩阵。然而，该算法在高度非线性系统中会失效，这促使人们开发了扩展卡尔曼滤波器。该滤波器通过将系统动力学的非线性特征近似为在上一个状态估计值附近线性化的系统版本来处理非线性。扩展版本因能够处理非线性系统和非高斯噪声而广受欢迎。

Evensen [14] 指出，在误差协方差的演化方程中，扩展卡尔曼滤波器存在一个闭合问题。在这一背景下，闭合问题是指未知数多于方程数。扩展卡尔曼滤波器中采用的线性化方法会舍弃控制误差协方差演化的方程中的高阶矩。然而，由于这种闭合技术会导致误差无限增长，因此引入了集合卡尔曼滤波器以缓解闭合问题。集合卡尔曼滤波器是一种蒙特卡洛方法，其中模型状态和不确定性通过系统的一组实现所构成的系综来表示 [15]。

集合卡尔曼滤波器概念简单，所需计算量相对较低，因此近年来在历史拟合问题和连续

更新模型方面日益受到关注，因为新的数据会不断产生。该方法不采用递归方法计算状态协方差，而是根据多个实现估算协方差矩阵，因此计算成本较低。事实证明，集合卡尔曼滤波器在天气预报[16], 海洋学和气象学等多个领域的实时更新中非常高效且稳健 [17]。它还用于开发大规模多孔介质的动态模型 [18] ，并优化大型垃圾填埋场的天然气开采 [19],；这两种应用中，动态数据都会在一段时间内陆续产生。有关该方法及其实现方式的完整详情，请参阅参考文献 [19] 。

IV. 物理信息机器学习方法

机器学习算法，尤其是神经网络，几十年来一直被用于预测各种类型系统的性质 [20], ，其前提是先使用一些数据对网络进行训练。许多机器学习算法面临的问题在于，它们缺乏严谨的、基于物理学的基础，而是依赖相关性和回归。因此，尽管它们可以非常准确地将给定的数据集拟合到某些函数形式，但它们通常不具备预测能力，尤其是在需要对那些没有向其“展示”过数据的系统进行预测时；也就是说，在训练神经网络时，没有使用或仅使用了极少用于预测相关性质的数据。

这促使人们开发了物理信息机器学习（PIML）算法。这类算法除了提供大量数据来训练网络外，还会对算法施加一些物理约束。例如，如果要用神经网络预测非均质材料的宏观性质（如其有效弹性模量），那么除了用于训练网络的数据之外，还可以施加约束，要求预测结果满足针对弹性模量推导出的严格上下界 [21,22]。又如，如果要使用机器学习算法预测多孔介质中牛顿流体的流体流动和输运，可以施加约束，要求训练中包含纳维-斯托克斯方程；如果流体流动缓慢，则包含斯托克斯方程；如果希望预测同一流场中溶质的浓度分布，则还需包含对流-扩散方程。也可以施加任何其他与该现象的物理学直接相关的约束。

然后，可以将可用数据纳入机器学习算法，以关联这部分内容。

将系统的结构与已知支配这些现象的方程中出现的系数联系起来，和/或发现求解控制方程所需的本构关系。例如，研究人员使用一种深度学习算法，将多孔介质的形态与其渗透率 [23] 、在同一孔隙空间中缓慢流动时的弥散系数 [24] 、扩散率 [25]及其他性质 [26,27]联系起来。此外，同类方法还被用于建立多孔介质中二维高斯场的电导率场与纵向宏观弥散系数之间的映射关系[28]。

总体而言，目前正在开发三种不同的方法，以提高物理信息机器学习算法训练的准确性和速度，具体如下 [4,5,7,23,29,30]。

A. 多任务学习

在这种方法中，为开发最优机器学习算法而在全局范围内最小化的代价函数，以及神经网络结构，都包含上述约束条件。换言之，仅使神经网络的传统代价函数——预测值与数据之间差值的平方和——达到全局最小是不够的；相反，还要通过施加约束条件对代价函数进行惩罚。因此，这种方法是一个多任务学习过程，因为物理信息机器学习算法不仅基于数据进行训练，训练过程还包括一些基于物理的约束，例如控制方程、所关注属性的上界和/或下界，以及其他严谨的信息和洞见，从而使预测也基于这些约束条件并满足这些约束条件。施加约束条件体现了训练过程中的偏置，因为这些约束迫使算法沿特定方向进行训练。我们将介绍两个具体示例来说明该方法。

示例 *1*：预测薄型二维（*2D*）聚合物多孔膜中的流体流动。使用一张尺寸为 $500 \times 500 \times 1000$ 体素的膜高分辨率三维图像[7], ，其孔隙率、厚度、渗透率和平均孔径均已知。从该三维图像中提取了 700 张尺寸为 175×175 像素的二维切片，并通过求解纳维–斯托克斯方程模拟切片中的流体流动，其中部分结果用于训练算法。

随后构建了物理信息循环编码器–解码器（PIRED）网络。该

网络是一种监督式网络，由编码器和解码器组成，分别称为 U-Net 和残差 U-Net（RU-Net），其架构如图 1 所示。编码器包含四个模块，每个模块均由标准卷积层和激活层，以及池化层和批量归一化层组成。池化层通过消除不必要的特征，将输入图像压缩为最重要的特征，并将其存储在由激活层、卷积层和批量归一化层组成的潜在层中。批量归一化层通过减少内部协变量偏移，不仅允许使用更高的学习率，还可作为减少过拟合的正则化器 [31]。在批量归一化层中计算数据批次 x 的均值 $\langle x\rangle$ 和方差 $\mathrm{Var}[x]$，并定义了一个新的归一化变量 y，其定义为

$$y = \gamma \frac{x - \langle x\rangle}{\sqrt{\mathrm{Var}[x] + \epsilon}} + \beta \ . \tag{4}$$

这里，γ 和 β 是与输入数据大小相同的可学习参数向量，而 ϵ 被设置为一个通常较小的值，在本例中为 10^{-5}。在训练过程中，该层持续更新其计算得到的均值和方差的运行估计值，并在评估期间利用这些估计值进行归一化。方差通过有偏估计量计算得出。

解码器还包含四个块。每个块都包含卷积层、激活层和批量归一化层，以及一个转置卷积层；该转置卷积层与反卷积层类似，例如，如果第一个编码器的大小为 $128 \times 64 \times 64$，即具有大小为 64×64 的 128 个特征，那么解码器中也具有类似的大小。转置卷积层利用池化层提取的特征来重建输出，即不同时间下的压力和流体速度场，P 和 $\mathbf{v}$。由于循环神经网络的潜在层由残差块组成，即这些层并非只有一个连接，而是与更远的前序层相连，因此提升了 PIRED 的性能，并显著加快了整个网络的计算速度。

假设流体为不可压缩牛顿流体，二维介质的质量守恒方程可表示为，$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v} = \partial v_x/\partial x + \partial v_y/\partial y = 0$，其中两个速度分量 v_x和 v_y 以及空间坐标 x 和 y 均通过特征长度 L 和特征速度 v_0进行无量纲化。无量纲纳维-斯托克斯方程表示为

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v} = \mathrm{Re}^{-1}\left(-\boldsymbol{\nabla}P + \nabla^2\mathbf{v}\right) \ , \tag{5}$$

其中 $\mathrm{Re} = \rho v_0 L/\mu$ 是雷诺数，且 $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}$。定义了三个残差函数，

$\xi_1 = \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}$、 $\xi_2 = Dv_x/Dt - \mathrm{Re}^{-1}(-\partial P/\partial x + \nabla^2 v_x)$ 和 $\xi_3 = Dv_y/Dt - \mathrm{Re}^{-1}(-\partial P/\partial y + \nabla^2 v_y)$，并将其纳入代价函数 σ^2，由 PIRED 网络进行最小化，而不是简单地最小化数据与 $\mathbf{v}$ 和 P 的预测值之间的平方差。为了通过求解质量守恒方程和纳维–斯托克斯方程，使结果收敛到实际的数值计算值，必须满足 $\xi_i = 0$，其中 $i = 1 - 3$。因此，PIRED 网络学习到输入与输出之间的映射必须符合 $\xi_i = 0$这一要求，这不仅丰富了其训练，还加速了向实际值的收敛。因此，代价函数 σ^2 定义为

$$\sigma^2 = \frac{1}{n}\left\{\sum_{i=1}^{n}\left[(P_i - \hat{P}_i)^2 + (|v_i| - |\hat{v}_i|)^2\right]\right\} + \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{n}\xi_i(x_j, y_j, t_j)^2 \ , \tag{6}$$

其中， n 是训练中使用的数据点数量， P_i 和 $|v_i|$ 分别是时间 t_i时点（x_i, y_i）处的实际压力和流体速度大小，上标ˆ表示 PIRED 网络的预测值。 P 和$\mathbf{v}$ 字段是在四个不同时间计算得到的。需要注意的是，计算 P 和$\mathbf{v}$ 所需的数据量明显少于标准机器学习方法所需的数据量。

流体从一侧注入，并在膜的另一侧施加固定压力。假设另外两条边界不可渗透。在每张二维图像中求解质量守恒和纳维–斯托克斯方程约需 6 个 CPU 分钟。在 Nvidia Tesla V100 图形处理器（GPU）上训练 PIRED 网络的计算约需 2 个 GPU 小时。随后，准确性测试耗时不到一秒。部分结果用于训练，其余结果用于测试，并与 PIRED 网络的预测结果进行比较。

采用反向库尔贝克–莱布勒散度（相对熵） [32] 来最小化代价函数 σ^2。如果 $p(x)$是真实的输入/输出数据概率分布，而 $q(x)$是对 $p(x)$的近似，那么从 $q(x)$到 $p(x)$的反向库尔贝克–莱布勒散度可用于衡量二者之间的差异。当然，我们的目标是确保 $q(x)$对$p(x)$的表示足够准确，从而最小化反向库尔贝克–莱布勒散度 $D_{\mathrm{KL}}(q\|p)$，其定义如下：

$$D_{\mathrm{KL}}[q(x)\|p(x)] = \sum_{x\in S} q(x)\log\left[\frac{q(x)}{p(x)}\right] \ , \tag{7}$$

其中， S 是定义 $p(x)$和 $q(x)$的空间。如果 $q(x)$与 $p(x)$完全匹配，则 $D_{\mathrm{KL}} = 0$

通常可改写为

$$D_{\mathrm{KL}}[q\|p] = E_{x\sim q}[-\log p(x)] - H[q(x)]\ , \tag{8}$$

其中， $H[q(x)] = E_{x\sim q}[-\log\ q(x)]$ 是 $q(x)$ 的熵， E 表示期望值算子，因此， $E_{x\sim q}[-\log\ p(x)]$ 是 q 与 p之间的交叉熵。相对于 q 对D_{KL} 进行优化，定义为

$$\arg\min\ D_{\mathrm{KL}}[q\|p] = \arg\min\ E_{x\sim q}[-\log\ p(x)] - H[q(x)] = \arg\min E_{x\sim q}[\log\ p(x)] + H[q(x)]. \tag{9}$$

因此，根据式（9），从 $q(x)$中采样数据点，并使这些数据点属于 $p(x)$ 的概率最大。式（9）中的熵项“促使”$q(x)$尽可能宽泛。自编码器试图识别出一个分布 $q(x)$，使其最接近 $p(x)$。

训练后的 PIRED 网络仅使用少量图像，就重建了新二维图像（训练中未使用）中的速度场和压力场。图 2(a) 和 2(b) 分别展示了网络训练数据集和测试数据集的代价函数 σ^2 的变化。训练和测试过程中， σ^2 在 P 和$\mathbf{v}$ 两者上均下降，表明压力场和流体速度场都在收敛至真实解。

有效渗透率 K 定义为 $K = \mu Lq/(A\Delta P)$，其中 q、 A 和 ΔP 分别表示稳态体积流量以及垂直于宏观压力降 ΔP的表面积。对 300 个测试切片计算了 K ，PIRED 网络也对其进行了预测。比较结果如图 3(a) 所示。不过，对 PIRED 网络最严格的检验，是在完全不使用与某种多孔介质相关的任何数据的情况下，预测该介质的渗透率（及其他性质）。因此，采用了一幅孔隙率为 0.14 的枫丹白露砂岩图像 [33] 。由于该砂岩的形态与聚合物膜完全不同，为了更好地训练 PIRED 网络，使用了数量稍多的膜（而非砂岩）二维切片。图 3(b) 比较了砂岩一百个二维切片的有效渗透率与 PIRED 网络的预测结果。

示例 2：预测心血管流动中的动脉血压。心血管流动的预测建模与展望是一种用于监测、诊断和手术规划的宝贵工具，可应用于大型患者特异性体循环动脉网络拓扑结构，以便彩在线

从而获得关于（例如）壁面剪切应力和脉搏波传播的详细预测。过去开发的模型高度依赖预处理和校准程序，这些程序需要大量计算，因此限制了其临床适用性。Kissas 等人 [34] 开发了一种机器学习方法，即物理信息驱动的神经网络（物理信息神经网络，PINN），用于无缝融合无创体内测量与计算流体力学。

在作出一些假设后，Kissas等人 [34] 基于质量守恒和动量方程，采用降阶（简化）一维模型对动脉网络中的脉搏波传播进行建模，

$$\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{\partial (Av_x)}{\partial x}=0\ , \tag{10}$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial t}+\alpha v_x\frac{\partial v_x}{\partial x}+\left(\frac{v_x}{A}\right)\frac{\partial}{\partial x}[(\alpha-1)Av_x]+\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x}-K_R\frac{v_x}{A}=0\ . \tag{11}$$

这里，$A(x,\ t)$、$v_x(x,\ t)$和 $P(x,\ t)$分别表示时刻 t的横截面积、血液速度和压力，其中 x 表示血液流动的方向；α 为动量通量修正因子；ρ 为血液密度，而 K_R 为取决于速度剖面（流动状态）的摩擦参数。然而，由于动脉是可发生变形的弹性材料，仅凭质量守恒和动量守恒施加的约束不足以确定压力，因为动量方程中只出现了压力梯度。然而，假设动脉为线性弹性材料，其管壁位移的本构定律为

$$P=P_e+\beta(\sqrt{A}-\sqrt{A_0})\ , \tag{12}$$

将每个横截面上的动脉壁位移与绝对压力直接关联。这里，β 是一个与动脉的杨氏模量和泊松比相关的系数；$A_0=A(x,\ 0)$，而 P_e 是外部压力。因此，作为另一项约束，本构关系与质量守恒定律和动量守恒定律耦合，这意味着可以通过PINN利用它们之间的相关性，根据速度和横截面积测量值确定绝对压力。Kassas等人[34] 建模和研究的系统是一个 Y–形分叉，如图4所示。通过使用血管建模工具包函数库，从磁共振成像数据中重建三维几何结构，并提取了相应的中心线（如图4所示）。随后，采用间断Galerkin方法对控制方程进行离散化并数值求解。

因此，与上文所述的第一个示例类似，将三个残差函数 ξ_i （分别对应 $i=1$、2和3）定义为方程（10）至（12）左侧的表达式。总体代价函数（或损失函数） σ^2由多个因素构成，且应在全局范围内最小化。这些因素包括：（a）每个计算点上计算得到的血液流速和动脉横截面积与相应数据之间的平方差之和（x、 t）。血液流速数据通常通过多普勒超声或四维流动磁共振成像获得，而面积数据则取自通过四维流动磁共振成像重建的二维电影图像。（b）上述残差函数 ξ_i在用于数值模拟质量守恒方程和动量方程的配点样本处的平方和。（c）分叉点连接处的贡献。参见图4。我们将左侧的通道称为动脉1，将从其分出的右侧两条通道称为动脉2和3。质量守恒要求 $A_1v_1 -(A_2v_2 + A_3v_3) = 0$，为方便起见，这里省略了流体速度的下标 x。此外，动量守恒意味着$p_1 + \frac{1}{2}\rho v_1^2 - (p_2 + \frac{1}{2}\rho v_2^2) = 0$，且$p_1 + \frac{1}{2}\rho V_1^2 - (p_3 + \frac{1}{2}\rho v_3^2) = 0$。因此，根据上述方程左侧的表达式，定义了另外三个残差函数 ξ_i（分别对应 $i=4$、5和6），总体代价函数 σ^2 则为这三类贡献之和。

在我们此处讨论的许多此类问题中，还可能存在另一个复杂性：流体速度、横截面积和压力的数量级差异显著。例如，它们分别为 $P \sim 10^6$ Pa、 $A \sim 10^{-5}$ m^2, 和 $v_x \sim 10$ m/s。如此巨大的差异会在物理信息神经网络的训练过程中引发系统性的数值问题，因为它会严重影响训练过程中用于调整神经网络参数的反向传播梯度的大小。为了解决这一问题，Kissas 等人采用了与上文示例 1 类似的方法，通过定义特征长度和特征速度，将控制方程无量纲化，使它们的取值均为 $\mathcal{O}(1)$。随后，他们对输入进行了归一化处理，使其均值为零、方差为一；正如 Glorot和Bengio [35] 所证明的，这样做可以缓解深度神经网络中的梯度消失问题。Kissas 等人使用的激活函数是双曲正切函数。

使用了三个神经网络，分别对应 Y–形状系统中的一条动脉。每个网络包含七个隐藏层，每层有一百个神经元，并采用双曲正切激活函数。使用两千个配点，通过间断Galerkin方法求解离散化方程。该方法的其他细节以及

模型详见原始参考文献。

图 5 展示了 Y–形分岔中的结果。图 5(a) 比较了通过不连续 Galerkin 方法计算得到的速度波，以及采用和未采用无量纲化的物理信息神经网络所作出的预测；图 5(b) 则对压力进行了同样的比较。上述结果均在动脉 1 的中点处计算得出。两者吻合得非常好。Zhu 等人 [36] 采用了同类方法进行代理建模和不确定性量化；Geneva 和 Zabaras [37] 以及 Wu 等人 [38] 则用该方法对非线性动力系统进行建模。

B. 物理观测辅助学习

通过将能够传达所研究系统物理特性的观测数据作为输入提供给机器学习算法，可以改进其训练效果。正如引言中所述，人们正在为各种复杂现象收集海量数据。因此，如果将这些能够深入揭示相关现象的数据作为机器学习算法训练时的输入，就会使算法偏向于满足观测数据；这意味着，最终的机器学习工具应具备足够的能力，能够对未作为输入提供给算法的数据所涉及的现象方面作出准确预测。例如，Kashefi等人 [39] 开发了一种点云深度学习算法，用于预测无序介质中的流体流动。点云是由数据点构成的集合，通常稀疏、不规则、无序且连续，能够编码三维结构中的信息，其逐点特征具有尺度、刚性变换和排列不变性。由于这些特性，许多深度学习模型难以从点云中提取特征。

C. 嵌入先验知识与归纳偏置

人们可以设计嵌入先验知识和归纳偏置的神经网络，以便对感兴趣的现象进行预测。LeCun等 [40], 首先提出的卷积神经网络，是这类方法中最著名的例子。它们最初的设计旨在遵循自然界中发现的模式及对称群所具有的不变性。人们还可以设计更通用的卷积神经网络，使其遵循旋转、反射等对称群，从而推动了仅依赖内在几何的架构的发展，

事实证明，这些架构是分析医学图像 [41] 和气候模式分割 [42]的强大工具。

核方法 [43] 通过在函数空间中最小化代价函数来进行优化，而非像旧式神经网络那样在参数集上进行优化；这是另一种能够提升物理信息机器学习方法性能的算法。它们的灵感源于 [43-45]所研究系统的物理学。此外，许多采用神经网络的方法与核方法存在密切的渐近联系。例如，Wang 等人 [46,47] 指出，物理信息机器学习算法的训练动力学可以理解为一种核回归方法，其中网络宽度趋于无穷大。事实上，基于神经网络的方法可以被严格地解释为核方法，其中底层的扭曲核——一种最初用于 [48] 建模非平稳空间结构的特殊核——也通过数据进行学习。

在许多机器学习过程中，训练必须处理以图形式呈现的数据，这些图蕴含着图中信息之间的关系和相关性。例如，学习分子指纹、蛋白质界面、疾病分类，以及对提取出的结构（如句子的依存树）进行推理。针对这类问题，人们提出了图神经网络及其变体，例如图卷积网络、图注意力网络和图循环网络；事实证明，它们是许多深度学习任务的强大工具。Zhou 等人 [49]撰写了一篇出色的综述；其应用亦可参见文献 [7,29,30]。

