arXiv:2602.11097v1 [cs.LG] 11 Feb 2026

物理信息神经网络的统计学习分析

David Barajas-Solano[a,*]

[a]太平洋西北国家实验室，美国华盛顿州里奇兰，*99352*，

摘要

我们从统计学习的角度，研究物理信息神经网络（PINN）在初边值问题（IBVP）中的物理信息学习训练过程与性能。具体而言，我们将讨论范围限定于采用硬性初始和边界条件约束的参数化，并将估计PINN参数的问题重新表述为统计学习问题。从这一视角来看，针对初边值问题残差的物理惩罚项，不应被理解为正则化项，而应被理解为间接数据的无限来源；学习过程则是通过最小化真实分布与PINN分布之间的Kullback–Leibler散度，使残差的PINN分布 $p(y \mid x,\ t,\ w)q(x,\ t)$ 逼近真实数据生成分布 $\delta(0)q(x,\ t)$。此外，分析表明，使用PINN进行物理信息学习属于奇异学习问题；我们运用奇异学习理论工具，即所谓的局部学习系数 [1]，分析通过随机优化获得的热方程初边值问题的PINN参数估计。最后，我们讨论这一分析对PINN预测不确定性量化及其外推能力的影响。

关键词：物理信息学习、物理信息神经网络、统计学习、奇异学习理论

*通讯作者。电子邮箱：David.Barajas-Solano@pnnl.gov（David Barajas-Solano）

1. 引言

近年来，借助物理信息神经网络（物理信息神经网络）开展的物理信息机器学习（参见 [2] 以获取全面综述）已得到广泛推进，并成功用于计算数学中对初边值问题（初边值问题）之解的近似求解。物理信息学习的核心机制是模型参数识别：通过最小化“物理惩罚项”，对由给定一组模型参数所预测的控制方程以及初始和边界条件残差施加惩罚。尽管将物理信息神经网络用于物理信息学习时所面临的若干重大长期问题（例如频谱偏差）已经得到处理，该方向仍是活跃的研究领域；我们对该问题诸多特征的理解，例如损失景观以及物理信息神经网络模型的外推能力，仍然并不完整。

人们普遍认识到，传统统计工具不足以分析深度学习。渡边提出的“奇异学习理论”（SLT）（综述见 [3] ）指出，这是由于深度学习模型的学习具有奇异性，并旨在解决这些局限。高效的深度学习与贝叶斯推断工具和框架 [4, 5, 6, 7]的发展，使得奇异学习理论得以应用于分析深度学习的实际应用，并由此揭示了关于损失景观、模型泛化能力以及训练过程 [1, 8, 9] 特征的诸多见解。

鉴于基于物理信息神经网络的物理信息学习也因采用神经网络作为骨干架构而具有奇异性，我们在本文中提出使用奇异学习理论分析物理信息神经网络的训练与性能。物理信息学习中的物理惩罚项使奇异学习理论无法直接应用，因此我们首先将注意力限定在具有初始和边界条件硬约束的物理信息神经网络参数化形式上，并据此将物理信息神经网络学习问题重新表述为统计学习问题。采用这一表述后可以看出，物理信息神经网络学习问题等价于一个统计学习问题：通过最小化真实分布与物理信息神经网络分布之间的 Kullback–Leibler 散度，使方程残差的物理信息神经网络分布 $p(y \mid x,\ t,\ w)q(x,\ t)$ 拟合与零残差 $y(x,\ t)$ 对应的真实数据生成分布$\delta(0)q(x,\ t)$，该分布对所有 $(x,\ t) \in \Omega\times(0,\ T]$ 均成立。我们认为，这意味着物理信息学习中的物理惩罚项更适合被理解为无限来源的间接数据（残差可视为间接观测，因为它们是物理信息神经网络预测的函数），而非文献中通常所说的正则化项，因为它们