显然，为了提升机器学习算法的性能，可以结合上述三种方法中的任意几种。此外，正如上文所述的 PIRED 示例所示，在处理涉及非均质介质中的流体流动、输运和反应过程的问题时，可以引入无量纲数，例如雷诺数、弗劳德数和普朗特数。这些数不仅包含有关现象物理学的信息和见解，还有助于将物理信息机器学习算法得到的结果推广至更大的长度和时间尺度。

物理信息机器学习算法领域正在迅速发展。人们已经开发出许多应用，尤其适用于以下问题：要么先进的经典数值模拟极难实施，要么问题本身严重不适定，以至于经典方法无法发挥作用。它们

除上述提及的内容外，还包括用于预测磁约束聚变装置边缘湍流输运的四维流动磁共振成像数据的物理信息机器学习（PIML） [34], ——这一问题已被研究了数十年 [50]——以及一种用于从头算求解多电子薛定谔方程的费米子神经网络（称为 FermiNet）¨（另见参考文献 [53]），这是一种将问题的物理学信息融入神经网络的混合方法。由于波函数必须进行参数化，因此专门为 FermiNN 设计了一种遵循费米-狄拉克统计的特殊架构，即在交换输入电子态时具有反对称性，并满足边界条件。因此，其参数化过程本身就是一个物理信息过程。FermiNet 还采用物理信息驱动的方法进行训练，具体而言，其代价函数被设定为能量期望值的变分形式，并使用蒙特卡洛方法估算梯度。已有多篇论文探讨了物理信息机器学习在地球科学领域的应用 [4,7,23-26,28-30,53, 54], ，以及在大规模分子动力学模拟中的应用 [55] 。在后者中，研究人员使用神经网络表示势能面，并通过预处理来保持分子系统的平移对称性、旋转对称性和置换对称性。通过采用深度势分子动力学（DeePMD） [56], ，可以进一步改进该算法，从而实现包含一亿个原子、持续时间超过一纳秒的分子动力学模拟 [57], ，以及包含一百万个原子且准确性可与从头算计算相媲美的模拟 [57,58]。

V. 数据驱动重构控制方程

如前所述，技术和仪器技术的进步使人们能够收集大量数据，这些数据涵盖了具有某种非均质性的系统中的各种现象；我们的目标是发现或重构描述此类数据的控制方程。本节介绍的方法适用于第 II 节讨论的第三类系统，即对于给定系统已有大量数据，且控制方程已知或假定已知，但必须采用数据驱动的方法，通过估计其系数来重构该方程。

该方法适用于数据以非平稳时间序列 $X(t)$ 或空间变化序列 $X(\mathbf{x})$ 形式呈现的系统。长期以来，表征此类非平稳时间序列和空间序列一直是一个备受关注的基础问题，因为它们

广泛存在于各种问题中，从经济活动 [59], 到地震时间序列 [60], 、心跳动力学 [61,62], 和大尺度多孔介质 [9], ；对它们的分析在非线性动力学领域有着悠久而丰富的传统 [63-65]。研究工作大多致力于探讨如何通过精确分析实验数据提取确定性动力系统方程，因为如果成功，所得方程将揭示系统动力学性质的所有重要信息和见解。

标准做法是将数据中的波动视为随机变量，它们以加性方式叠加在确定性动力系统生成的轨迹或时间序列上。这种方法最初源于人们试图深入理解湍流 [66,67], ，此后一直不断发展。尽管它已得到广泛应用 [68], ，但仍在进一步完善中（见下文）。更重要的是，这种方法表明，有必要将数据中的波动视为会干扰确定性框架的动力学变量。

对于给定的非平稳序列 $X(t)$，此方法会构造一个平稳过程$y(t)$，至少可以采用以下两种方法之一。（i）构造代数增量 $y(t) = X(t+1) - X(t)$。这类序列中最著名的例子是分数布朗运动（FBM） [69] ，其功率谱为 $S(\omega) \propto 1/\omega^{2H+1}$，其中 H 是赫斯特指数。众所周知，FBM 的增量 $S(\omega) \propto 1/\omega^{2H-1}$ 称为分数高斯噪声 [69], ，是平稳的。此外，当 $H = 1/2$时，增量不相关；而当 $H = -1/2$ $X(t)$ 时则变为随机。（ii）令 $Z = \ln X(t)$。然后，构造 $y(t)$ 的收益率 $X(t)$，即 $y(t) = Z(t+1) - Z(t) = \ln[X(t+1)/X(t)]$, ，因此 $y(t)$是对数增量序列。通过研究序列中不同长度时间窗口内的各种矩，可以直接证明这两种方法都能得到平稳序列。接着，基于马尔可夫过程的应用分析 $y(t)$，并根据朗之万方程推导该序列的控制方程，具体如下。

首先检查 $y(t)$是否确实遵循马尔可夫链 [70,71]。若是，则估算其马尔可夫时间尺度 t_M——即 $y(t)$可近似为马尔可夫过程的最小时间间隔——（见下文）。一般而言，要表征任意序列$y(t)$的统计特性，必须计算数据点数量为 n时的联合概率分布函数 $P_n(y_1, t_1; \cdots; y_n, t_n)$。然而，若 $y(t)$是马尔可夫过程，则 n点联合概率

分布函数 P_n 由下式给出

$$P_n(y_1,t_1;\cdots;y_n,t_n)=\prod_{i=1}^{n-1}P(y_{i+1},t_{i+1}|y_i,t_i)$$

其中 $P(y_{i+1},t_{i+1}|y_i,t_i)$ 是条件概率。此外，满足 Chapman-Kolmogorov 方程 [72],

$$P(y_2,t_2|y_1,t_1)=\int dy_3\ P(y_2,t_2|y_3,t_3)P(y_3,t_3|y_1,t_1)\ , \tag{13}$$

是 $y(t)$ 对任意 $t_3\in(t_1,t_2)$ 成为马尔可夫过程的必要条件。[反之则不一定成立，也就是说，如果一个随机过程满足查普曼-科尔莫戈罗夫方程，它不一定是马尔可夫过程]。因此，通过比较直接计算得到的 $P(y_2,t_2|y_1,t_1)$ 与根据公式（13）右侧计算得到的结果，检验查普曼-科尔莫戈罗夫方程对于 y_1 各种取值的有效性。

马尔可夫时间尺度 t_M 可以通过最小二乘法进行评估。由于对于马尔可夫过程，有以下关系。

$$P(y_3,t_3|y_2,t_2;y_1,t_1)=P(y_3,t_3|y_2,t_2)\ , \tag{14}$$

将 $P(y_3,\ t_3;\ y_2,\ t_2;\ y_1,\ t_1)\ =\ P(y_3,\ t_3|y_2,\ t_2;\ y_1,\ t_1)P(y_2,\ t_2;\ y_1,\ t_1)$ 与基于假设 $y(t)$ 为马尔可夫过程所得的结果进行比较。利用马尔可夫过程的性质，并代入式（14），可得

$$P_{\mathrm{M}}(y_3,t_3;y_2,t_2;y_1,t_1)=P(y_3,t_3|y_2,t_2)P(y_2,t_2;y_1,t_1)\ . \tag{15}$$

随后，通过公式 (14) 计算三点联合概率分布函数，并将结果与通过公式 (15) 得到的结果进行比较。为此，首先需要通过计算最小二乘拟合量 χ^2 来确定拟合质量，其定义为

$$\chi^2=\int dy_3\ dy_2\ dy_1\left[P(y_3,t_3;y_2,t_2;y_1,t_1)-P_{\mathrm{M}}(y_3,t_3;y_2,t_2;y_1,t_1)\right]^2/(\sigma_{3j}^2+\sigma_{\mathrm{M}}^2)\ , \tag{16}$$

其中，σ_{3j}^2和σ_{M}^2 分别是 $P(y_3,t_3;\ y_2,t_2;\ y_1,t_1)$和 $P_{\mathrm{M}}(y_3,t_3;\ y_2,t_2;\ y_1,t_1)$的方差。然后，通过似然统计分析估计 t_M。在没有先验约束的情况下，三点联合概率分布函数集合的概率为:

$$P(t_3-t_1)=$$

$$\Pi_{y_3,y_2,y_1}\frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_{3j}^2+\sigma_{\rm M}^2)}}\exp\left\{\frac{[P(y_3,t_3;y_2,t_2;y_1,t_1)-P_{\rm M}(y_3,t_3;y_2,t_2;y_1,t_1)]^2}{2(\sigma_{3j}^2+\sigma_{\rm M}^2)}\right\}\ , \quad (17)$$

必须进行归一化。显然，当一组参数中的 $\chi_\nu^2=\chi^2/N$ 最小（其中 N 为自由度）时，概率最大。因此，如果将 χ_ν^2 对 t_3-t_2作图， t_M 将是 t_3-t_1 的取值，此时 χ_ν^2 达到最小值 [73]。

对于马尔可夫过程 $y(t)$，已知 $P(y_2,t_2|y_1,t_1)$ 就足以生成 $y(t)$ 的全部统计信息，而这些信息由 $n-$点概率分布函数编码；该函数满足一个主方程，而主方程本身可通过克拉默斯-莫亚尔展开 [74],重新表述。

$$\frac{\partial P(y,t|y_0,t_0)}{\partial t}=\sum_k(-1)^k\frac{\partial^k}{\partial y^k}\left[D^{(k)}(y,t)P(y,t|y_0,t_0)\right]\ . \quad (18)$$

克拉默斯-莫亚尔系数 $D^{(k)}(y,t)$ 的计算方法为，

$$\begin{aligned}D^{(k)}(y,t)&=\frac{1}{k!}\lim_{\Delta t\to 0}M^{(k)}\ ,\\ M^{(k)}&=\frac{1}{\Delta t}\int dy'(y'-y)^kP(y',t+\Delta t|y,t)\ .\end{aligned} \quad (19)$$

对于一般随机过程，所有系数都可能非零。然而，如果 $D^{(4)}$ 消失，或与前两个系数相比很小 [72], ，那么从统计意义上来说，在克拉默斯-莫亚尔展开的第二项之后截断是有意义的，此时该展开可简化为福克-普朗克方程；根据伊藤演算，该方程 [72,74] 又等价于如下朗之万方程:

$$\frac{dy(t)}{dt}=D^{(1)}(y)+\sqrt{D^{(2)}(y)}\,\eta(t)\ , \quad (20)$$

其中， $\eta(t)$ 是一个均值为零且服从高斯统计的随机“力”，在 t 中具有 δ 相关性，即 $\langle\eta(t)\eta(t')\rangle=2\delta(t-t')$。

朗之万方程能够重构出与原始时间序列在统计意义上相似的 $y(t)$，并可用于预测未来；也就是说，给定系统在时间 t的状态，系统在时间 $t+\tau$处于某一特定状态的概率是多少。通过以下方式将 $X(t+1)$表示为 $X(t)$:

$$X(t+1)=X(t)\exp\{\sigma_y[y(t)+\bar{y}]\}\ , \quad (21)$$

其中， $\bar{y}$ 和 σ_y 分别是 $y(t)$的均值和标准差。要使用式（21）预测$X(t+1)$，需要 $[X(t)\ y(t)]$。因此，选取序列 $y(t)$中的三个连续点

并在重构的 $y(t)$中搜索与所选点差异最小的三个连续点。出现这种情况的时刻即为时间 t，它确定了 $[X(t)\ y(t)]$。现在我们介绍该方法的一项应用。

示例 *1*：人类心跳的波动。研究表明，睡眠的不同阶段可能具有心率的长程相关性，且这些相关性跨越大量心跳。上述基于马尔可夫时间尺度 t_M 以及漂移系数和扩散系数 $D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$的方法，为洞察健康受试者与充血性心力衰竭患者之间的心搏间波动差异提供了重要依据。图 6 和图 7 展示了两组患者的漂移系数和扩散系数 [71,75]（有关数据的详细信息，请参阅原始文献 [71,72]）。尤其是，健康受试者与充血性心力衰竭患者的扩散系数截然不同。此外，需要强调的重要一点是，该方法甚至能在充血性心力衰竭发展的最早阶段检测到此类差异 [71,72], ，而其他分析方法都做不到。

尽管该方法取得了成功，但仍在发展之中。根据 Pawula 定理 [76], ，对于阶数为 k 的克拉默斯-莫亚尔方程，只有三种可能的结果：(a) 展开在 $k = 1$ 处截断，这意味着该过程是确定性的。(b) 展开在 $k = 2$处截断，这将得到描述扩散过程的福克-普朗克方程；(c) 原则上，展开必须包含所有项，$k \to \infty$，此时在有限阶 $k > 2$ 截断都会产生非正的概率分布函数，这是不符合物理规律的。更重要的是，现已明确 [77] ，非零的 $D^{(4)}(X,\ t)$，即克拉默斯-莫亚尔展开无法在第二项之后截断，表明时间序列中存在跳跃间断；在这种情况下，需要至少计算到六阶的克拉默斯-莫亚尔系数，即计算到 $D^{(6)}(X,\ t)$，而在许多情况下甚至需要计算到八阶 [78], ，以估计跳跃幅度和发生率。对于非零的 $D^{(4)}(X,\ t)$，具有跳跃扩散过程的时间序列 $X(t)$ 的控制方程为 [77,78]

$$dX(t) = D^{(1)}(X,t)dt + \sqrt{D^{(2)}(X,t)}\,\eta(t) + \xi dJ(t)\ , \tag{22}$$

其中，$J(t)$ 是泊松跳跃过程。跳跃速率 $\lambda(x,\ t)$ 可以依赖于状态，跳跃幅度为 ξ，其表达式为：$\lambda(x,\ t) = M_{(4)}(x,\ t)/[3\sigma_\xi^4(x,\ t)]$,其中，$\sigma_\xi^2(x,\ t) = M^{(6)}(x,\ t)/[5M_{(4)}(x,\ t)]$。跳跃动态过程非常重要，因为它们已被用于描述随机

演化，例如神经元动力学 [79,80], 土壤湿度动力学 [81], ，以及股票价格、市场指数和利率等金融特征 [82], 和癫痫脑动力学 [77]。下面介绍跳跃动态过程的一项基于数据的实际应用，并重建其动力学的控制方程。

示例 *2*：癫痫脑随机动力学的重构。癫痫患者的大脑电节律往往会变得失衡，进而导致反复发作癫痫。癫痫发作时，正常的电活动模式会被突发且同步的电能爆发打乱，这可能会短暂影响患者的意识以及运动或感觉。图 8(b) 展示了一名癫痫发作起源于左侧内侧颞叶的患者的颅内脑电图（iEEG）时间序列。

iEEG 时间序列的一阶和二阶克拉默斯-莫亚尔系数以及朗之万型建模，可用于构建癫痫脑动力学的随机表征指标，为诊断提供有价值的信息。具体而言，研究表明 [83]，基于扩散系数的表征指标能够更详细地刻画受影响和未受影响大脑半球中癫痫过程的时空特征。然而，大脑受影响区域与未受影响区域的动力学存在显著差异：前者负责产生局灶性癫痫发作，其特征是四阶克拉默斯-莫亚尔系数不为零；而后者的动力学则不存在这种情况[83]。因此，病理性脑动力学无法用连续扩散过程来描述，也就无法用上述朗之万型建模来描述。病理性 iEEG 时间序列具有高度非线性特征 [84], ，实际上可由跳跃扩散过程描述。

Anvari等人 [77] 考察了一名药物难治性局灶性癫痫患者在术前评估期间记录的颅内脑电时间序列。该多通道记录 [见图8(a)] 持续约 2000 秒，记录时间处于无癫痫发作间期，记录位置既包括推定的癫痫灶（癫痫发作起源脑区），也包括较远处的脑区。因此，所分析的数据不包含癫痫发作事件，而是包含背景颅内脑电时间序列。Anvari等人 [77] 指出，两种时间序列的 $D^{(4)}$ 系数均不为零，并使用跳跃扩散过程对数据进行建模。图9展示了从归一化颅内脑电时间序列中估计得到的扩散系数 $D^{(2)}(x)$、跳跃幅度 $\sigma_\xi^2(x)$和跳跃率 $\lambda(x)$，以及相应的概率分布函数

序列，其中包含 4×10^5 个数据点，来自一名癫痫患者。

Anvari等人[77] 对十名癫痫患者连续多日、多通道的颅内脑电记录进行了广泛分析，发现癫痫灶的动力学可由一个随机过程刻画，其平均扩散系数和平均跳跃幅度均小于远端脑区动力学的相应特征值。因此，高阶克拉默斯-莫亚尔系数可为诊断提供额外且极具价值的信息。

然而请注意，由于跳跃过程的存在，按照式（16）估计克拉默斯-莫亚尔系数会遇到一些近期才得到研究的根本性缺陷[85-87]。因此，基于克拉默斯-莫亚尔展开的数据驱动控制方程重构仍处于发展阶段；随着相关方法不断完善，其应用范围也将进一步扩大。

VI. 数据同化与机器学习

即使我们已知描述某种复杂现象的控制方程（以常微分方程或偏微分方程的形式表示），并通过数值求解这些方程来描述该现象的动态演化，仍常常存在不确定性，通常可分为两类：（a）由对初始条件的敏感性所驱动的内部变率；（b）模型或控制方程产生的误差。第一类与初始条件误差的放大有关，即使模型完整且“完美”，也会出现。数据同化可以缓解这一问题，其简要介绍见第 III 节。第二类问题近来通过机器学习技术加以应对；机器学习技术正逐渐成为处理模型误差的有效方法。如上所述，为复杂现象开发降阶模型时，会将变量和尺度分为未解析类别和已解析类别；机器学习方法也日益显示出特别适合处理由未解析尺度造成的误差。

为了了解为何需要处理未解析尺度导致的误差，以当前气候模型为例。当前气候模型所用计算网格的分辨率在水平方向约为 50–100 千米，而大气中许多最重要的过程发生在远小于这一分辨率的尺度上。例如，云可以是。

这些结构的宽度仅有几百米，但它们在地球气候中仍发挥着至关重要的作用，因为它们能够输运热量和水汽。在可预见的未来，以相应分辨率开展模拟并不现实。目前已有两种方法将数据同化与机器学习方法相结合。

(i) 第一种方法基于对物理近似的学习，通常称为次网格参数化，这类方法通常计算成本较高。另一种方法则可以通过高分辨率模拟与低分辨率模拟之间的差异来实现。例如，对于气候模型，过去几十年来，研究人员一直采用启发式方法开发参数化方案，并根据观测结果进行调整；例如参见 Hourdin等 [88]。然而，由于系统具有极高的复杂性，参数化方案中仍然存在显著的不准确性，例如气候模型中对云的参数化或物理近似尤其如此，特别是考虑到云还会与边界层湍流和辐射等重要过程相互作用。鉴于围绕全球变暖的争论，以及温室气体浓度增加将使地球升温多少这一问题，这些不准确性表现为模型偏差这一事实，恰恰凸显了构建准确且计算成本可承受的模型的必要性。

(ii) 在第二种方法中，尝试利用观测以及空间上密集且无噪声的数据来模拟整个模型。已采用多种类型的神经网络，包括卷积 [89,90], 循环 [91], 残差 [92], 和回声状态网络 [93] 。回声状态网络是一种储备池计算机 （即一种基于循环神经网络理论的计算框架，通过称为储备池的固定非线性系统的动力学，将输入数据映射到更高维度的计算空间），它使用具有低连接性的隐藏层的循环神经网络。隐藏神经元的连接性和权重均固定并随机分配。采用专门设计的神经网络架构，并结合数据同化方法 [94] ，以解决观测不完整和/或含噪的问题。

正如 Rasp等人 [95], 所讨论的，云解析模型确实缓解了许多与参数化对流相关的问题。尽管这类模型也需要自身的调优和参数化，但与较粗分辨率模型相比，它们具有显著优势。然而，如果要实时模拟数十年的气候变化，气候解析模型的计算成本仍然过高。不过，计算能力的迅速提升使得开展时间跨度较“短”、计算网格分辨率很高的数值模拟成为可能，

这些计算网格最多可覆盖数年时间。机器学习方法正是在此时开始发挥重要作用，帮助解决精度不足和网格分辨率方面的问题，因为神经网络可以利用短期模拟的结果进行训练，随后用于较长时间范围的预测。

示例 *1*：利用机器学习表示气候模型中的次网格过程。一个很好的例子是 Rasp等人 [95] 开发的、用于表示气候模型中次网格过程的方法。他们训练了一个深度神经网络，用以表示气候模型中的所有大气次网格过程。训练所依据的是一个多尺度气候模型，该模型通过学习显式考虑了对流。随后，他们没有采用传统的次网格参数化，而是将训练好的神经网络用于全球环流模式，使其能够与已解析动力学以及核心模式的其他重要部分相互作用。

Rasp等人采用的基础模型是著名的超参数化社区大气模式（SPCAM）3.0 版 [96] ，并采用水行星设置。假设存在真实的赤道至极地温度梯度，海温保持固定，并具有完整的日变化周期（每 24 小时重复一次的模式），但没有季节变化。在超参数化中，每个全球环流模式的网格柱中都嵌入一个二维云解析模式（Rasp等人的研究中网格柱宽 84 千米）；全球环流模式显式解析深对流云，并包含针对小尺度湍流和云微物理过程的参数化。为便于比较，Rasp等人还使用传统参数化方案进行了数值模拟，该方案通常称为 CTRLCAM。该模式和方案存在许多与传统次网格云参数化相关的典型问题，包括出现双重热带辐合带、毛毛雨过多，同时又缺少极端降水；而 SPCAM 则具备完整三维云解析模式的关键优势，能够针对观测所揭示的问题加以改进。

所使用的神经网络是一个九层深度全连接网络，每层有 256 个节点，并包含 5×10^5 个参数；这些参数经过优化，以尽量减小网络预测与训练目标之间的均方误差。深度神经网络的优势在于训练损失较低，并且在预报模拟中更加稳定。模拟进行了五年，此前先经过一年的自旋调整（即海洋模式在施加的外力作用下达到统计平衡状态所需的时间）。

在预报全球模拟中，神经网络参数化与已解析动力学以及地表通量方案自由交互。

图 10(A) 展示了由 SPCAM、CTRLCAM 和神经网络辅助模型（称为 NNCAM）计算得到的平均次网格加热结果。后两个模型计算的结果高度一致，而通过模拟 CTRLCAM 软件包得到的结果则呈现双峰，这通常在气候模型中被称为热带辐合带。相应的平均温度如图 10(B) 所示，基于 SPCAM 和 NNCAM 的结果同样具有一致性。对于全球大部分地区，NNCAM 参数化方案预测的辐射通量也与 SPCAM 的结果高度一致；而 CTRLCAM 在热带地区和副热带地区存在较大差异，这是由其前述的双峰偏置造成的。图 11 展示了降水分布的结果，再次表明 CTRLCAM 无法产生正确结果，因为其计算得到的分布包含过多毛毛雨且缺少极端值。另一方面，SPCAM 和 NNCAM 计算得到的结果高度一致，包括分布的尾部。

就加快计算而言，NNCAM 参数化的速度约为 SPCAM 的 20 倍。此外，即使使用更高分辨率的训练数据进行训练，神经网络在预测时的计算成本也不会增加，这表明该方法可以轻松扩展到使用成本高得多的三维全球云解析模拟进行训练的神经网络。

示例 *2*：推断海洋-大气模型的未解析尺度参数化。我们简要介绍的第二个示例是 Brajard等人 [97], 的研究。他们提出了一种两步法，通过机器学习算法和直接数据来训练模型参数化。他们的方法尤其适用于数据存在噪声或观测稀疏的情况。第一步采用数据同化技术，即集合卡尔曼滤波器，基于截断模型估计系统的完整状态。截断模型中未解析的部分在数据同化系统中被视为模型误差。第二步使用神经网络模拟未解析部分，即根据系统状态预测模型误差；随后，将基于神经网络的参数化模型加入物理核心截断模型，构成混合模型。

Brajard 等人 [97] 将他们的方法应用于模块化任意阶海洋-大气模型（MAOOAM） [98], 。该模型包含三层，其中两层属于大气，一层属于海洋；它是一个在谱空间中解析的降阶准地转模型。模型由 N_a 个大气正压流函数模态 $\psi_{a,\,i}$ 和大气温度异常模态$T_{a,\,i}$，以及 N_o 个海洋流函数模态 $\psi_{o,\,j}$ 和海洋温度异常模态 $T_{o,\,j}$组成，因此变量总数为 $N_x = 2(N_a + N_o)$。海洋变量被视为慢变量，而大气变量则是快变量。研究考虑了 MAOOAM 的两个版本：维数为 $N_a = 20$ 且 $N_o = 8(N_x = 56)$的真实模型，以及包含 $N_a = 10$ 且 $N_o = 8$ $(N_x = 36)$的截断模型。后者不包含 20 个高阶大气变量，其中流函数和温度异常各占十个，因此无法解析与高阶大气模态相关的海气耦合。

使用真实模型进行模拟并生成合成数据，其中一部分用于训练神经网络。真实模型在经过 30,000 年的自旋调整后，又模拟了约 62 年。对合成观测进行了轻微调整，以考虑海洋观测与大气观测的尺度并不相同这一事实；因此，在同化之前，将瞬时海洋观测在以分析时刻为中心的 55 天滚动时段内取平均。神经网络的架构是一个简单的三层多层感知机。

为检验 MAOOAM 两个版本及其与神经网络构成的混合模型的准确性、预测能力和长期特性，计算了三个关键变量，$\psi_{o,\,2}$、 $T_{0,\,2}$ 和$\psi_{a,\,1}$ ——它们分别是海洋流函数和温度的第二分量，以及大气流函数的第一分量——因为它们分别解释了模型中 42%、51% 和 18% 的变率。Brajard等人 [97] 的模拟表明，采用含噪数据时，由数据同化和神经网络构成的混合模型，其预测与使用完美数据的混合模型的预测非常接近。相比之下，截断模型的预测与真实值最多相差 3 倍。

算法的更广泛应用确实面临挑战。例如，用于基于物理的数值模拟和机器学习算法的计算架构（如多核超级计算机和图形处理器）以及所使用的数据类型可能非常不同。此外，高效地训练和运行混合模型会带来非常沉重的

对硬件和软件的要求。当然，这些都是新兴领域面临的挑战。

VII. 数据驱动的控制方程发现

现在，我们将介绍一些新兴方法，用于发现复杂系统中复杂现象的控制方程。在这类系统中，可能存在海量数据，但对于所关注物理现象的控制方程，人们知之甚少，至少在宏观尺度上如此。分析此类数据的传统方法依赖统计方法以及计算数据的各种矩，但在许多情况下，这些方法受到严重限制。目前已有几种新兴方法可以应对这一问题。

A. 符号回归

虽然对数值数据进行回归并将其拟合到方程中，以便更好地理解其含义是一种古老的方法，但发现描述某种现象物理学的控制方程——对于这类现象已有可用数据，而这些数据通常基于常微分方程和偏微分方程（常微分方程和偏微分方程）——则涉及对符号和数学函数（如导数）的操作，因此代表了一种新型回归。本小节及后续小节所述的这些方法还涉及用于推导控制方程的随机优化。

关于此类系统的早期研究之一，见 Bongard and Lipson [99] 以及 Schmidt and Lipson [100]的开创性论文。正如 Bongard and Lipson 所指出的：“[解决只有数据却没有控制方程], 这一问题的一项关键挑战，是仅通过以科学家面对实验系统时会采用的方式，智能地扰动系统并观察其反应，自动发现控制方程。然而，要实现这一点，障碍在于缺乏高效的方法来搜索符号方程的空间，以及建模过程假定已提供预先收集的数据。”由于符号方程通常以常微分方程和偏微分方程的形式表示，搜索空间相当庞大。

Bongard and Lipson [99] 介绍了一种称为符号回归的方法，该方法包含三个关键要素：(a)分割，即分别合成描述系统各系统变量的控制方程，尽管这些变量的行为可能相互耦合，

从而显著缩小搜索空间。(b) 自动化探测 除了建模之外，还能自动进行（数值）实验，从而实现自动化科学过程；(c)剪裁，在模型合成过程中自动简化并重构模型，以提高其准确性、加快评估速度，并使用户更容易理解。自动化科学过程试图 [101] 模仿许多动物的做法：通过创造性质不同的补偿行为，在受伤后仍能保留行动能力

在符号回归算法中 [99,100]，分割通过随机优化方法进行，其中有许多种方法 [102], ，例如模拟退火 [103] 和遗传算法 [104]。如果数据集的规模不是特别大，这类方法足以在由构建模块组成的相对较大空间中进行搜索。Bongard and Lipson [99] 采用爬山法 [105] 进行优化。这种方法从任意解开始优化，然后通过对上一次迭代结果进行渐进式修改，反复迭代以生成更准确的解。当变量 i 的微分方程通过例如龙格–库塔方法进行数值积分时，对其他变量的引用会被实际数据替代。Bongard and Lipson [99] 仅尝试发现一组支配其所研究系统动力学的一阶常微分方程。

在符号回归方法中，一个模型由一组嵌套表达式组成，其中每个表达式 i 编码描述变量 i 动态演化的方程。还需要提供一组可能使用的数学运算符，例如 exp(·)、sin(·)、 d/dx 等，以及可用于组成方程的操作数。在对常微分方程进行积分的第一个时间步中，每个方程中的每个操作数都被设为初始条件，并对表达式求值，所得输出即为该变量的导数。每个模型进行积分的次数与系统获得初始条件的次数相同，并且所有模型都针对系统观测或收集到的全部时间序列进行优化。

符号回归至少存在三个相关问题。其一是计算成本高，因为通常优化需要大量计算 [102], ，除非能够设计出某些“技巧”来加速计算 [102]。其二是这种方法受到其能够执行的数学运算数量及其各种组合方式的限制。其三是这种方法可能会

容易出现过拟合，除非谨慎平衡模型复杂度与预测能力。

B. 符号回归与遗传编程

对原始符号回归方法的改进正在不断涌现。特别是，一种称为 GPSR 的遗传编程方法——它是符号回归的一种形式——最近刚刚出现，前景广阔。GP 是一种遗传算法，其中模型表示为（嵌套的）可变长度树结构，以表示程序，而非固定长度的运算符和值列表。

我们首先回顾一下，遗传算法利用遗传学和达尔文进化论中的概念，为一个优化问题生成可能的解，并包括四个步骤 [102]：(a) 用于生成解的选择；(b) 对“基因组”进行设计，以约束定义可能解的变量，并生成“表型”；(c) 用于生成新的近似解并逐步接近真实最优状态的交叉 和变异 操作；(d) 精英保留，选择具有最终导向全局最优状态潜力的解。完成这四组操作后，计算的一个代 随之完成。

与进化论类似，在进化论中，能够适应环境的物种会繁衍出下一代后代——即更新后的物种；在通过遗传算法求解的优化问题中，每个物种（即所有参数的集合，或在当前问题中，指用常微分方程或偏微分方程表示、需要通过复现给定数据来发现的模型）会依据代价函数，或更广义地说，适应度函数进行筛选。适应度函数用于衡量解的质量和／或准确性。每个可能的解都由一串数字（即“染色体”）表示。每轮测试或模拟后，都会剔除若干较差的可能解，并根据较优的可能解生成新的解。因此，会为每个可能的解赋予一个衡量指标或适应度，以衡量其满足总体要求的程度。这通过将适应度函数应用于该可能解所得到的模拟结果来实现。代价函数较小或适应度较高的物种，产生一个或多个后代的概率更高；这些后代可能是更准确的解，以常微分方程或偏微分方程的形式表示，用于下一代。下一代通常称为种群。

利用物种种群求解所提出的常微分方程或偏微分方程，并计算

已给出数据的那些性质，再评估代价函数或适应度函数，以选出更有可能为数据生成更准确的下一代预测的常微分方程或偏微分方程。此类候选方程会经过随机重组——即交叉步骤——并重新排列——即变异步骤——从而生成新的候选方程。代价函数最高或适应度最差的候选方程会从种群中淘汰，这一步体现了达尔文进化中的自然选择。

一个具有启发性的例子，是最近将 GPSR [106] 应用于渗流阈值 [108,109], 处初生渗流簇中的反常扩散[107] 。该结构在所有长度尺度上都是分形（并且在宏观上具有异质性）的，其分形维数D_f 在二维和三维中分别为 $91/48 \simeq 1.9$ 和 2.53。簇中的扩散是反常的 [107], ，即扩散粒子的均方位移随时间增长为 $\langle R^2(t)\rangle \propto t^{\alpha}$，其中 $\alpha = 2/D_w$，且 D_w 表示随机行走的分形维数，在二维和三维中分别为$D_w \simeq 2.87$ 和 3.8。一个重要且长期颇具争议的问题，是 P（$\mathbf{r}$ t）的控制方程，即扩散粒子在时间 t处于位置 $\mathbf{r}$ 的平均概率；针对这一问题，人们提出了各种方程 [110-112] 。

通过对二维初生渗流簇上的扩散过程进行随机行走数值模拟，Im 等人 [106] 收集了大量关于 $P(\mathbf{r}\ t)$ 的数值数据。当他们将 GPSR 方法应用于这些数据时，发现 $P(\mathbf{r}\ t)$ 的控制方程为

$$\frac{\partial^{0.62} P}{\partial t^{0.62}} = \frac{0.82}{r}\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial^2 P}{\partial r^2}\ . \tag{23}$$

其中， $\partial^{\alpha}/\partial t^{\alpha}$ 表示分数阶导数。注意，式（23）右侧第一项中的因子 $1/r$ 是由算法发现的，并未包含在试探搜索集合中。Metzler等人 [112], 推导出的 $P(r,\ t)$的控制方程为

$$\frac{\partial^{\alpha} P}{\partial t^{\alpha}} = \frac{1}{r^{d_s-1}}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^{d_s-1}\frac{\partial P(r,t)}{\partial r}\right] = \frac{d_s-1}{r}\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial^2 P}{\partial r^2}\ , \tag{24}$$

其中 $d_s = 2D_f/D_w$，且 $\alpha \approx 0.7$。因此，所发现的方程与通常被认为支配渗流阈值处初生渗流簇中反常扩散的方程在实际上完全相同。

He 等人 [113] 指出，由分数阶扩散方程描述的非均质介质中输运过程的动力学不具有自平均性，也就是说，可观测量（如均方位移）的时间平均值与系综平均值不会趋于

彼此相等。这与已知的渗流阈值处 CPC 上扩散的情况一致 [114,115], : 扩散粒子的位移分布不具有自平均性。在渗流阈值处的临界渗流簇上发现分数阶扩散方程，完全符合这一图景，也表明该方法具有内在的一致性和准确性。

GPSR 也被用于发现增材制造 Inconel 718 [116] 的形貌依赖塑性模型。尽管遗传算法适用于并行处理和计算，但目前 GPSR 尚不适用，因为它需要对一组常微分方程或偏微分方程进行数值求解。因此，需要开发更高效的求解方法，才能使 GPSR 成为解决大规模科学问题的强大而可靠的工具。

C. 非线性动力学稀疏识别

Schmid [117]提出了用于流体系统中时间序列的降维算法——动态模态分解方法。该算法是一种有效的方法，可用于捕捉流场数值数据或实验数据的关键特征。它计算一组模态，每个模态都与固定的振荡频率和衰减/增长率相关联，并近似表示复合算子（亦称 Koopman 算子 [118]）的模态和特征值。Jovanovi´c 等 [119] 开发了一种原始动态模态分解算法的稀疏化变体，通过对系统快照矩阵与模态线性组合之间的最小二乘差进行正则化来诱导稀疏性，并额外加入一项，用于惩罚动态模态分解振幅向量的 L1 范数——即空间中向量幅值之和。顾名思义，该算法对模型结构唯一的假设是：支配系统动力学的重要项只有少数几个。这意味着所寻找的方程在可能的函数空间中是稀疏的，而这一假设适用于许多物理系统。

作为对原始符号回归算法的一项重要改进与扩展，Brunton 等人[120] 提出了一种方法，即非线性动力学稀疏识别（SINDy）。稀疏回归用于发现能够准确表示数据所需的控制方程中数量最少的项，可避免此类方法中经常出现的过拟合

。Brunton 等人 [120]考虑了如下类型的动力系统,

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}[\mathbf{x}(t)] \,, \tag{25}$$

其中，$\mathbf{x}(t)$ 表示系统在时刻 t 的状态，而 $\mathbf{f}[\mathbf{x}(t)]$ 表示定义系统运动方程的动力学约束，例如牛顿流体流体动力学中的纳维–斯托克斯方程，这些方程可以推广为包含参数化和外力。因此，目标是从数据中确定 $\mathbf{f}[\mathbf{x}(t)]$ 。

为此，需要收集状态 $\mathbf{x}(t)$ 的时间历程，并测量其导数$d\mathbf{x}(t)/dt = \dot{\mathbf{x}}(t)$，或通过数值方法对其进行近似。随后，在多个时刻 t_1,t_2, $\cdots$, t_m 对数据进行采样，并将其整理为两个矩阵，定义如下:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1(t_1) & x_2(t_1) & \cdots & x_n(t_1) \\ x_1(t_2) & x_2(t_2) & \cdots & x_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_1(t_m) & x_2(t_m) & \cdots & x_n(t_m) \end{bmatrix} , \tag{26}$$

and

$$\dot{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \dot{x}_1(t_1) & \dot{x}_2(t_1) & \cdots & \dot{x}_n(t_1) \\ \dot{x}_1(t_2) & \dot{x}_2(t_2) & \cdots & \dot{x}_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dot{x}_1(t_m) & \dot{x}_2(t_m) & \cdots & \dot{x}_n(t_m) \end{bmatrix} . \tag{27}$$

然后，为$\mathbf{X}$的各列构建一个候选非线性函数库 $\mathcal{L}(\mathbf{X})$，其中每列代表式（25）右侧的一个候选函数。当然，候选函数的选择完全自由。例如,

$$\mathcal{L}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{X} & \mathbf{X}^{(2)} & \mathbf{X}^{(3)} & \cdots & \sin(\mathbf{X}) & \cos(\mathbf{X}) & \cdots \end{bmatrix} , \tag{28}$$

其中，$\mathbf{X}^{(n)}$ 表示一个 n阶多项式。因此，例如,

$$\mathbf{X}^{(2)} = \begin{bmatrix} x_1^2(t_1) & x_1(t_1)x_2(t_1) & \cdots & x_2^2(t_1) & \cdots & x_n^2(t_1) \\ x_1^2(t_2) & x_1(t_2)x_2(t_2) & \cdots & x_2^2(t_2) & \cdots & x_n^2(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_1^2(t_m) & x_1(t_m)x_2(t_m) & \cdots & x_2^2(t_m) & \cdots & x_n^2(t_m) \end{bmatrix} . \tag{29}$$

例如，如果我们知道式（25）中的f(x)的每一行中只有少数几个非线性项处于激活状态，那么我们将建立一个稀疏回归问题，以确定稀疏系数向量 $\boldsymbol{\Xi} = [\boldsymbol{\chi}_1, \boldsymbol{\chi}_2 \cdots \boldsymbol{\chi}_n]$，从而确定哪些非线性项处于激活状态:

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathcal{L}(\mathbf{X})\boldsymbol{\Xi} \, . \tag{30}$$

$\boldsymbol{\chi}_k$ 的每一列都是一个稀疏系数向量，用于确定式（25）右侧处于激活状态的项。在确定 $\boldsymbol{\Xi}$ 之后，通过以下方式为控制方程的每一行构建一个模型:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}) = \mathcal{L}(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{\chi}_k \, . \tag{31}$$

在公式 (31) 中， $\mathcal{L}(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})$ 是由 $\mathbf{x}$ 的元素构成的符号函数向量，而 $\mathcal{L}(\mathbf{X})$ 是数据矩阵。换句话说

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Xi}^{\mathrm{T}} \left[\mathcal{L}(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\right]^{\mathrm{T}} \, . \tag{32}$$

请注意，式 (30) 的每一列都需要单独进行一次优化，以确定第 k 行方程对应的稀疏向量 $\boldsymbol{\chi}_k$。一般而言， $\mathcal{L}(\mathbf{X})$ 是一个 $m \times p$ 矩阵，其中 p 表示候选函数的数量。自然地，$m \gg p$，因为通常数据量远大于函数数量。由于函数形式的数量可能非常庞大，因此需要测试许多不同的函数基，并利用所得模型的稀疏性和准确性来确定用于表示数据的正确函数基。测试过程可以借助对问题物理学的认识来指导。