是物理信息神经网络预测的函数）。此外，我们采用奇异学习理论所称的局部学习系数，研究热方程初边值问题中物理信息神经网络损失的特征。

本文结构如下：第 2 节将物理信息学习问题重新表述为奇异统计学习问题，并对其进行分析。第 3 节讨论局部学习系数的数值近似，并计算其在热方程初边值问题中的取值。最后，第 4 节讨论这项分析的进一步意义。

2. 初边值问题中物理信息学习的统计学习解释

考虑适定的边值问题

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u(x,t),x,t) &= 0 && \forall x \in \Omega, && t \in (0,T], && (1)\\ \mathcal{B}(u(x,t),x,t) &= 0 && \forall x \in \partial\Omega, && t \in [0,T], && (2)\\ u(x,0) &= u_0(x) && \forall x \in \Omega, && && (3) \end{aligned}$$

其中，Ω 表示初边值问题的空间域，$\partial\Omega$ 表示该域的边界，T 表示最大模拟时间，$u(x,t)$ 表示该初边值问题的解。在物理信息神经网络框架中，我们使用过参数化的基于深度学习的模型 $u(x,t,w)$ 来近似解 $u(x,t)$；该模型通常是神经网络模型 $\mathrm{NN}_w(x,t)$，其中 $w \in W$ 表示模型参数，$W \subset \mathbb{R}^d$ 表示参数空间。为简单起见，我们假设模型 $u(x,t,w)$ 的构造方式能够确保对任意模型参数，初始和边界条件都严格满足，即，

$$\begin{gathered} \mathcal{B}(u(x,t,w),x,t) = 0 \quad \forall x \in \partial\Omega,\ t \in (0,T],\ w \in W,\\ u(x,0,w) = u_0(x) \quad \forall x \in \Omega,\ w \in W, \end{gathered}$$

通过硬约束参数化（例如，[10, 11]）。随后，通过最小化控制方程在 n 个“残差评估”点 $\{x_i,t_i\}_{i=1}^n$ 处的残差平方来确定模型参数，也就是说，最小化损失

$$L_n^{\mathrm{PINN}}(w) \coloneqq \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \left[\mathcal{L}(u(x_i,t_i,w),x_i,t_i)\right]^2, \tag{4}$$

在纯物理信息极限下，物理信息神经网络框架旨在不使用解的直接观测来近似该解，也就是说，不使用形式为 $(x_i, t_i, u(x_i, t_i))$ 的带标签数据对，因此许多作者称其为“无监督”学习框架。对物理信息神经网络学习问题的另一种看法是，它实际上使用了带标签数据，但其形式为 $(x_i, t_i, \mathcal{L}(u(x_i, t_i)\ x_i, t_i) \equiv 0)$，因为物理信息神经网络的表述鼓励参数化模型的残差 $\mathcal{L}(u(x, t, w)\ x, t)$ 尽可能接近零。关键在于，这种形式的“残差”数据在某种意义上是“无限”的，因为对于所有 $x \in \Omega$、 $t \in (0, T]$，都可以构造出这样的数据对。事实上，损失 (4) 可以解释为体积与时间平均损失 $L^{\mathrm{PINN}} := \int_{\Omega \times (0, T]} [\mathcal{L}(u(x,t)\ x, t)]^2\, q(x,t)\, \mathrm{d}x\mathrm{d}t$ 的样本近似，其中加权函数为 $q(x, t)$。

由此，我们可以与统计学习理论建立对应关系。具体而言，我们可以在输入上引入密度 $q(x, t)$，以及真实数据生成分布 $q(x, t, y) = \delta(0) q(x, t)$，其中 y 表示方程残差。对于给定的误差模型 $p(y \mid \mathcal{L}(u(x, t, w)\ x, t))$，物理信息神经网络模型会诱导出残差的条件分布 $p(y \mid x, w)$。例如，对于高斯误差模型 $p(y \mid \mathcal{L}(u(x, t, w)\ x, t)) = \mathcal{N}(y \mid 0, \sigma^2)$，残差的条件分布形式为

$$p(y \mid x, t, w) \propto \exp\left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left[\mathcal{L}(u(x, t, w), x, t) \right]^2 \right\}. \tag{5}$$

因此，可以将物理信息神经网络框架理解为：通过最小化训练数据集 $\{(x_i, t_i y_i \equiv 0)\}_{i=1}^n$ 的样本负对数似然 $L_n(w)$，使模型 $p(x, t, y \mid w) := p(y \mid x, t, w) q(x, t)$ 拟合数据生成分布；该训练数据集从 $q(x, t, y)$ 中独立同分布抽取，其中

$$L_n(w) := -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(y_i \equiv 0 \mid x_i, t_i, w). \tag{6}$$

与此负对数似然相对应，我们还有总体负对数似然 $L(w) := -\mathbb{E}_{q(x,t,y)} \log p(y \mid x, t, w)$。注意，对于上文引入的高斯误差模型，有 $L_n^{\mathrm{PINN}}(w) = 2\sigma^2 L_n(w)$（相差一个加性常数），因此，通过最小化 PINN 损失 (4) 和负对数似然 (6) 进行学习是等价的。此外还要注意，如果将体积与时间平均函数设为与输入的数据生成分布相同，则 $L^{\mathrm{PINN}}(w) = 2\sigma^2 L(w)$（相差一个加性常数）， $q(x, t)$。因此，物理信息神经网络训练等价于

最小化真实残差分布与模型残差分布之间的 Kullback–Leibler散度。

这种对物理信息神经网络学习问题的等价重述，使我们能够运用统计学习理论的工具来分析物理信息神经网络的训练。具体而言，我们注意到，由于基于神经网络的前向模型 $\mathrm{NN}_w(x)$ 是一个奇异模型，物理信息神经网络模型 $p(y \mid x,\ t,\ w)$ 也同样是奇异的；也就是说，参数到分布的映射 $w \mapsto p(x,\ t,\ y \mid w)$ 不是一一映射，而且 Fisher信息矩阵 $I(w) := \mathbb{E}_{p(x,t,y|w)} \nabla\nabla_w \log p(x,\ t,\ y \mid w)$ 在 W 中并非处处正定。因此，PINN损失 (4) 并非由一个离散的、测度为零的、可能无限的局部极小值集合所刻画，也不能在局部用二次函数近似。相反，物理信息神经网络损失景观与深度学习损失景观通常的情形一样，以“平坦”极小值为特征；关键在于，即使残差评估点的数量趋于无穷 $n \to \infty$，这一特征依然存在。这一特点使我们能够更好地理解残差数据在物理信息学习中的作用。

也就是说，人们普遍观察到，对于给定的损失容差 ϵ，PINN问题的解 $\arg\min_w L_n^{\mathrm{PINN}}(w)$ 并不唯一，即使残差评估点的数量很多，而且无论采用何种方案生成这些点（均匀分布、拉丁超立方抽样等低差异序列、随机抽样等）都是如此。另一方面，人们也观察到，增加 n 似乎会“正则化”或“平滑”物理信息神经网络损失景观（例如，[12]）。尽管人们可能会将这种观察到的平滑效果理解为类似于显式正则化的正则化作用（例如，ℓ_2 正则化，或对参数采用适当的先验），但实际上，增加 n并不会像显式正则化那样，使损失景观变得更尖锐，并形成局部呈二次形态的局部极小值。因此，在物理信息学习中，残差数据（以及相应的物理惩罚项）不应被视为正则化项，而应仅仅被视为间接数据来源。

由于 PINN 问题的解的估计并非唯一，因此有必要通过损失值以外的其他方式对其进行表征。本文采用基于SLT的LLC度量，旨在表征奇异模型损失景观的“平坦性”。为完整起见，下面重述 LLC 的定义（引入于 [1]）。设 $w^\star$ 表示一个局部极小值，$B(w^\star)$ 表示 $w^\star$ 的一个足够小的邻域，使得 $L(\omega) \geq L(\omega^\star)$；此外，设 $B(w^\star,\ \epsilon) := \{w \in B(w^\star) \mid L(w) - L(w^\star) < \epsilon\}$ 表示 $w^\star$ 的邻域中损失