显然，该方法应用于任何现象时能否取得成功，以及所得模型的准确性，取决于测量变量的选择、数据的质量和稀疏函数基。虽然事先确定正确的变量可能较为困难，但时滞坐标通常可以从时间序列中提供有用的变量 [121,122]。在该方法中，利用测量值的时滞值构成新空间中的向量，该空间称为嵌入空间，

$$s_m = \left[s_{n-(d-1)\tau}, s_{n-(d-2)\tau}, \cdots, s_n\right] \, , \tag{33}$$

其中， d 是嵌入维数， τ 是时间滞后或延迟。根据 Takens[121], ，如果序列 $\{s_m\}$ 由对某个动力系统状态的测量值构成，那么在满足某些一般性假设的情况下，时滞嵌入会为

原始集合提供一一对应的映像，前提是 d 足够大。如果有 m 个可用测量值，嵌入向量的数量只有 $m-(d-1)\tau$。当然，了解所研究现象的物理学也有助于选择合理的非线性函数和测量坐标。例如，流体动力学问题涉及动量守恒方程，而对于牛顿流体，则涉及纳维–斯托克斯方程。

对于科学和工程学中的许多重要问题，例如流体动力学、输运以及非均质材料中的变形问题，感兴趣的现象通常由包含少量空间变量的偏微分方程描述，同时涉及大量测量数据，或从微观尺度模拟中获得的数值数据。直接将该方法应用于这类问题并不现实，因为函数库 $\mathcal{L}$ 随 m 增长的阶乘级增长，以及所需的多次独立优化，使这类应用难以实现。不过，也已有相应的解决方案。例如，考虑一个由纳维–斯托克斯方程支配的三维空间流体流动问题。可以使用本征正交分解技术 [123] ，以降低高强度数值模拟的复杂性。在这里，这意味着用更简单的模型取代纳维–斯托克斯方程，从而大幅减少数值求解所需的计算量；另请参见上文关于人体动脉系统建模的示例。

示例：圆柱后方的涡脱落。SINDy 的一项启发性应用由 Brunton等人 [120] 用于研究圆柱后方涡脱落这一经典问题。很久以前就有人提出 [124] ，湍流是由一系列霍普夫分岔引起的，这些分岔体现了三次非线性。这种非线性令人费解，因为纳维–斯托克斯方程只包含二次非线性（它是一个二阶偏微分方程）。后来，在雷诺数 Re $=47$下，首次发现霍普夫分岔 [125,126] 发生于稳态层流尾迹向层流周期性涡脱落转变的过程中；研究表明[127] ，振荡模态与基流之间的耦合会形成慢流形，在慢时间尺度上产生可近似表示三次非线性的代数项。

利用 Colonius和Taira [128], 报告的雷诺数为 Re $=100$ 时圆柱绕流纳维–斯托克斯方程数值模拟所得数据，Brunton 等人 [120]表明，他们的方法能够还原 Hopf 标准形；这是一个耗时 30 年才得以解决的问题。由于纳维–斯托克斯方程包含二次非线性，Brunton等人不得不采用具有时间尺度分离的平均场模型，使得快速平均场

变形受制于缓慢的涡脱落动力学。因此，他们采用了 Noack 等人 [127],提出的圆柱动力学降阶平均场模型。

$$\frac{dx}{dt} = \mu x - \omega y + Axz \,, \tag{34}$$
$$\frac{dy}{dt} = \omega x + \mu y + Ayz \,, \tag{35}$$
$$\frac{dz}{dt} = -\lambda(z - x^2 - y^2) \,. \tag{36}$$

当 λ 的值较大时， z 动力学会较慢，因此平均流会迅速调整并处于慢流形上；该慢流形 $z = x^2 + y^2$ 由涡脱落的振幅给出。将代数形式代入方程 (34) 和 (35)，即可恢复 Hopf 标准形。

给定三个坐标的时间历程，SINDy 算法正确识别了（二次）非线性项（纳维–斯托克斯方程中的非线性项），并再现了抛物型慢流形。方程 (34)–(36) 涉及的导数无法直接测量，但可由状态变量计算得到。更重要的是，当训练数据不包含从慢流形之外出发的轨迹时，该算法会错误地 识别出三次非线性，因此无法识别慢流形。

图12展示了结果，并将其与完整模拟进行了比较。图12左侧显示了抛物型慢流形，其中 A 表示涡脱落，B 表示平均流，C 表示一个不稳定定点。为降低问题的维数，使用了本征正交分解基和位移模态，如图中右侧中央所示。在本征正交分解坐标中，识别出的动力学与真实轨迹高度吻合。识别出的动力学还捕捉到了均值场模型中的二次非线性和时间尺度。

开源软件包 [129] PySINDy [Pyton SINDy] 已使用 Python 开发，用于整合 SINDy 的各个版本 [130]。需要注意的是，通过促进稀疏性，SINDy 求解了一个超定方程组，即 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$，这使其具有模块化特性，从而易于进行创新。与上文所述的原始符号回归相比，SINDy 在计算上极其高效，所需计算时间少了几个数量级。它还可以与提供自动微分 [131,132],并联合学习坐标和模型的神经网络结合使用 [133,134]。尽管该方法已经

应用于过去几年中的各种问题 [135-156]，但它仍在不断发展，以使其适用于更广泛的问题类别，同时提高计算速度。

SINDy 的一种独特变体——弱稀疏非线性动力学识别（WSINDy）最初由 Schaeffer 和 McCalla [156] 提出，后经 Messenger 和 Bortz [157], 大幅改进，旨在绕过 SINDy 所需的导数计算，从而显著提高计算速度。该方法假设式（25）中的函数**f(x)**可以用多项式准确表示，$F(x) = x^{j-1}$，并采用数量足够多的特征向量，以涵盖底层系统中出现的所有项。每个特征向量 $v_j(x, t_k)$ 均通过分段常数求积进行近似，

$$v_j(x, t_k) = \int_0^{t_k} F_j[x(t)]dt \approx \Delta t \sum_{l=1}^{k} F_j[x(t_l)] \ , \tag{37}$$

其中 $k = 1, 2, \cdots, K$，且 $v_j(x, t_0) = v_j(x, 0) = 0$，$K$ 和 Δt 分别表示离散时间步的数量和时间步长。该求积方法无需平滑即可得到无噪声**x**(*t*) 的良好近似，并有效计算出一组形如 $x^n\eta^p$, $E(x^n\eta^p) = E(x^n)E(\eta^p)$ 的随机变量之和的缩放期望 E 。由于噪声独立于数据采样，因此允许将两个期望解耦。因此，如果使用分段常数求积来近似特征向量，许多依赖噪声的交叉项实际上为零。

通过消除逐点导数近似，可以从无噪声数据中以机器精度估计模型的系数，也能稳健地识别数据中含有大量噪声的偏微分方程。该方法对偏微分方程的卷积弱形式进行离散化，并利用检验函数的可分离性，通过快速傅里叶变换高效地进行模型识别。Messenger 和 Bortz [158] 表明，WSINDy算法的计算复杂度最坏为 $\mathcal{O}(N^{d+1}\log\ N)$ 量级，其中每个 $d + 1$ 维度有 N 个数据点，即每个数据点需要 $\mathcal{O}(\log\ N)$ 次运算。该方法已用于研究若干涉及复杂现象的重要问题 [159-162]。

D. Mori-Zwanzig 表述

Mori [163] 和 Zwanzig [164] 提出了一种形式化方法，为开发高维动力系统（如湍流）的降阶模型，以及基于投影算子构建的数据，提供了数学上精确的程序。该

方法的核心是将一组常微分方程重新表述为针对已解析变量 x_r的约化系统，同时保留原系统的动力学特征，这意味着要正确表示未解析变量对系统已解析物理量的贡献。该方法通过将投影算子应用于由这组常微分方程描述的原动力系统的演化过程，实现其维度约简。

Mori公式导出广义线性朗之万方程，而 Zwanzig 的公式则导出广义非线性朗之万方程。该方程由马尔可夫项、噪声项和记忆项组成，是对模型动力学的精确 表述。因此，在仅有展开式的前两项起重要作用的极限下，这种方法可视为上述随机 Kramers-Moyal 展开的非线性推广，因为在该极限下，可以用线性朗之万方程描述系统。然而在实践中，该方法在计算上颇具挑战，尤其是应用于由偏微分方程描述的系统时；下文将对此进行讨论。
Mazenko [165], 、Evans 和 Morriss [166],以及 Hi´jon 等人 [167]对这一主题作了全面论述。

在介绍 Mori-Zwanzig方法之前，我们先指出，该方法最初是为描述分子系统的非平衡统计力学而发展起来的，旨在求解非平衡系统的概率密度函数和时间关联函数，且其适用范围仅限于哈密顿动力系统。Chorin 等人 [168]将这一公式推广到一般的时变系统，例如流体动力学和反应扩散系统中的系统。他们建立这一框架是为了进行最优预测，即求解由方程（25）描述的非线性时变问题；对于这类问题，计算完整阶数解过于困难，而且初始条件中未解析的部分也存在不确定性。

我们将紧随 Falkena 等人 [169]的论述来介绍 Mori-Zwanzig 表述。考虑由方程（25）描述的非线性动力系统。考虑与轨迹 $x(t)$、 $x(t=0) = y$相对应的初始条件，以及沿方程（25）解的可观测量 $u(y,t) = g[x(t)]$ ，其中 g 定义在 R^n上。因此，必须有

$$\frac{\partial}{\partial t}u(y,t) = \mathcal{L}u(y,t) \ , \tag{38}$$

其中 $u(y,0) = g(y)$，其中 $\mathcal{L}$ 是刘维尔算子，其定义为： $\mathcal{L}u = \sum_{i=1}^{n} R_i(y)\partial u(y,t)/\partial y_i$，其中 y_i 是 y 的第 i 个分量，而 $\mathbf{R}$ 是方程 (25) 中的向量场。对于一个线性

系统旨在为一组选定的 m 已解析变量 $x_r \in R^m$构建一个方程组，未解析变量记为 $x_u \in R^{n-m}$，使得$\mathbf{x} = (x_r, x_u)$。

为了将包含 n 个分量的系统缩减或映射为包含 m 个分量的系统，需要一个投影算子 P, P: $C(R^n, R^k) \to C(R^m, R^k)$，其中 k 是任意函数 $f(x_r, x_u)$ 的维数，投影作用于该函数。此类投影算子的一个例子是线性投影算子，即 $[Pf](x_r, x_u) = f(x_r, 0)$，也就是说，它将所有未解析变量设为零，只保留已解析变量。我们用 Q 表示 P 的补算子，定义为 $Q = I - P$，其中 I 是恒等算子。

系统（38）的解为 $u(y, t) = [e^{t\mathcal{L}}g](y)$，其中 $e^{t\mathcal{L}}$ 是演化算子，或者前面提到的 Koopman 算子 [118], ，它在 $\mathcal{L}$ 和 $e^{t\mathcal{L}}$ 对易的条件下传播一个可观测量。因此，若 $g = y_i$，则有 $x_i(y, t) = e^{t\mathcal{L}}y_i$。方程（38）可重写为

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{t\mathcal{L}}g\right](y) = \left[e^{t\mathcal{L}}\mathcal{L}g\right](y) = \left[e^{t\mathcal{L}}P\mathcal{L}g\right](y) + \left[e^{t\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y) \tag{39}$$

等式（39）右侧的第二项描述了未解析变量的演化。若采用杜哈梅尔–戴森恒等式，即

$$e^{t(A+B)} = e^{tA} + \int_0^t e^{(t-s)(A+B)}Be^{sA}ds\ , \tag{40}$$

并取 $A = Q\mathcal{L}$ 和 $B = P\mathcal{L}$，可得

$$\left[e^{t\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y) = \left[e^{tQ\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y) + \int_0^t \left[e^{(t-s)\mathcal{L}}P\mathcal{L}e^{sQ\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y)ds\ , \tag{41}$$

因此，等式（39）变为

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{t\mathcal{L}}g\right](y) = \left[e^{t\mathcal{L}}P\mathcal{L}g\right](y) + \left[e^{tQ\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y) + \int_0^t \left[e^{(t-s)\mathcal{L}}P\mathcal{L}e^{sQ\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y)ds\ . \tag{42}$$

特别地，若 $g(y) = y_i$，则有 $[e^{t\mathcal{L}}g](y) = x_i(y, t)$，并得到广义朗之万方程，

$$\frac{\partial}{\partial t}x_i(y,t) = M_i[x_r(y,t),0] + \mathcal{N}_i(y,t) + \int_0^t K_i[x_r(y,t-s),s]ds\ , \tag{43}$$

其中，$\mathcal{N}_i = \left[e^{tQ\mathcal{L}}Q\mathcal{L}g\right](y)$，以及，$K_i = [P\mathcal{L}\mathcal{N}_i](y, t)$。如上所述，Mori-Zwanzig 表述得出一个包含三项的广义朗之万方程，即马尔可夫项、噪声项和记忆项，分别由 M_i、$\mathcal{N}_i$ 和方程（43）右侧的积分表示。由初始条件的不确定性产生的噪声项，是以下正交动力学方程的解，

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{N}_i(y,t) = Q\mathcal{L}\mathcal{N}_i(y,t)\ , \tag{44}$$

满足初始条件，$\mathcal{N}_i(y,0) = Q\mathcal{L}y_i$。之所以称为正交动力学，是因为其解在任意时刻都位于投影算子 P 的正交空间中。

方程（43）是精确的，但确定其解未必比求解原方程（方程（25））更简单。使用Mori-Zwanzig方法为一组数据构建动力学方程（即使用方程（43））的主要瓶颈，在于确定方程（44）的数值解，这一过程颇为困难。例如，直接计算该积分需要在每个时间步存储此前所有步骤的解，这是一项艰巨的任务。能否"轻松"获得解，很大程度上取决于投影算子 P 的选择；它对正交动力学方程（方程（44））的形式和复杂性有重要影响。 P 应选择为使正交动力学系统保持稳定；这意味着不仅必须保留未解析动力学中的稳定化因素，还必须选择 P，使求解方程（43）和（44）比求解方程（25）所描述的原始系统更简单。

一个简单的例子 [169,170] 说明了该方法的工作原理。考虑以下常微分方程组，

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x_r \\ x_u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{45}$$

给定初始条件，$x(0) = (y_r, y_u)$。我们希望仅推导出 x_r 的方程。为此，使用常数变易法求解 x_u 的方程，并将结果代入 x_r 的方程，得到

$$\frac{dx_r}{dt} = a_{11}x_r(t) + a_{12}e^{a_{22}t}y_u + \int_0^t a_{12}e^{a_{22}(t-s)}a_{21}x_r(s)ds\ . \tag{46}$$

方程（46）是精确的，它表现出与原系统相同的行为，而未解析变量的影响仅以初始条件 y_u 的形式出现。

由于使用 Mori-Zwanzig方法的主要障碍在于获得合适的投影算子 P，因此有必要进一步讨论这一问题，以便为算子的选择提供一些指导。正如前文所述，Mori公式导出的是线性广义朗之万方程，而 Zwanzig 的公式则产生非线性广义朗之万方程。在前一种情况下，投影算子依赖于由下式定义的内积：$\langle f, g\rangle = \int f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mu(\mathbf{x})$，其中 $\mu(\mathbf{x})$ 是概率分布函数。在给定该内积后，Mori 投影算子定义在一组线性无关的

基函数 $b_i(\mathbf{x})$ 所张成的空间上，使得 [171]

$$[Pf]\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \sum_i \sum_j \langle f, b_i \rangle [\mathcal{M}^{-1}]_{i,j} b_j(\mathbf{x}) \ , \tag{47}$$

其中， $\mathcal{M}$ 为协方差矩阵， $\mathcal{M}_{ij} = \langle b_i, b_j \rangle$。如果基函数是正交归一的，那么， $\mathcal{M} = \mathbf{I}$，其中$\mathbf{I}$ 为单位矩阵，投影算子便可大大简化：

$$[Pf]\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \sum_o \langle f, b_i \rangle b_i(\mathbf{x}) \ . \tag{48}$$

另一方面，在 Zwanzig 表述中，可观测量是已解析变量$\mathbf{x}_r$的子集，投影算子则通过对未解析变量进行直接边缘化来定义。如果变量$\mathbf{x}$ 的概率分布 $\mu(\mathbf{x})$按已解析/未解析变量表示为密度函数 $\rho(\mathbf{x}_r,\mathbf{x}_u)$ [171], ，那么，

$$[Pf](\mathbf{x}_r) = \frac{\int f(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_u)\rho(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_u) d\mathbf{x}_u}{\int \rho(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_u) d\mathbf{x}_u} \tag{49}$$

由此得到一个非线性函数，该函数已被用于 [172] 基于 Mori-Zwanzig 表述建立湍流模型。

也有人提出了其他方法来克服选择投影算子这一难题。例如，Gouasmi等人 [170] 提出，使用伪正交动力学近似，以一个复杂度较低的方程近似正交动力学方程。在他们的方法中，通过利用全阶解的快照，先验地估计上述积分中的记忆核。因此，他们求解的是具有 Liouville 形式的伪正交动力学方程，而非原始方程。该方法基于以下假设：对于一个可观测量，正交动力学算子的半群是一个复合算子，类似于 Liouville 算子的半群，因此其行为也与之相似。

尽管开发合适的投影算子 P以及获得比求解原始系统成本更低的系统动力学数值解存在困难，Mori-Zwanzig方法作为一种为具有大量可用数据的系统发现控制方程的方法，正逐渐获得更多认可和应用。Chu 和 Li [173]利用该方法推导出一个描述纳米力学系统中热传导的方程，因为传统的热传导方程在这种长度尺度下不再适用。他们考虑了一条由 N 原子组成的一维孤立链，并将其均匀划分为 n 个块，

每个区块都包含已知两个原子之间平衡间距的“原子”，并计算区块之间的能量输运。因此，选取局部能量密度作为粗粒化变量，并利用 Mori-Zwanzig 方法推导出广义朗之万方程。传播算子 $\mathcal{L}$ 被定义为

$$\mathcal{L} \equiv v_0 \frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{f(x_0)}{m} \frac{\partial}{\partial v_0} \tag{50}$$

其中，x_0 和 v_0 分别是分子初始位置和速度，m 是它们的质量，而 $f(x)$ 是力，即 $f = -\nabla E(x)$，其中 E 是势能。他们表明，在链的两端施加温度梯度（链由 250 个原子组成）时，使用 Mori-Zwanzig方法计算得到的结果与非平衡分子动力学模拟的结果一致。

示例：湍流的降阶方程。Tian 等人 [171] 利用各向同性湍流的大量数据驱动 Mori-Zwanzig方法的投影算子，并构造降阶纳维–斯托克斯方程。对纳维–斯托克斯方程进行空间离散化后，可得到以下关于流体速度$\mathbf{v}(t)$的非线性方程组：

$$\frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = R[\mathbf{v}(t)] \,, \tag{51}$$

该方程组具有式 (25) 所示的形式，其中 R 是表示纳维–斯托克斯方程空间离散化后右端项的非线性函数。对于任何物理问题，计算纳维–斯托克斯方程的完全已解析动力学都十分困难。因此，为了建立湍流的降阶模型，通常使用空间滤波器对速度场进行粗粒化，从而缩小需要解析的尺度范围。设 $\bar{\mathbf{v}}(t)$ 为滤波后的流体速度。那么，如上所述，根据 Mori-Zwanzig 表述，$\bar{\mathbf{v}}(t)$ 的式 (43) 可写成如下向量形式：

$$\frac{d\bar{\mathbf{v}}(t)}{dt} = M[\bar{\mathbf{v}}(t)] + \mathcal{N}(t) - \int_0^t K[\bar{\mathbf{v}}(t-s), s] ds \,, \tag{52}$$

这是该表述的非线性版本。在线性表述中，即按照 Mori 最初的推导，线性无关基函数 $\mathbf{b}(t)$ 的广义朗之万方程为

$$\frac{d\mathbf{g}(t)}{dt} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}(t) + \mathcal{N}(t) - \int_0^t \mathbf{K}(t-s) \cdot \mathbf{g}(s) ds \,. \tag{53}$$

Mori 投影算子的优点在于，由于投影后的低维函数具有线性，核 **K** 的推导显著简化。

通过对完全分辨的离散欧拉纳维–斯托克斯方程进行数值模拟，获得了大量数据，表示为

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_i v_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} \,, \tag{54}$$

其中， ν 为运动黏度， p 为通过求解 p的泊松方程计算得到的压力。通过计算两点相关函数，并利用迭代过程 [174]将其相互关联，使用这些数据提取了方程（53）中的记忆核和噪声项。图13比较了原始数据中一组可观测量的记忆核的弗罗贝尼乌斯范数（以相应的马尔可夫算子归一化）与采用不同分辨率的高斯滤波器所得到的结果，其中分辨率以滤波长度 l_Δ衡量。 $m \times n$ 矩阵的弗罗贝尼乌斯范数定义为其元素平方和的平方根。正如 Tian 等 [171], 所讨论的，记忆核的弗罗贝尼乌斯范数不会在有限时间延迟下消失，但在约几个科尔莫哥洛夫时间尺度（即湍流中的最小时间尺度）的时间延迟处会减小两到三个数量级，这表明在记忆积分中采用有限支撑是合理的假设，因为较大时间延迟的贡献通常可以忽略。此外，滤波长度尺度 l_Δ 的影响也很显著。 l_Δ 越大，记忆核的时间衰减越慢，有限记忆长度也就越长，这表明动力学贡献会从马尔可夫项转移到记忆积分。

如上所述，尽管这一形式体系在 50 多年前就已发展出来，但由于确定表示广义拉格朗日方程的积分-微分方程中的核需要进行大量计算，而且选择投影算子也十分复杂，因此直到最近，该方法的应用才开始涌现。其中包括 Parish 和 Duraisamy [172,175]以及 Maeyama 和 Watanabe [176]为湍流建立降阶模型。Li 和 Stinis [177] 建立了用于不确定性量化的降阶模型，而 Stinis [178] 则基于 Mori-Zwanzig 表述，为欧拉方程提出了一系列高阶模型。该研究领域终于开始兴起。

E. 机器学习方法

本节迄今描述的方法并未使用机器学习算法。目前出现了一类新兴的数据驱动方法，部分依赖此类算法来发现复杂现象的控制方程。Qin 等人 [179]对使用机器学习发现动力系统控制方程时必须解决的问题作了很好的讨论。

此类方法的一个例子是 DiPeitro 等人的工作。[180], 他们提出了一种基于数据推导动力系统哈密顿量的模型。假设该哈密顿系统由 $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \cdots, q_n)$ 和 $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \cdots, p_n)$ 描述，其中 $\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p}$ 分别表示系统中"物体" i 的位置和动量。通常，系统的演化由 $d\mathbf{p}/dt = -\partial\mathcal{H}/\partial\mathbf{q}$ 和 $d\mathbf{q}/dt = \partial\mathcal{H}/\partial\mathbf{p}$ 描述，其中 $\mathcal{H}$ 是系统的哈密顿量，即总能量，并满足初始条件 $\mathbf{q}_0$ 和 $\mathbf{p}_0$。时间演化是辛同胚的，即保持相空间的体积形式以及辛二形式楔积 $d\mathbf{p} \wedge \mathbf{x}$。DiPietro 等人假设哈密顿量是可分离的，即可以写成 $\mathcal{H} = E_p + E_k$，其中 E_p 和 E_k 分别为势能和动能。

他们将这种方法称为稀疏辛积分神经网络，该方法使用两个神经网络 $\mathcal{N}_{E_p}$ 和 $\mathcal{N}_{E_k}$，分别对总哈密顿量中的势能和动能进行参数化。每个网络都会在用户指定的搜索空间内进行稀疏回归（见上文）。该搜索空间可以包含多种函数形式，例如多项式、三角函数等，并在前向传播中计算函数基的各项。为使用户能够自动计算相对于$\mathbf{q}$ 和$\mathbf{p}$的梯度，变换必须在网络内部进行。随后，基函数各项会传入一个全连接层，该层通过将每个基函数项的可训练参数设为相应系数，学习所需的基函数项；这些系数是相对于基中的各项线性学习得到的。根据指定的函数空间，可以调整网络架构。例如，若使用三角函数进行参数化，可以添加带偏置的层

为了进行训练以及生成预测，这两个网络与一种辛积分格式相耦合，其阶数可以根据愿意或能够投入的计算时间来选择。DiPietro 等人 [180] 采用了四阶积分格式。每当需要计算哈密顿量的梯度（见上文）时，它就.....

在网络中完成传播后，自动计算所需的梯度，并将其传递给辛积分器。由于第四阶辛积分通常需要多次迭代计算，具体次数取决于时间步长的大小，因此在计算损失函数或代价函数之前，往往需要多次通过每个网络。计算出下一状态后，计算预测的下一状态与实际下一状态之间的 L1 范数。还会加入 L1 正则化，以确保哈密顿量中只保留必要的项。也可以通过阈值处理达到相同效果，完全消除非必要项。随后定义并计算损失函数，并执行使其最小化的优化过程。

另一种方法基于深度算子网络 DeepONet [181], ，该网络以有监督的数据驱动方式，从相对较小的数据集准确且高效地学习算子。DeepONet 由两个子网络组成：一个用于对固定数量传感器处的输入函数进行编码 $x_i, \quad i = 1, \cdots, m$，称为分支网络；另一个用于对输出函数的位置进行编码，称为主干网络。通过系统地进行模拟，可以识别支配这些数据的偏微分方程。已有研究表明，与全连接神经网络相比，DeepONet 能够显著降低泛化误差。

需要注意的是，DeepONet 不同于第 IV 节所述的物理信息机器学习算法。后者用于对复杂介质中的各种现象进行预测，其中，已知偏微分方程的解由深度卷积神经网络进行建模；该网络的参数与模型的其他参数一同进行学习，但由于基础物理机制已先验确定，因此只能发现本构关系。例如，Reyes等 [182]使用物理信息机器学习算法，为两个非牛顿系统发现黏度模型，即聚合物熔体和颗粒悬浮液；在这一过程中，他们仅使用了流体速度数据。

此外，还提出了一种混合方法 DeepM&Mnet，这是一种组合式监督神经网络，它将 DeepONet 与物理信息机器学习所编码的物理规律相结合，以便更快、更准确地求解复杂问题。例如，Cai 等人 [183] 开发了该方法，用于研究由流场与电场耦合产生的电对流，以及阳离子和阴离子的浓度分布。在他们的方法中，给定来自其他场的一般输入后，首先对 DeepONet 进行预训练，使其分别预测各个场

独立地进行预测。

在另一项应用中，Mao等人 [184] 采用相同的混合方法研究了气流高速流过正激波的情形。在这一现象中，流体温度迅速升高，触发下游的化学解离反应。各组分会导致流体性质发生显著变化。因此，这是一个耦合的多物理场、多尺度动态现象。对该现象进行标准数值模拟极其困难，而混合型 DeepM&Mnet 则可以无缝整合稀疏的状态变量测量值，并将其纳入模拟算法中。

VIII. 可能的未来方向

当今世界正面临许多极其棘手、同时也至关重要的问题。针对这些问题，我们已经拥有或正在积累大量数据，但相关的物理定律，或者更准确地说，支配这些问题的方程，仍然难以捉摸。此类问题包括但不限于：理解认知及其他生物系统的神经基础，预测大地震，预测地下水含水层中污染物的迁移归宿，提取并预测气候中一致的变化趋势，在世界许多地区遭受严重干旱之际理解并预测全球土壤盐渍化，管理 COVID-19 等新发疾病的传播，控制湍流，以及其他诸多问题。

本文旨在介绍理论和计算方法开发方面的最新进展。这些方法不仅能够在合理的时间内，有意义地分析海量数据（其中包含关于复杂现象特性的信息，例如上文所列的那些现象），还能够为预测其未来行为提供框架。正如本文所希望展示的那样，人们已经开发出许多方法。然而，尽管“流行说法”认为机器学习和人工智能将解决上文所列的许多问题，甚至全部问题，但事实并非如此，至少在短期和中期内并非如此。人工智能并非解决科学和工程学所有问题的灵丹妙药；如果使用不当，它会造成一种误导性的假象，让人以为上文所列的所有问题以及许多其他问题都将在未来 5 至 10 年内得到解决，而事实并非如此，这还会使科学进步倒退。

与此同时，正如本文观点所试图阐明的那样，在开发不依赖机器学习的方法方面已取得了长足进展，而且这些方法还提供了新的

途径，以应对科学和工程学领域日益普遍的大数据问题。因此，选择哪条途径本身就是一个至关重要的问题。在某些情况下，例如涉及多个差异悬殊的长度尺度以及极长时间尺度的气候建模，现有计算能力不足以对所有长度和时间尺度进行数值模拟。因此，结合机器学习算法与分辨率高但成本可承受的模拟，或许是最佳途径。另一些情况则属于“非此即彼”或“二选一”系统：对于这些系统，无需借助机器学习也能处理大数据；或者，采用合适架构训练神经网络可能是唯一的希望。

即使对于目前已有的方法，尽管不可否认，在大约十年左右的时间里已经取得了巨大进展，但仍然存在许多问题。有些问题纯粹属于理论层面，而许多问题则是涉及计算速度、可访问的参数空间范围等方面的实际问题。例如，

（i）尽管基于机器学习的方法取得了巨大成功，但关于其为何成功或何时可能失败的严谨理论基础仍然缺失。因此，需要新的理论，或许还需要新的数学工具，以分析物理和数据驱动算法的局限性及其能力。

（ii）对于 Mori-Zwanzig方法而言，如何高效且准确地构建核以及公式中的其他项，这一问题仍有待解决。

（iii）通过非线性动力系统稀疏辨识发现控制方程，仍有许多障碍需要克服。例如，必须解决 [120]正确选择测量坐标和动力学稀疏函数基的问题。这个问题没有简单的解决方案 [120] ，因此需要协调各方力量，将专家知识、特征提取和其他先进方法结合起来。

(iv) 由于所述的许多方法，包括符号回归和基于机器学习的算法，都涉及随机优化算法的使用，因此一个重要的问题是：当采用优化方法时，是否可能实现零训练损失或极小的训练损失？其他需要严格分析的误差还包括偏微分方程近似求解过程中产生的误差，以及一个经常被提出的问题，即训练误差越小是否意味着预测越准确？

（v）许多多物理场和多尺度复杂现象发生在具有复杂几何结构的系统中，必须将其纳入

算法，而所需的计算时间使这项任务并不容易。尽管已有一些工作试图解决此类问题 [185-188], ，但仍有许多方面有待探索。

(vi) 即使明确需要综合两种或更多方法，例如将机器学习算法与密集数值模拟相结合，也需要掌握诸如优化理论和偏微分方程理论等知识。此外，人们始终迫切需要更快速的数值模拟与分析。这些科学分支的结合正在开辟新的研究领域。

此外，每一种新方法或算法都需要基准测试来检验其准确性和效率。在处理复杂现象和系统的大量数据时，这些基准测试必须能够对算法进行有意义的评估。选择此类基准测试并非易事，需要仔细斟酌；同样，如何选择数据公开发布的方式，使更多潜在用户能够访问，也需要慎重考虑。

谈到推动此类算法得到更广泛的应用，我们回想一下，传统计算平台之所以受欢迎，一个原因在于它们易于使用，例如用于模拟流体流动和输运过程的 OpenFOAM [189]，以及通过有限元法求解微分方程的 FEniCS [190] 。因此，例如在物理学与数据驱动算法或符号回归方法的应用领域，要使这些方法成为研发中的“日常工具”，它们也必须易于使用，并提供可视化工具，以便跟踪变量随空间和时间的演变。

致谢

过去几年里，我从与许多同事进行的富有启发性的讨论和卓有成效的合作中获益良多；他们曾与我一同研究本文观点文章中所述的一些问题。我尤其感谢 Felipe de Barros、Jinwoo Im、Serveh Kamrava、Joachim Peinke、Reza Rahimi Tabar、Pejman Tahmasebi 和 Sami Masri。

[1] J.H. Seinfeld 和 S.N. Pandis，《大气化学与物理》(Wiley，纽约，1998年)。[2] D. Simpson，欧洲光化学氧化剂的长期模拟：1985年7月的模型计算，《大气环境》**26**，1609（1992年）。[3] A. Heidarinasab、B. Dabir 和 M. Sahimi，大气中输运与光化学反应的基于多分辨率小波的模拟，《大气环境》**38**，6381（2004年）。[4] P. Tahmasebi、S. Kamrava、T. Bai 和 M. Sahimi，地学与环境科学中的机器学习：从小尺度到大尺度，《Advances in Water Resources》**142**，103619（2020年）。[5] G.E. Karniadakis、I.G. Kevrekidis、L. Lu、P. Perdikaris、S. Wang 和 L. Yang，物理信息机器学习，《自然·物理评论》**3**，422（2021年）。

[6] M. Reichstein、G. Camps-Valls、B. Stevens、M. Jung、J.Denzler、N.Carvalhais 和 Mr Prabhat，《自然》，《数据驱动的地球系统科学中的深度学习与过程理解》**566**，195（2019年）。

[7] S. Kamrava、P. Tahmasebi 和 M. Sahimi，《模拟复杂多孔材料中的流体流动：将控制方程与深层机器相结合》，《NPJ计算材料学》**7**，127（2021年）。

[8] M. Alber、A.B. Tepole、W.R. Cannon、S. De、S. Dura-Bernal、K. Garikipati、G. Karniadakis、W.W. Lytton、P. Perdikaris、L. Petzold和E. Kuhl，《整合机器学习与多尺度建模——生物科学、生物医学科学和行为科学中的观点、挑战与机遇》，《NPJ数字医学》**2**，1（2019年）。[9] M. Sahimi，《多孔介质与裂隙岩石中的流动与输运》，第2版（Wiley-VCH，魏因海姆，2011年）。[10] M. Sahimi和S.E. Tajer，岩石体密度、弹性模量和地震波速度的自仿射分布，《物理评论E》**71**，046301（2005年）。

[11] Z. Zhang 和 J.C. Moore，《气候变化的数学与物理基础》（Elsevier，阿姆斯特丹，2015年），第9章。[12] G. Cressman，一种业务化客观分析系统，《月刊天气评论》**87**，367（1959年）。[13] R.E. Kalman，线性滤波与预测问题的新方法，《美国机械工程师学会汇刊·《基础工程学杂志》》**87**，35（1960年）。[14] G. Evensen，在多层准地转海洋模型中使用扩展卡尔曼滤波器，《地球物理研究杂志》**97**，17905（1992年）。[15] G. Evensen，使用非线性准地转模型进行序贯资料同化，并采用蒙特卡罗方法预报误差统计，《地球物理研究杂志》**99**，10143（1994年）。[16] P.L. Houtekamer 和 H.L. Mitchell，使用集合卡尔曼滤波技术进行数据同化，《月刊天气评论》**126**，796（1998年）。[17] P.L. Houtekamer 和 H.L. Mitchell，集合卡尔曼滤波，《皇家气象学会季刊》**131**，3269（2005年）。[18] H. Li、S.J. Qin、T.T. Tsotsis 和 M. Sahimi，垃圾填埋场中气体生成与输运的计算机模拟。VI. 使用集合卡尔曼滤波器动态更新模型，《化学工程科学》**74**，69（2012年）。[19] H. Li、T.T. Tsotsis、M. Sahimi 和 S.J. Qin，基于系综和基于遗传算法的填埋气生产优化，《美国化学工程师学会期刊》**60**，2063（2014年）。[20] 例如，参见 C.M. Bishop，《神经网络及其应用》，《科学仪器评论》**65**，1803（1994年）[21] S. Torquato，《随机非均质材料》（Springer，纽约，2002年）。[22] M. Sahimi，《非均质材料》，第I卷和第II卷（Springer，纽约，2003年）。

[23] S. Kamrava、P. Tahmasebi 和 M. Sahimi，通过深度学习将多孔介质的形态与其宏观渗透率关联起来，《Transport in Porous Media》**131**，427（2020年）。[24] S. Kamrava、J. Im、F.P.J. de Barros 和 M. Sahimi，利用深度卷积神经网络估算非均质多孔介质中流动的弥散系数，《Geophysical Research Letters》**48**，e2021GL094443（2021年）。[25] H. Wu、W.Z. Fang、Q. Kang、W.Q. Tao 和 R. Qiao，通过深度学习从图像预测多孔介质的有效扩散率，《Scientific Reports》**9**，20387（2019年）。[26] N. Alqahtani、F. Alzubaidi、R.T. Armstrong、P. Swietojanski 和 P. Mostaghimi，利用机器学习从二维X射线图像预测多孔介质的性质，《Journal of Petroleum Science and Engineering》**184**，106514（2020年）。[27] K.M. Graczyk 和 M. Matyka，通过深度学习从图像预测多孔介质的孔隙率、渗透率和曲折度，《Scientific Reports》**10**，21488（2020年）。[28] L. Zhou、L. Shi 和 Y. Zha，利用卷积神经网络从水力传导率场观察宏观弥散度，《Advances in Water Resources》**138**，103545（2020年）。[29] S. Kamrava、P. Tahmasebi 和 M. Sahimi，利用随机与深度学习混合算法增强页岩地层图像，《Neural Networks》**118**，310（2019年）。[30] S. Kamrava、P. Tahmasebi 和 M. Sahimi，利用深度学习对复杂多孔膜和材料中的流体流动与输运进行基于物理学和图像的预测，《Journal of Membrane Science》**622**，119050（2021年）。[31] S. Ioffe 和 C. Szegedy，批归一化：通过减少内部协变量偏移加速深度网络训练，arXiv:1502.03167V3（2015年）。[32] S. Kullback 和 R.A. Leibler，论信息与充分性，《Annals of Mathematical Statistics》**22**，79（1951年）。[33] H. Andre¨a、N. Combaret、J. Dvorkin、E. Glatt、J. Han、M. Kabel、Y. Keehm、F. Krzikalla、M. Lee、C. Madonna、M. Marsh、T. Mukerji、E.H. Saenger、R. Sain、

N. Saxena、S. Ricker、A. Wiegmann 和 X. Zhan，数字岩石物理基准——第一部分：成像与分割，《计算地球科学》**50**，25（2013年）。

[34] G. Kissas、Y. Yang、E. Hwuang、W.R. Witschey、J.A. Detre 和 P. Perdikaris，利用机器学习对心血管流动进行建模：基于物理约束神经网络，使用非侵入式四维流动磁共振成像数据预测动脉血压，《计算方法与应用力学和工程》**358**，112623（2020年）

[35] X. Glorot 和 Y. Bengio，理解深度前馈神经网络训练的难点，载于：第十三届人工智能与统计国际会议论文集，AISTATS 2010，基亚拉古纳度假村，撒丁岛，意大利（2010年5月），249-256。

[36] Y. Zhu、N. Zabaras、P.S. Koutsourelakis 和 P. Perdikaris，无需标注数据的高维代理建模与不确定性量化的物理约束深度学习，《计算物理学杂志》**394**，56（2019年）。

[37] N. Geneva 和 N. Zabaras，利用融入物理约束的深度自回归网络对偏微分方程系统的动力学进行建模，《计算物理学杂志》**403**，109056（2020年）。

[38] J.L. Wu、K. Kashinath、A. Albert、D. Chirila、Prabhat 和 H. Xiao，利用生成对抗网络中的统计约束对混沌动力学系统进行建模，《计算物理学杂志》**406**，109209（2020年）。

[39] A. Kashefi、D. Rempe 和 L.J. Guibas，一种用于预测不规则几何形状上流场的点云深度学习框架，Phys. Fluids **33**，027104（2021年）。

[40] Y. LeCun 和 Y. Bengio，用于图像、语音和时间序列的卷积网络，载于《脑理论与神经网络手册》，M.A. Arbib 编（麻省理工学院出版社，剑桥，（1995年）。

[41] J. Winkens、J. Linmans、B.S. Veeling、T.S. Cohen 和 M. Welling，使用旋转等变卷积网络改进组织病理学中的语义分割，载于第一届深度学习医学成像会议论文集（*MIDL 2018*），阿姆斯特丹，荷兰（2008年）。