处于某一容差 ϵ 范围内的子集， $V(\epsilon)$ 表示该子集的体积，即

$$V(\epsilon) \coloneqq \mathrm{vol}(B(w^\star, \epsilon)) = \int_{B(w^\star,\epsilon)} \mathrm{d}w.$$

于是，局部学习系数定义为有理数 $\lambda(w^\star)$，使得体积按 $V(\epsilon) \propto \exp\{\lambda(w^\star)\}$ 的形式缩放。局部学习系数可解释为平坦程度的度量，因为它对应于容差范围 ϵ 内的解的体积随 $\epsilon \to 0$增大而减小的速率；局部学习系数越小，体积损失越慢。

顾名思义，局部学习系数是奇异学习理论（全局）学习系数 λ的局部对应概念；后者出现在奇异统计模型自由能的渐近展开中。具体而言， $\lambda(w^\star) \equiv \lambda$ 当 $w^\star$ 是全局最小值，且 $B(w^\star)$取为整个参数空间 W时。自由能 F_n 定义为

$$F_n \coloneqq -\log \int \exp\{-nL_n(w)\}\varphi(w)\,\mathrm{d}w,$$

其中， $\varphi(w)$是模型参数的先验。根据奇异学习理论，奇异模型的自由能具有渐近展开 [3]

$$F_n = nL_n(w_0) + \lambda \log n + O_P(\log\log n), \quad n \to \infty,$$

其中， w_0 是使真实数据生成分布与估计分布之间的 Kullback-Leibler 散度最小化的参数向量 $p(y \mid x,\ t,\ w)q(x,\ t)$；而对于正则模型，其展开式为

$$F_n = nL_n(\hat{w}) + \frac{d}{2}\log n + O_P(1), \quad n \to \infty,$$

其中，$\hat{}w$ 是模型参数的最大似然估计量，d是模型参数的数量。因此，学习系数可解释为对模型复杂度的度量，因为它是奇异模型中与正则模型的模型复杂度 $d/2$相对应的概念。因此，通过计算物理信息神经网络解的不同估计值附近的局部学习系数，我们可以深入了解物理信息神经网络损失景观。

3. 局部学习系数的数值估计

3.1. 基于马尔可夫链蒙特卡罗的局部学习系数估计量

虽然还存在其他估计局部学习系数的方法（即通过 Imai估计量 [13] 或 Watanabe估计量 [14] 估计实对数典范

阈值），但在本文中，我们选择采用 [1], 中引入的估计框架，简要介绍如下。设 $B_\gamma(w^\star)$表示一个以 $w^\star$为中心、半径为 γ 的小球。我们引入与 $w^\star$ 局部类似的自由能及其渐近展开：

$$\begin{aligned} F_n(B_\gamma(w^\star)) &= -\log \int_{B_\gamma(w^\star)} \exp\{-nL_n(w)\}\varphi(w)\,\mathrm{d}w \\ &= nL_n(w^\star) + \lambda(w^\star)\log n + O_P(\log\log n). \end{aligned} \tag{7}$$

随后，我们将上述积分中对 $B_\gamma(w^\star)$ 的硬性限制替换为以 $w^\star$ 为中心、协方差为 $\gamma^{-1}I_d$ 的较柔和的高斯加权，其中 $\gamma > 0$ 是一个尺度参数。令 $\mathbb{E}_{w|w^\star,\ \beta,\ \gamma}[\cdot]$ 表示关于温度调节分布的期望

$$p(w \mid w^\star, \beta, \gamma) \propto \exp\left\{-n\beta L_n(w) - \frac{\gamma}{2}\|w - w^\star\|_2^2\right\}$$