[42] T. Cohen、M. Weiler、B. Kicanaoglu 和 M. Welling，规范等变卷积网络与二十面体卷积神经网络，载于第*36*届国际机器学习会议论文集，长滩，加利福尼亚州，**97**，1321（2019年）。[43] H. Owhadi 和 G.R. Yoo，核流：从利用数据学习核到深渊，《计算物理学杂志》**389**，22（2019年）。[44] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G.E. Karniadakis，针对时变非线性偏微分方程的数值高斯过程，《SIAM科学计算杂志》**40**，A172（2018年）。[45] B. Hamzi 和 H. Owhadi，从数据学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第一部分：参数化核流，物理学D **421**，132817（2021年）。[46] S. Wang、X. Yu 和 P. Perdikaris，PINN何时以及为何训练失败：神经切线核视角，《计算物理学杂志》**449**，110768（2022年）。[47] S. Wang、H. Wang 和 P. Perdikaris，关于傅里叶特征网络的特征向量偏差：从回归到使用物理信息神经网络求解多尺度偏微分方程，《计算方法与应用力学和工程》**384**，113938（2021年）。[48] H. Owhadi，理念是否具有形状？柏拉图理念论作为人工神经网络的连续极限，https://arxiv.org/abs/2008.03920（2020年）。[49] J. Zhou、G. Cui、S. Hu、Z. Zhang、C. Yang、Z. Liu、L. Wang、C. Li 和 M. Sun，图神经网络：方法与应用综述，AI Open **1**，57（2020年）。[50] A. Mathews、M. Francisquez、J. Hughes 和 D. Hatch，通过深度学习从部分观测中揭示边缘等离子体动力学，《物理评论E》**104**，025205（2021年）。[51] D. Pfau、J.S. Spencer、A.G. Matthews 和 W.M.C. Foulkes，使用深度神经网络从头算求解多电子薛定谔方程，《物理评论研究》**2**，033429（2020年）。

[52] G.P. Pun, R. Batra, R. Ramprasad, and Y. Mishin, 《用于材料原子尺度建模的物理信息人工神经网络》, 《自然·通讯》**10**, 2339（2019年）。[53] D. Li, K. Xu, J.M. Harris, and E. Darve, 《利用侵入式自动微分解决地下流动问题的时移全波形联合反演》, 《水资源研究》**56**, e2019WR027032（2020年）。[54] W. Zhu, K. Xu, E. Darve, and G.C. Beroza, 《一种基于自动微分的地震反演通用方法》, 《计算机与地球科学》**151**, 104751（2021年）。[55] J. Behler and M. Parrinello, 《高维势能面的广义神经网络表示》, 《物理评论快报》**98**, 146401（2007年）。[56] L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, and E. Weinan, 《深度势分子动力学：兼具量子力学精度的可扩展模型》, 《物理评论快报》**120**, 143001（2018年）。[57] W. Jia, H. Wang, M. Chen, D. Lu, L. Lin, R. Car, E. Weinan, and L. Zhang, 《利用机器学习将具有从头算精度的分子动力学扩展至1亿个原子》, arXiv:2005.00223（2020年）。[58] A. Nakata, J.S. Baker, S.Y. Mujahed, J.T.L. Poulton, S. Arapan, J. Lin, Z. Raza, S. Yadav, L. Truflandier, T. Miyazaki, and D.R. Bowler, 《使用 CONQUEST 代码实现大规模线性标度密度泛函理论》, 《化学物理学杂志》**152**, 164112（2020年）。[59] R. Mantegna and H. E. Stanley, 《经济物理学导论：金融中的相关性与复杂性》（剑桥大学出版社，纽约，2000年）。[60] P. Manshoor, S. Saberi, M. Sahimi, J. Peinke, A.F. Pacheco, and M.R. Rahimi Tabar, 《地震时间序列的类湍流行为》, 《物理评论快报》**102**, 014101（2009年）。[61] P.Ch. Ivanov, L.A. Amaral, A.L. Goldberger, S. Havlin, M.G. Rosenblum, Z.R. Struzik, and H.E. Stanley, 《人体心跳动力学中的多重分形性》, 《自然》（伦敦）**399**, 461（1999年）。

[62] Y. Ashkenazy, P.Ch. Ivanov, S. Havlin, C.-K. Peng, A.L. Goldberger, and H.E. Stanley, 《心跳波动中的幅度相关与符号相关》, 《物理评论快报》**86**, 1900（2001年）。[63] J.D. Hamilton, 《时间序列分析》（普林斯顿大学出版社, 普林斯顿，1994年）。[64] H. Kantz and T. Schreiber, 《非线性时间序列分析》（剑桥大学出版社，伦敦，2003年）。[65] R.H. Stoffer and S. David, 《时间序列分析及其应用》（Springer，柏林，2006年）。[66] R. Friedrich and J. Peinke, 《用福克-普朗克方程描述湍流级联》, 《物理评论快报》**78**，863（1997年）。[67] J. Davoudi and M.R. Rahimi Tabar, 《湍流级联克拉默斯-莫亚尔描述的理论模型》, 《物理评论快报》**82**，1680（1999年）。[68] R. Friedlich, J. Peinke, M. Sahimi, and M.R. Rahimi Tabar, 《以随机方法探究复杂性：从生物系统到湍流》, 《物理报告》**506**，87（2011年）。[69] B.B. Mandelbrot and J.W. van Ness, 《分数布朗运动、分数噪声及其应用》, 《工业与应用数学学会评论》**10**，422（1968年）。[70] G.R. Jafari, S.M. Fazeli, F. Ghasemi, S.M. Vaez Allaei, M.R. Rahimi Tabar, A. Iraji zad, and G. Kavei, 《粗糙表面的随机分析与再生》, 《物理评论快报》**91**，226101（2003年）。[71]F. Ghasemi, M. Sahimi, J. Peinke, and M.R. Rahimi Tabar, 《以漂移和扩散系数分析心率波动的非平稳数据》, 《生物物理学杂志》**32**，117（2006年）。[72] H. Risken, 《福克-普朗克方程》, 第2版（Springer，柏林，1996年）。[73] F. Ghasemi, M. Sahimi, J. Peinke, R. Friedrich, G.R. Jafari, and M.R. Rahimi Tabar, 《非平稳随机过程的马尔可夫分析与克拉默斯-莫亚尔展开

应用于油价波动的过程，《物理评论E》**75**, 060102(R) (2007).[74] J.P. Bouchaud 和 R. Cont，股票市场波动与崩盘的朗之万方法，《Eur. Phys. J. B》**6**, 543 (1998).[75] F. Ghasemi, J. Peinke, M. Sahimi 和 M.R. Rahimi Tabar，随机过程的再生：一种逆方法，《Euro. Phys. J. B》**47**, 411 (2005).[76] R.F. Pawula，用福克-普朗克方程近似线性玻尔兹曼方程，《物理评论》**162**, 186 (1967).[77] M. Anvari, K. Lehnertz, M.R. Rahimi Tabar 和 J. Peinke，复杂时间序列中随机行为的辨析，《Scientific Reports》**6**, 35435 (2016).[78] M.R. Rahimi Tabar，复杂非线性动力系统的分析与基于数据的重构：随机过程方法（Springer，伯尔尼，2019年）。[79] M.T. Giraudo 和 L. Sacerdote，作为神经元活动模型的跳跃扩散过程，《Biosystems》**40**, 75 (1997).[80] R. Sirovich, L. Sacerdote 和 A.E.P. Villa，尖峰神经元简单网络的跳跃扩散模型中的协同行为，《Math. Biosci. Eng.》**11**, 385 (2014).[81] E. Daly 和 A. Porporato，若干跳跃扩散系统的概率动力学，《物理评论E》**73**, 026108 (2006).[82] R. Cont 和 P. Tankov，基于跳跃过程的金融建模（Chapman & Hall，博卡拉顿，2004）。[83] J. Prusseit 和 K. Lehnertz，癫痫脑动力学的随机表征指标，《物理评论快报》**98**, 138103 (2007).[84] K. Lehnertz，癫痫与非线性动力学，《生物物理学杂志》**34**, 253 (2008).

[85] L.R. Gorj˜ao、J. Heysel、K. Lehnertz 和 M.R. Rahimi Tabar，双变量跳跃扩散过程的分析与数据驱动重构，《物理评论E》**100**，062127（2019）[86] F. Nikakhtar、L. Parkavosi、M.R. Rahimi Tabar、M. Sahimi、K. Lehnertz 和 U. Feudel，基于统计矩的随机动力学方程数据驱动重构，《物理评论快报》（即将发表）。[87] M.R. Rahimi Tabar、F. Nikakhtar、L. Parkavosi、A. Akhshi、K. Lehnertz 和 U. Feudel，高维复杂系统中的高阶相互作用揭示：一种数据驱动方法，即将发表。[88] F. Hourdin、T. Mauritsen、A. Gettelman、J.-C. Golaz、V. Balaji、Q. Duan、D. Folini、D. Ji、D. Klocke、Y. Qian、F. Rauser、C. Rio、L. Tomassini、M. Watanabe 和 D. Williamson，气候模型调优的艺术与科学，《美国气象学会公报》**98**，589（2017）[89] S. Scher，迈向数据驱动的天气和气候预报：利用深度学习近似一个简单的大气环流模型，《Geophysical Research Letters》**45**，12（2018）。[90] P.D. Dueben 和 P. Bauer，基于机器学习的全球天气和气候模型面临的挑战与设计选择，《地球科学模型开发》**11**，3999（2018）。[91] D.C. Park，一种采用双线性循环神经网络的时间序列数据预测方案，载于*2010*年国际信息科学与应用会议，韩国首尔（2010），第1页，doi：10.1109/ICISA.2010.5480383。[92] R. Fablet、S. Ouala 和 C. Herzet，用于地球物理动力学识别与预测的双线性残差神经网络，载于第*26*届欧洲信号处理会议（*EUSIPCO*）论文集，意大利罗马（2018），第1477页，doi：10.23919/EUSIPCO.2018.8553492。

[93] K. Pathak、B. Hunt、M. Girvan、Z. Lu 和 E. Ott，基于数据对大型时空混沌系统进行无模型预测：一种储备池计算方法，《物理评论快报》**120**，024102（2018年）。[94] P. Laloyaux、M. Bonavita、M. Dahoui、J. Farnan、S. Healy、E. H´olm 和 S. Lang，迈向无偏的平流层分析，《英国皇家气象学会季刊》**146**，2392（2020年）。[95] S. Rasp、M.S. Pritchard 和 P. Gentine，利用深度学习表示气候模型中的次网格过程，Proc. Natl. Acad. Sci. USA **115**，9684（2018年）。[96] W.D. Collins 等，社区大气模式第三版（CAM3）的构建与大气模拟，《气候杂志》**19**，2144（2006年）。[97] J. Brajard、A. Carrassi、M. Bocquet 和 L. Bertino，结合数据同化与机器学习推断未解析尺度参数化，《伦敦皇家学会哲学汇刊》**379**，20200086（2021年）。[98] L. De Cruz、J. Demaeyer 和 S. Vannitsem，模块化任意阶海洋-大气模式：MAOOAM v1.0，《地球科学模型开发》**9**，2793（2016年）。[99] J. Bongard 和 H. Lipson，非线性动力系统的自动化逆向工程，Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **104**，9943（2007年）。[100] M. Schmidt 和 H. Lipson，从实验数据中提炼自由形式的自然定律，《科学》**324**，81（2009年）。[101] J. Bongard、V. Zykov 和 H. Lipson，通过持续自我建模构建韧性机器，《科学》**314**，1118（2066年）。[102] M. Sahimi 和 P. Tahmasebi，非均质材料和介质的重构、优化与设计：基本原理、计算算法和应用，《物理报告》**939**，1（2021年）。[103] S. Kirkpatrick、C.D. Gelatt, Jr. 和 M.P. Vecchi，通过模拟退火进行优化，《科学》**220**，671（1983年）。

[104] S. Katoch、S. Singh Chauhan 和 V. Kumar，遗传算法综述：过去、现在与未来，Multimed. Tools. Appl. 80，8091（2021年）。[105] S.J. Russell 和 P. Norvig，人工智能：一种现代方法，第2版（Prentice Hall，上萨德尔河，2003年），第111–114页。[106] J. Im、F.P.J. de Barros、S. Masri、M. Sahimi 和 R.M. Ziff，通过随机优化从数据驱动地发现非均质介质中输运的控制方程，《物理评论E》，待出版[107] Y. Gefen、A. Aharony 和 S. Alexander，渗流团簇上的反常扩散，《物理评论快报》50，77（1983年）。[108] D. Stauffer 和 A. Aharony，渗流理论导论，第2版（Taylor and Francis，伦敦，1994年）。[109] M. Sahimi，渗流理论的应用，第2版（Springer，纽约，2023年）。[110] B. O'Shaughnessy 和 I. Procaccia，分形对象上扩散的解析解，《物理评论快报》54，455（1985年）。[111] M. Giona 和 H.E. Roman，随机介质中输运现象的分数阶扩散方程，Physica A 185，87（1992年）。[112] R. Metzler、W.G. Gl¨ockle 和 T.F. Nonnenmacher，反常扩散的分数阶模型方程，Physica A211，13（1994年）。[113] Y. He、S. Burov、R. Metzler 和 E. Barkai，随机时间尺度不变扩散与输运系数，《物理评论快报》101，058101（2008年）。[114] A. Bunde 和 J. Dr¨ager，无序结构中的局域化：自平均假设的失效，《物理评论E》52，53（1995年）。[115] A. Pacheco-Pozo 和 I.M. Sokolov，临界渗流团簇上广义扩散率的普适涨落与遍历性，J. Phys. A 55，345001（2022年）。

[116] K. Garbrecht、M. Aguilo、A. Sanderson、A. Rollett、R.M. Kirby 和 J. Hochhalter, 《用于纹理依赖型本构模型的可解释机器学习及面向拓扑优化的自动代码生成》, Integr. Mater. Manuf. Innov.10, 373 (2021)[117] P.J. Schmid, 《数值和实验数据的动态模态分解》, J. Fluid Mech. 656, 5 (2010).[118] B.O. Koopman, 《希尔伯特空间中的哈密顿系统与变换》, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 17, 315 (1931).[119] M.R. Jovanovi´c、P.J. Schmid 和 J.W. Nichols, 《稀疏性促进动态模态分解》, Phys. Fluids 26, 024103 (2014).[120] S.L. Brunton、J.L. Proctor 和 J.N. Kutz, 《通过非线性动力系统稀疏识别从数据中发现控制方程》, 《美国国家科学院院刊》113, 3932 (2016).[121] F. Takens, 《检测湍流中的奇异吸引子》, Lect. Notes. Math. 898, 366 (1981).[122] H. Ye、R.J. Beamish、S.M. Glaser、S.C. H. Grant、C.-H. Hsieh、L.J. Richards、J.T. Schnute 和 G. Sugihara, 《利用经验动态建模进行无方程机制性生态系统预测》, 《美国国家科学院院刊》112, E1569 (2015).[123] G. Berkooz、P. Holmes 和 J.L. Lumley, 《湍流分析中的本征正交分解》, Annu. Rev. Fluid Mech 25 , 539 (1993).[124] D. Ruelle 和 F. Takens, 《论湍流的本质》, Commun. Math. Phys. 20, 167 (1971).[125] C.P. Jackson, 《各种形状物体绕流中涡脱落起始的有限元研究》, J. Fluid Mech. 182, 23 (1987).[126] Z. Zebib, 《圆柱体绕流黏性流动的稳定性》, J. Eng. Math. 21, 155 (1987).

[127] B.R. Noack、K. Afanasiev、M. Morzynsk、D. Tadmor 和 F. Thiele，《瞬态及后瞬态圆柱尾流的低维模型层级》，J. Fluid Mech. **497**, 335 (2003).[128] T. Colonius 和 K. Taira，《采用零空间方法和多区域远场边界条件的快速浸入边界法》，《计算方法与应用力学和工程》**197**, 2131 (2008).[129] 参见：https://github.com/dynamicslab/pysindy。[130] B.M. de Silva、K. Champion、M. Quade、J.-C. Loiseau、J.N. Kutz 和 S.L. Brunton，《PySINDy：用于从数据中进行非线性动力学稀疏识别的 Python 软件包》，《开放源代码软件杂志》**5**, 2104 (2020).

[131] K. Champion、B. Lusch、J.N. Kutz和S.L. Brunton，数据驱动发现坐标和控制方程，《美国国家科学院院刊》**116**，22445（2019年）。

[132] C. Rackauckas、Y. Ma、J. Martensen、C. Warner、K. Zubov、R. Supekar、D. Skin- ner、A. Ramadhan 和 A. Edelman，面向科学机器学习的通用微分方程，arXiv:2001.04385（2020年）。[133] M. Gelbrecht、N. Boers 和 J. Kurths，混沌系统的神经偏微分方程，《新物理学杂志》**23**，043005（2021年）。[134] M. Kalia、S.L. Brunton、H.G.E. Meijer、C. Brune 和 J.N. Kutz，学习用于数据驱动发现通用的参数依赖型控制方程的正则形自编码器，arXiv:2106.05102（2021年）。[135] M. Sorokina、S. Sygletos 和 S. Turitsyn，非线性光通信系统的稀疏识别：SINO方法，《光学快报》**24**，30433（2016年）。[136] M. Dam、M. Brøns、J.J. Rasmussen、V. Naulin 和 J.S. Hesthaven，基于对流模型模拟数据对捕食者-猎物系统进行稀疏识别，《等离子体物理》**24**，022310（2017年）。

[137] J.-C. Loiseau 和 S.L. Brunton，约束稀疏伽辽金回归，J. Fluid Mech. **838**，42（2018年）。[138]J.-C. Loiseau、B.R. Noack 和 S.L. Brunton，稀疏降阶建模：从基于传感器的动力学到全状态估计，J. Fluid Mech. **844**，459（2018年）。[139] L. Boninsegna、F. N¨uske 和 C. Clementi，随机动力学方程的稀疏学习，《化学物理学杂志》**148**，241723（2018年）。[140] P. Gelβ、S. Klus、J. Eisert 和 C. Sch¨utte，非线性动力系统的多维近似，计算非线性动力学杂志**14**，061006（2019年）。[141] S. Thaler、L. Paehler 和 N.A. Adams，截断误差的稀疏识别，《计算物理学杂志》**397**，108851（2019年）。[142] K. Kaheman、E. Kaiser、B. Strom、J.N. Kutz 和 S.L. Brunton，基于实验数据学习差异模型，arXiv:1909.08574v1（2019年）。[143] J.-C. Loiseau，环形热虹吸管中混沌热对流的数据驱动建模，理论与计算流体动力学**34**，339（2020年）。[144] S. Beetham 和 J. Capecelatro，利用嵌入形式不变性的稀疏回归构建湍流闭合，《物理评论：流体》**5**，084611（2020年）。[145] M. Schmelzer、R.P. Dwight 和 P. Cinnella，利用稀疏符号回归发现代数雷诺应力模型，流动、湍流与燃烧**104**，579（2020年）。[146] B.M. de Silva、D.M. Higdon、S.L. Brunton 和 J.N. Kutz，从数据中发现物理规律：普适定律与差异，人工智能前沿**3**，25（2020年）。[147] J.J. Bramburger 和 J.N. Kutz，用于多尺度物理规律发现和非线性弗洛凯理论的庞加莱映射，物理学D**408**，132479（2020年）。[148] J.L. Callaham、J.-C. Loiseau、G. Rigas 和 S.L. Brunton，利用朗之万回归进行非线性随机建模，伦敦皇家学会会刊A辑**477**，20210092（2021年）。

[149]J.J. Bramburger、J.N. Kutz 和 S.L. Brunton，《周期轨道的数据驱动稳定化》，IEEE Access 9, 43504（2021年）。[150] D.E. Shea、S.L. Brunton 和 J.N. Kutz，SINDy-BVP：用于边值问题的非线性动力学稀疏识别，《物理评论研究》3, 023255（2021年）。[151] S. Beetham、R.O. Fox 和 J. Capecelatro，流体–颗粒耦合流中多相湍流闭合模型的稀疏识别，J. Fluid Mech. 914, A11（2021年）。[152] A.A. Kaptanoglu、K.D. Morgan、C.J. Hansen 和 S.L. Brunton，物理约束

，

磁流体力学的低维模型：基于第一性原理和数据驱动的方法，《物理评论E》104, 015206（2021年）。[153] N. Deng、B.R. Noack、M. Morzy´nski 和 L.R. Pastur，流体弹球瞬态及后瞬态动力学的 Galerkin 力模型，J. Fluid Mech. 918，A4（2021年）。[154] Y. Guan、S.L. Brunton 和 I. Novosselov，混沌电对流的稀疏非线性模型，Roy. Soc. Open Sci. 8，202367（2021年）。[155] J.L. Callaham、S.L. Brunton 和 J.-C. Loiseau，非线性相关性在降阶建模中的作用，J. Fluid Mech. 938，A1（2022年）。[156] J. L. Callaham、G. Rigas、J.-C. Loiseau 和 S.L. Brunton，湍流尾流中对称性破缺的经验平均场模型，Sci. Adv. 8，eabm4786（2022年）。[157] H. Schaeffer 和 S.G. McCalla，通过积分项进行稀疏模型选择，《物理评论E》96，023302（2017年）。[158] D.A. Messenger 和 D.M. Bortz，用于偏微分方程的弱 SINDy，J. Comput. Phys. 443，110525（2021年）。[159] D.R. Gurevich、P.A. Reinbold 和 R.O. Grigoriev，非线性偏微分方程模型的稳健最优稀疏回归，Chaos29，103113（2019年）。[160] P.A. Reinbold、D.R. Gurevich 和 R.O. Grigoriev，利用含噪或不完整数据发现时空动力学模型，《物理评论E》101，010202（2020年）。

[161] P.K.A. Reinbold、L.M. Kageorge、M.F. Schatz 和 R.O. Grigoriev，通过物理约束符号回归从含噪、不完整的高维实验数据中进行稳健学习，《自然·通讯》**12**，3219（2021年）。[162] E.P. Alves 和 F. Fiuza，从全动理学模拟中数据驱动发现降阶等离子体物理模型，《物理评论研究》**4**，033192（2022年）。[163] H. Mori，输运、集体运动与布朗运动，Prog. Theor. Phys.**33**，423（1965）。[164] R. Zwanzig，非线性广义朗之万方程，J. Stat. Phys. **9**，215（1973）。[165] G.F. Mazenko，《非平衡统计力学》（Wiley-VCH，魏因海姆，2006年）。[166] D.J. Evans 和 G. Morriss，《非平衡液体的统计力学》（剑桥大学出版社，剑桥，2008年）。[167] C. Hi´jon、P. Esp˜anol、E. Vanden-Eijnden 和 R. Delgado-Buscalioni，Mori-Zwanzig形式作为实用计算工具，Faraday Discuss. **144**，301（2010年）。[168] A. J. Chorin、O. H. Hald 和 R. Kupferman，不可逆过程的最优预测与 Mori-Zwanzig 表示，Proc. Natl. Acad. Sci. USA **97**，2968（2000年）。[169] S.K.J. Falkena、C. Quinn、J. Sieber、J. Frank 和 H.A. Dijkstra，利用 Mori-Zwanzig形式推导时滞方程气候模型，Proc. R. Soc. A**475**，20190075（2019年）。[170] A. Gouasmi、E.J. Parish 和 K. Duraisamy，利用 Mori-Zwanzig形式先验估计非线性系统降阶模型中的记忆效应，Proc. R. Soc. LOnd. A **473**，20170385（2017年）。[171]Y. Tian、Y.T. Lin、M. Anghel 和 D. Livescu，各向同性湍流中 Mori-Zwanzig 算子的数据驱动学习，Phys. Fluids **33**，125118（2021年）。[172] E.J. Parish 和 K. Duraisamy，利用 Mori-Zwanzig形式为大涡模拟构建非马尔可夫闭合模型，Phys. Rev. Fluids **2**，014604（2017年）。

[173] W. Chu 和 X. Li，利用 Mori-Zwanzig 形式从分子动力学推导涨落热传导模型，Commun. Math. Sci. **17**，539（2019年）。[174] Y.T. Lin、Y. Tian、D. Livescu 和 M. Anghel，Mori-Zwanzig 形式的数据驱动学习：Koopman学习框架的推广，SIAM J. Appl. Dyn. Syst. **20**，101137/21M1401759（2021年）。[175] E.J. Parish 和 K. Duraisamy，基于 Mori-Zwanzig 形式的大涡模拟动态亚格子尺度模型，《计算物理学杂志》**349**，154（2017年）。[176] S. Maeyama 和 T.-H. Watanabe，利用Mori-Zwanzig投影算子方法提取并建模小尺度涨落对大尺度涨落的影响，J. Phys. Soc. Jpn. **89**，024401（2020年）。[177] J. Li 和 P. Stinis，用于不确定性量化的 Mori-Zwanzig 约化模型，J. Comput. Dyn. **6**，39（2019年）。[178] P. Stinis，欧拉方程的高阶 Mori-Zwanzig 模型，Multiscale Modeling Simul. **6**，10.1137/06066504X（2007年）。[179] T. Qin、K. Wu 和 D. Xiu，利用深度神经网络进行数据驱动的控制方程近似，《计算物理学杂志》**395**，620（2019年）。[180] D.M. DiPietro、S. Xiong 和 B. Zhu，稀疏辛积分神经网络，载于神经信息处理系统进展 *33*（NeurIPS 2020），H. Larochelle、M. Ranzato、R. Hadsell、M.F. Balcan 和 H. Lin 编，第34届神经信息处理系统大会，温哥华，加拿大（2020年）。[181] L. Lu、P. Jin 和 G.E. Karniadakis，基于算子普适逼近定理通过 DeepONet 学习非线性算子，Nat. Machine Intel. **3**，218（2021年）。[182] B. Reyes、A.A. Howard、P. Perdikaris 和 A.M. Tartakovsky，学习非牛顿流体的未知物理规律，Phys. Rev. Fluids **6**，073301（2021年）。

[183] S. Cai、Z. Wang、L. Lu、T.A. Zaki 和 G.E. Karniadakis，DeepM&Mnet：基于神经网络算子近似推断电对流多物理场，J. Comput. Phys. **436**，110296（2020年）。

[184] Z. Mao、L. Lu、O. Marxen、T.A. Zaki 和 G.E. Karniadakis，《用于高超声速问题的 DeepM&Mnet：利用算子神经网络近似预测正激波后的耦合流动与有限速率化学反应》，《计算物理学杂志》**447**，110698（2021年）

[185] Y. Shin、J. Darbon 和 G.E. Karniadakis，《物理信息神经网络对线性二阶椭圆型和抛物型偏微分方程的收敛性》，Commun. Comput. Phys. **28**，2042（2020年）。

[186] S. Mishra 和 R. Molinaro，《关于物理信息神经网络（PINN）近似偏微分方程的泛化误差估计》，IMA J. Numer. 分析**42**，981（2022年）。

[187] S. Mishra和R. Molinaro，物理信息神经网络（物理信息神经网络）逼近偏微分方程的泛化误差估计 II：一类逆问题，arXiv:2007.01138v2（2021年）

[188] Y.Shin、Z. Zhang 和 G.E. Karniadakis，《使用神经网络求解线性偏微分方程的残差最小化误差估计》，arXiv:2010.08019（2020年）。

[189] H. Jasak、A. Jemcov 和 Z. Tukovi´c，《OpenFOAM：用于复杂物理模拟的 C $^{++}$ 函数库》，International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics IUC，克罗地亚杜布罗夫尼克（2007年9月）。

[190] M. Alnæs、J. Blechta、J. Hake、A. Johansson、B. Kehlet、A. Logg、C. Richardson、J. Ring、M.E. Rohnes 和 G.N. Wells，《FEniCS 项目 1.5 版》，Arch. Numer. Softw. **3**，9（2015年）。

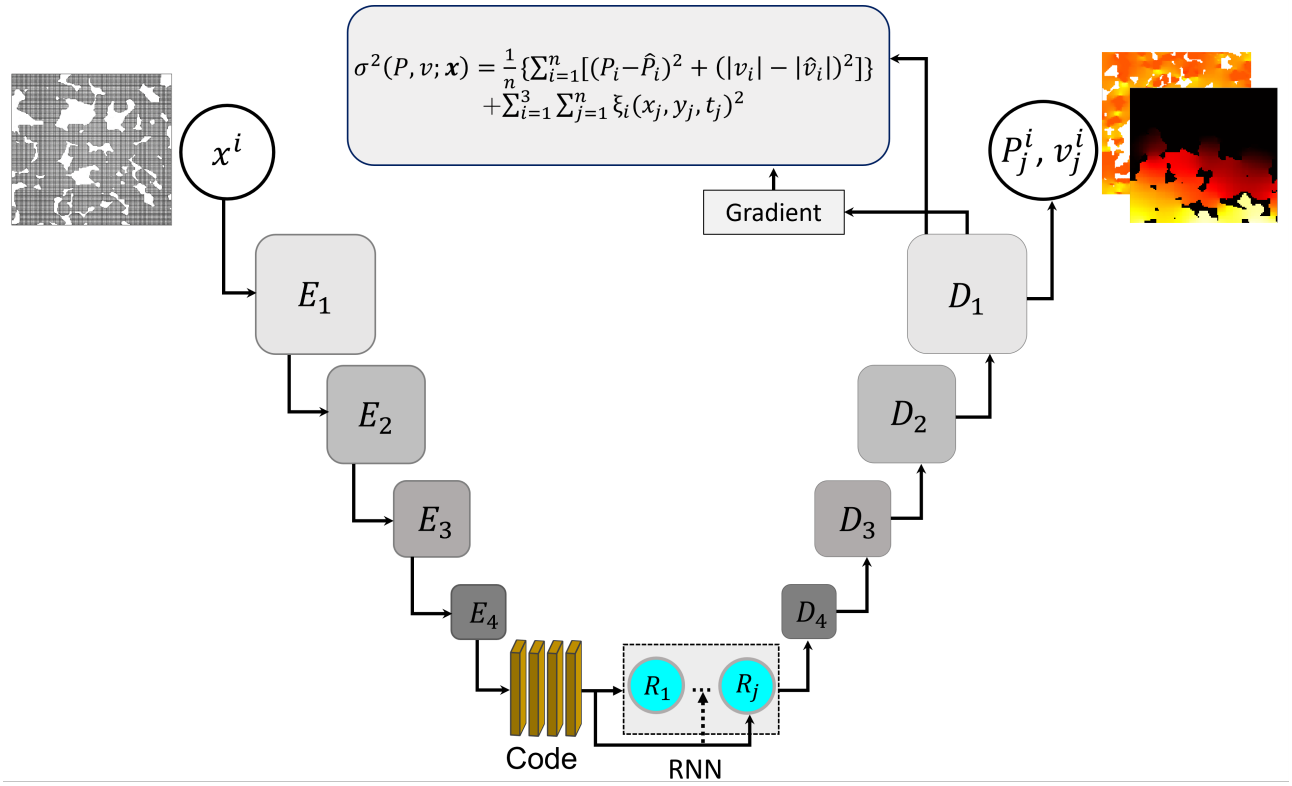

图1：PIRED 网络的架构，其中 E_i 和 D_i 表示编码器和解码器模块； σ^2 为代价函数， x^i 为输入，压力 P^j 和流体速度$|v|^j$ 为输出 [7]。

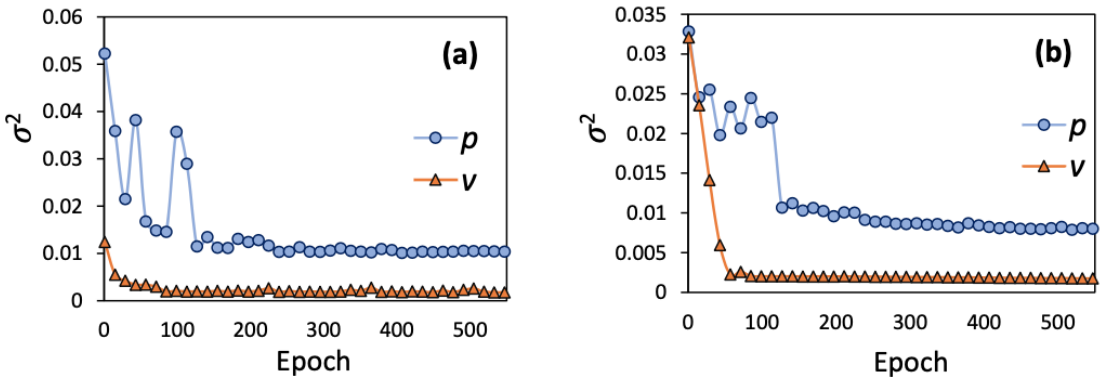

图2：PIRED 的计算效率和准确性。压力 p 和流体速度 v的（a）训练和（b）测试数据的成本 σ^2 比较。

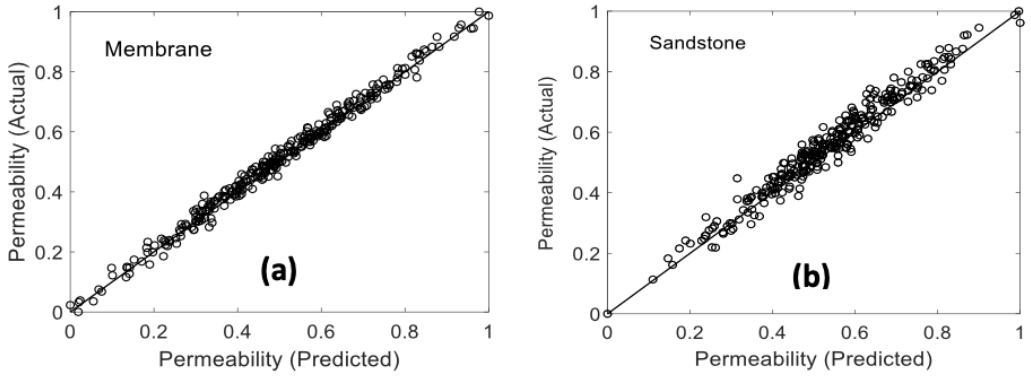

图 3：膜的 300 张二维图像的实际渗透率 K 与 PIRED 网络的预测值对比，以及（b）枫丹白露砂岩的 100 张图像的对比。K 根据（$K - K_{\min}$）/（$K_{\max} - K_{\min}$） [7]进行归一化。

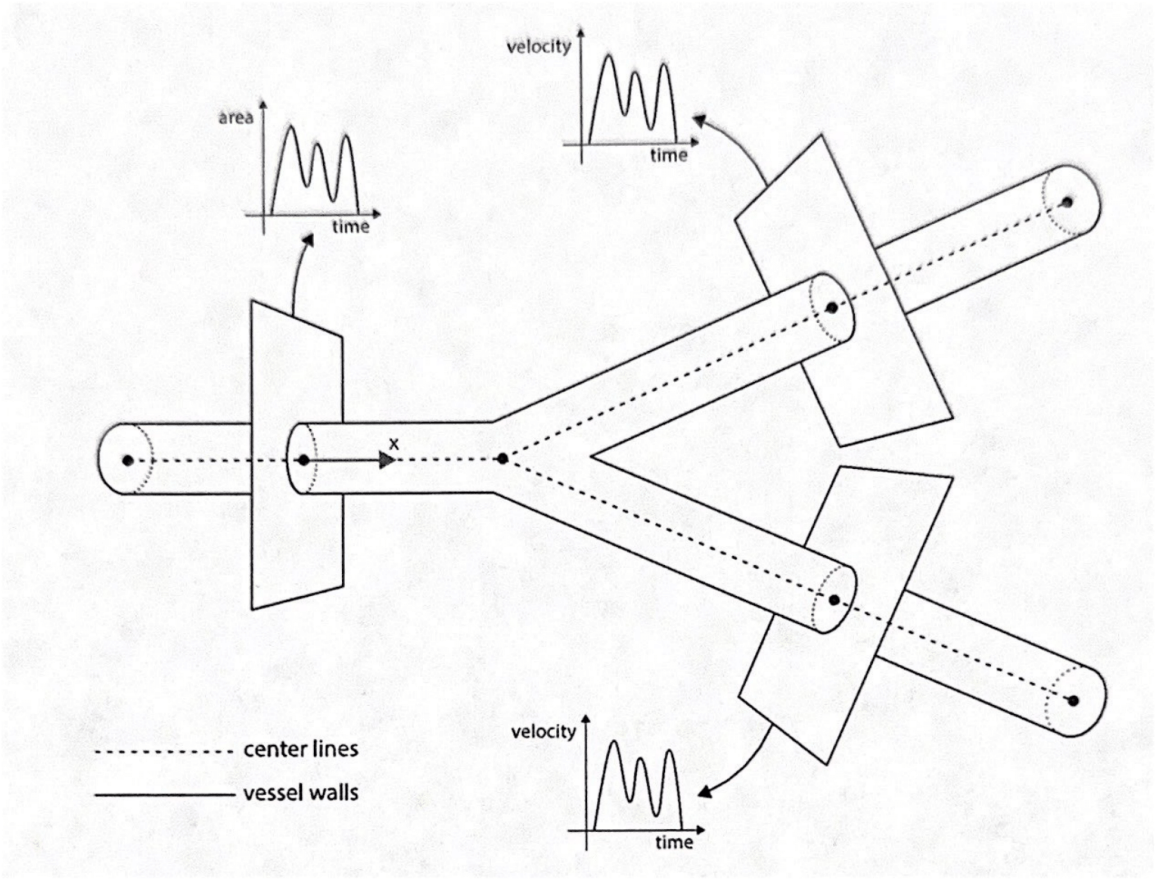

图 4: Y–形分叉动脉系统及其用于降阶模型的 1D 中心线示意图 [25]。

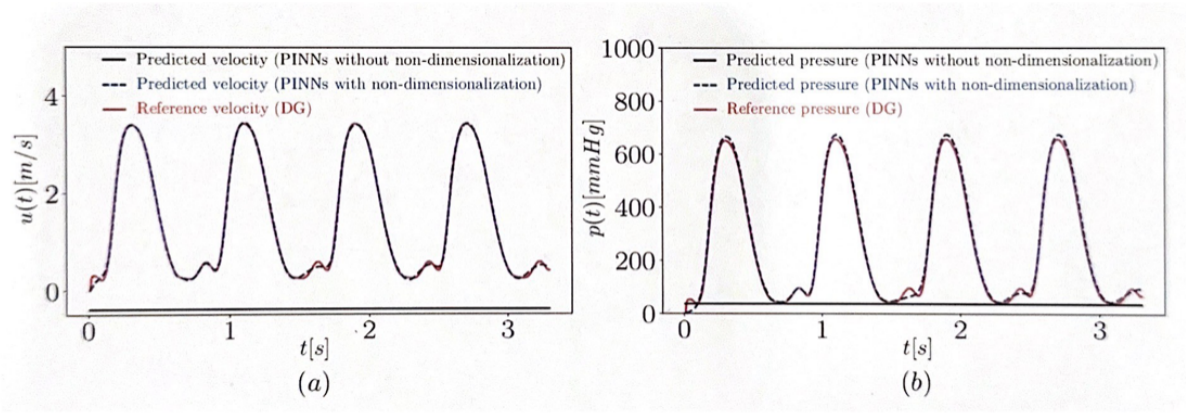

图5：流经 Y–形分叉的流动。(a) 比较采用间断 Galerkin（DG，红色）方法计算得到的速度，$u(t) = v_x(t)$波与 PINN 在有（蓝色）和无（黑色）无量纲化情况下的预测结果，比较位置为图 4]中左侧通道的中点 1 [。(b) 与(a)相同，但比较的是压力波 [25]。

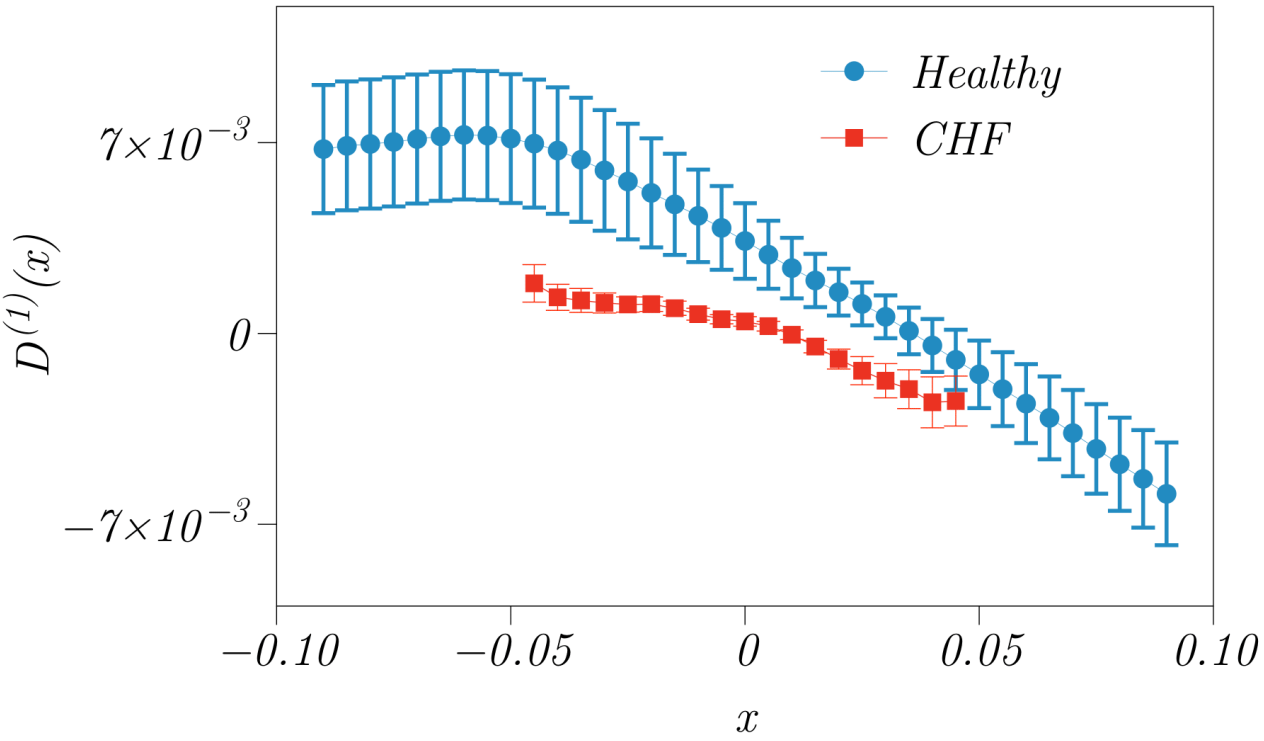

图6：两类患者（健康患者和充血性心力衰竭（CHF）患者）的漂移系数 $D^{(1)}(x)$。

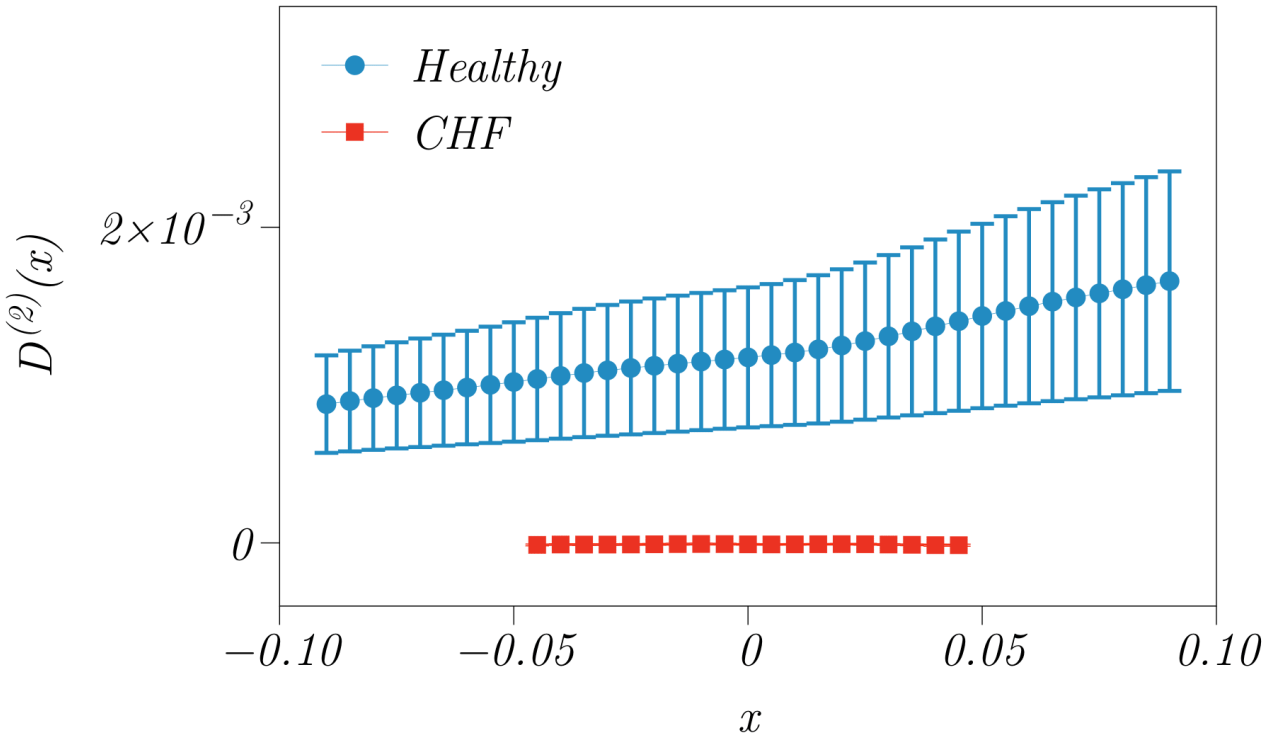

图 7：两类患者——健康患者和充血性心力衰竭（CHF）患者的扩散系数 $D^{(2)}(x)$。

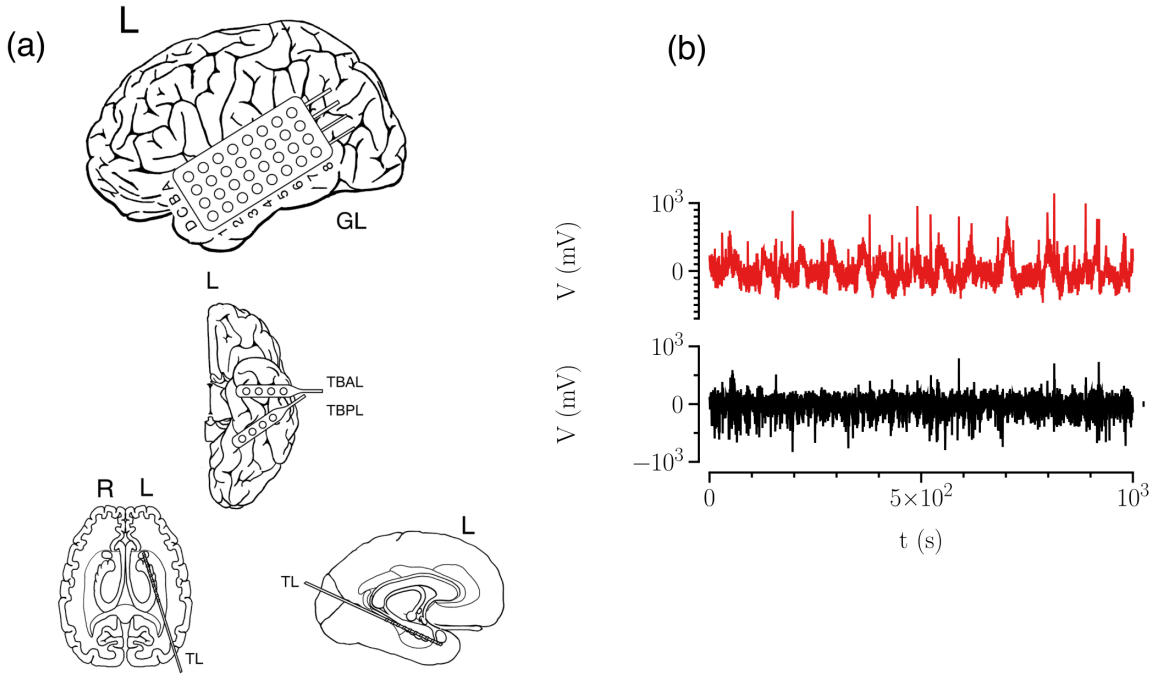

图 8: （a）一名癫痫发作起源于左侧内侧颞叶的患者颅内电极植入示意图：颞外侧网格电极（8 个触点，记为 GL）、两根颞底条状电极（每根 4 个触点，记为 TB）以及一根海马深部电极（10 个触点，记为 TL）。最前方的触点（TL1）位于杏仁核腹侧，最后方的触点（TL10）位于海马内。后者电极采样癫痫灶信号。（b）无癫痫发作间期内记录的颅内脑电时间序列片段，分别来自癫痫灶（红色；触点 TL4）和远处脑区（黑色；触点 GLC6） [77]。

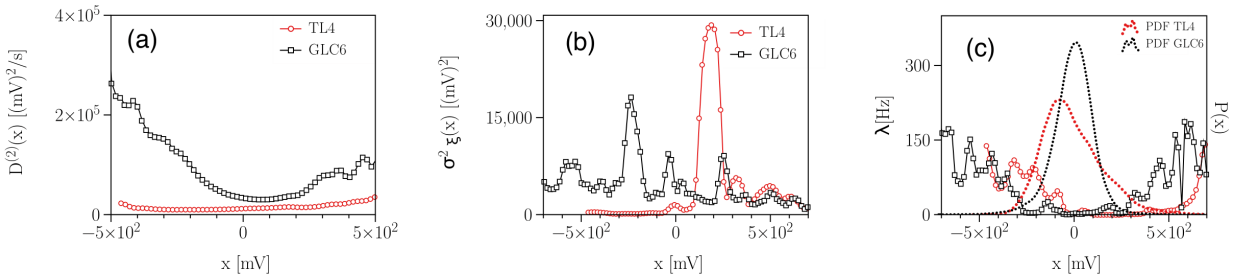

图9：基于一名癫痫患者数据计算得到的示例结果。该患者的癫痫灶位于左侧内侧颞叶，结果显示：(a) 扩散系数；(b) 跳跃幅度；(c) 跳跃率，以及根据无癫痫发作间期内记录的归一化颅内脑电时间序列估算的相应概率分布函数。数据来自癫痫灶内（红色，图8中的接触点TL4）和远处脑区（黑色，图8所示的接触点GLC6） [77]。

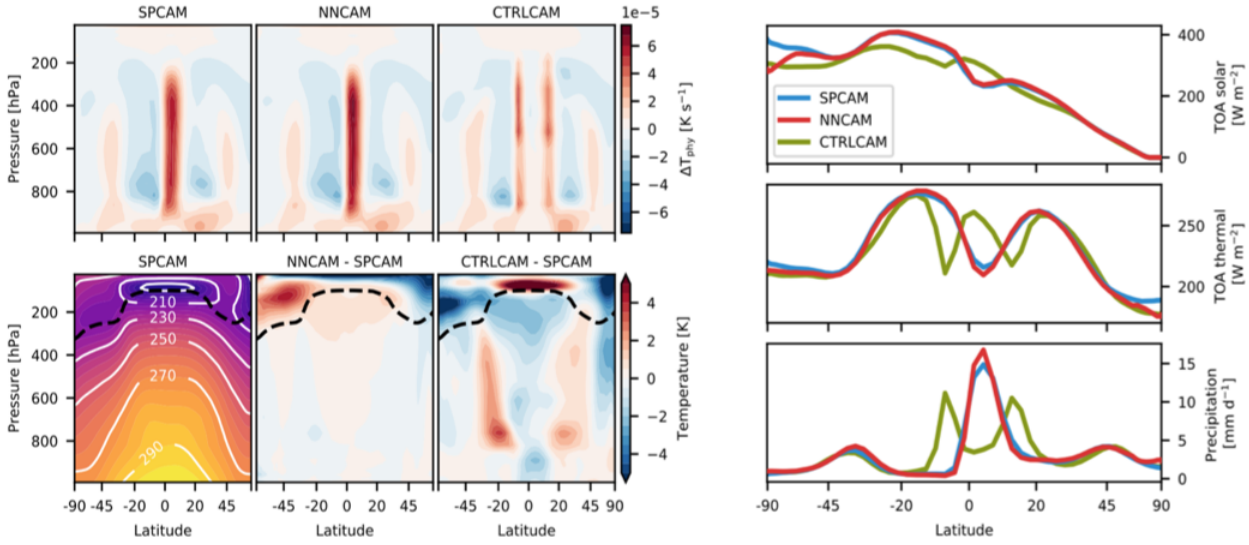

图10：纵向平均值和五年时间平均值。(A) 平均对流和辐射次网格加热率 ΔT_{phy}。(B) SPCAM的平均温度 T，以及NNCAM和CTRLCAM相对于SPCAM的偏置。黑色虚线表示对流层顶的大致位置。(C) 大气层顶的平均短波（太阳辐射）和长波（热辐射）净通量以及降水。纬度轴按面积加权 [95]。

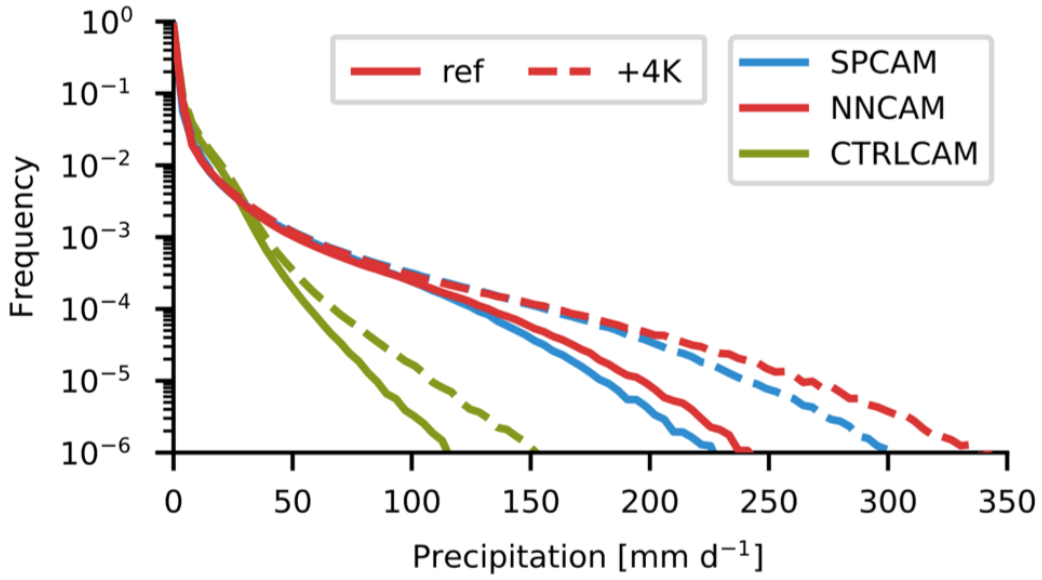

图 11：时间步长（30 min）累积降水直方图。组距为 3.9 mm·d^{-1}。实线表示参考海表温度（SST）下的模拟。虚线表示升温 $+4$ K 后的模拟（参见原始 Rreference [95]）。 $+4$ K 情况下的神经网络为 NNCAM-ref $+$ 4 K [95]。

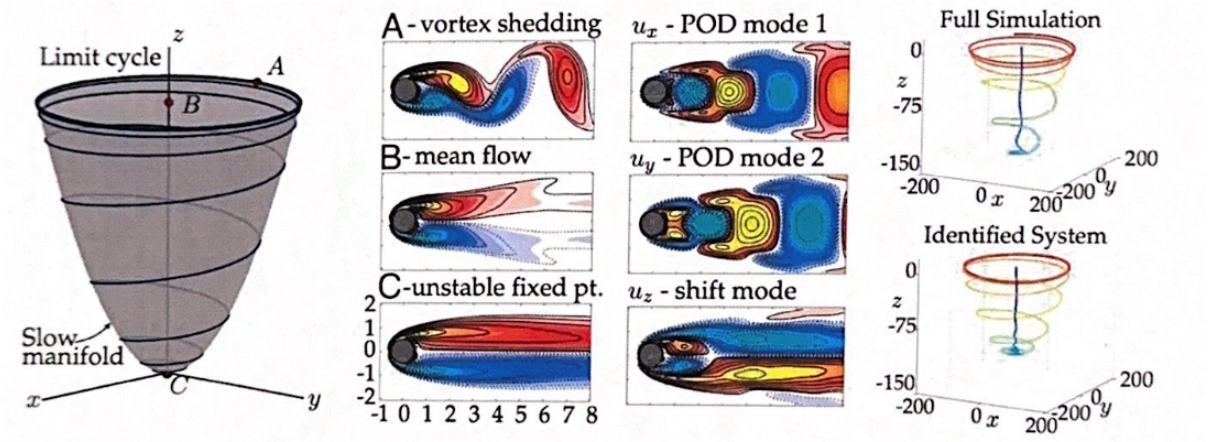

图12：圆柱绕流中的涡脱落是霍普夫分岔的结果。由于纳维–斯托克斯方程具有二次非线性，因此必须采用具有时间尺度分离特征的平均场模型，其中快速的平均场变形从属于缓慢的涡脱落动力学。图中展示了抛物型慢流形（左），以及不稳定定点（C）、平均流（B）和涡脱落（A）。通过使用本征正交分解（POD）基和位移模态，降低了问题的维度（中右）。所识别的动力学与POD坐标中的真实轨迹高度吻合，并捕捉了与平均场模型相关的二次非线性和时间尺度 [120]。

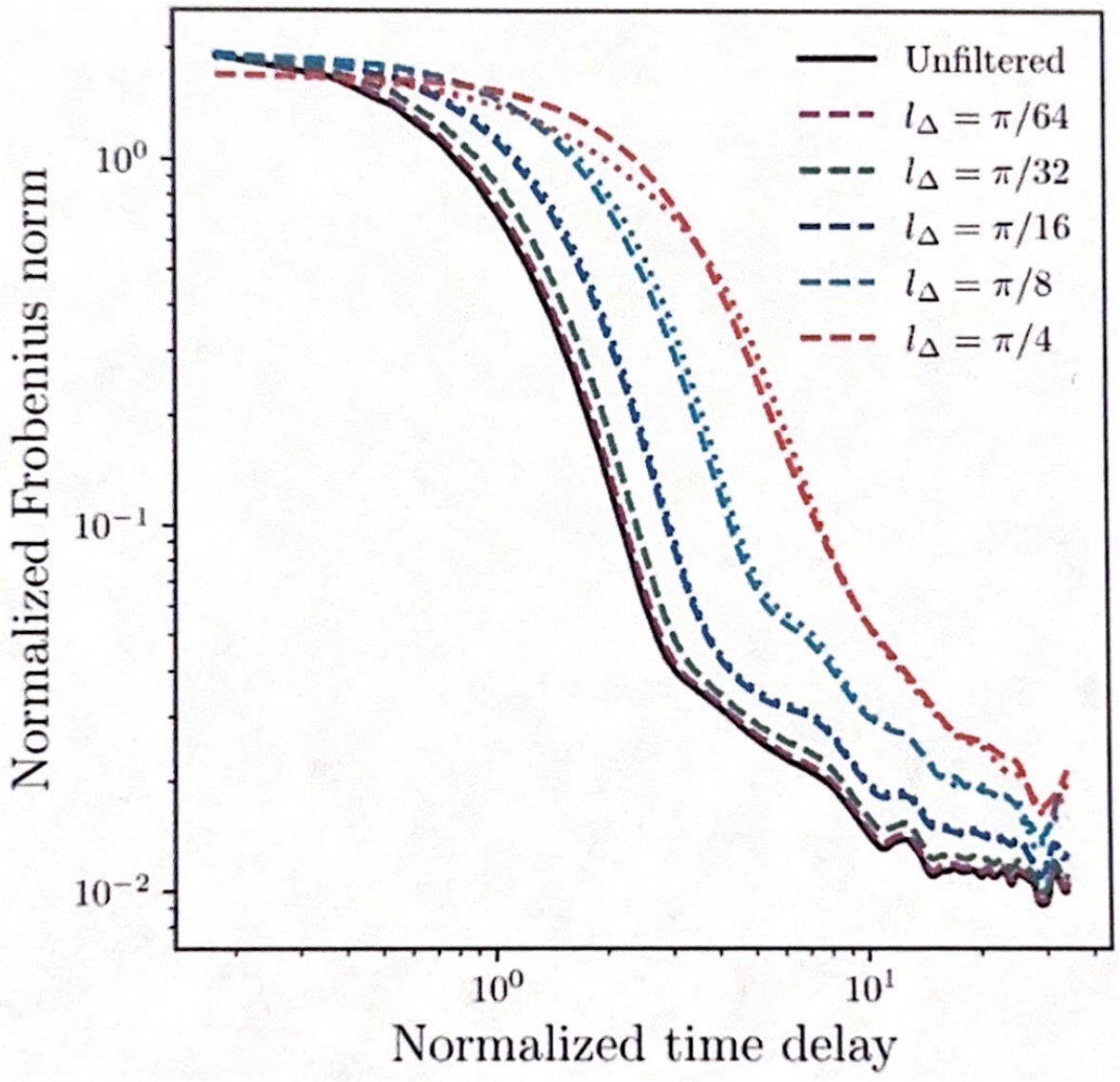

图13：可观测量集合所学记忆核的归一化弗罗贝尼乌斯范数随归一化时间延迟的变化。对物理空间变量 [171] 应用了两种空间滤波器（高斯滤波器和盒式滤波器），并采用了不同的滤波长度尺度。