其逆温度为 $\beta \equiv 1/\log n$；那么，$\mathbb{E}_{w|w^\star,\ \beta,\ \gamma}[nL_n(w)]$ 是该温度调节分布的配分函数的良好估计量。根据选择 γ 的不同，它可以近似局部自由能。将这一近似代入式（7），得到估计量

$$\hat{\lambda}_\gamma(w^\star) \coloneqq n\beta\left[\mathbb{E}_{w|w^\star,\beta,\gamma}[L_n(w)] - L_n(w^\star)\right]. \tag{8}$$

在本研究中，我们通过马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）模拟生成样本 $w \mid w^\star,\ \beta,\ \gamma$，以计算该估计值。具体而言，我们采用 No-U-Turn采样器（NUTS）算法 [4]。此外，为了评估$L_n(w)$，我们从 $q(x,\ t)$ 中随机选取一组固定的 n 个残差评估点，并确保其数量足够大，以便采用渐近展开式（7），且式（8）成立。注意，由于 $w^\star$ 是 $L_n(w)$ 的局部极小值，因此 $\lambda_\gamma(w^\star)$ 严格为正，所以 $\mathbb{E}_{w|w^\star,\ \beta,\ \gamma}[L_n(w)] - L_n(w^\star) \geq 0$。事实上，局部学习系数（LLC）的负估计值意味着 MCMC 链能够访问参数空间中一块具有显著体积的区域，在该区域内 $L_n(w) < L_n(w^\star)$，这表示 $w^\star$ 并非 $L_n(w)$ 的真正局部极小值。鉴于通过随机优化算法最小化 PINN损失并不能保证得到精确的局部极小值，实践中可能会得到局部学习系数（LLC）的负估计值。

3.2. 数值实验

为了分析一个具体案例中的物理信息神经网络损失景观，我们计算并分析以下物理信息学习问题的局部学习系数：我们

考虑热方程初边值问题

$$\begin{aligned} \partial_t u - \partial_{xx} u &= f(x,t) && \forall x \in (0,2),\ t \in (0,2], \\ u(0,t) = u(2,t) &= 0 && \forall t \in (0,2], \\ u(x,0) &= \sin(\pi x) && \forall x \in (0,2), \end{aligned}$$

其中， $f(x,\ t)$的选取使得初边值问题的解为

$$u(x,t) = \exp^{-t} \sin(\pi x).$$

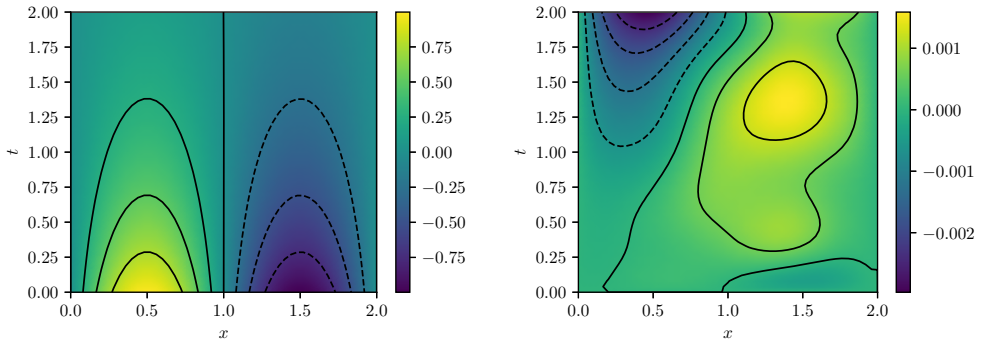
为了精确满足初始和边界条件，我们采用物理信息神经网络模型的硬约束参数化方法

$$u(x,t,w) = \sin(\pi x) + tx(x-1)\mathrm{NN}_w(x,t). \tag{9}$$

神经网络模型 NN_w 采用一个包含两个隐藏层、每层 50 个单元的多层感知机（MLP）。该模型的参数总数为 $d = 20,\ 601$。这个相对较小的模型确保了计算多条马尔可夫链蒙特卡洛链所需的时间是合理的。方程（9）中的模型使用 Flax NNX 库 [6], 实现，马尔可夫链蒙特卡洛采样则使用 BlackJAX 库 [7]执行。

使用 Adam随机优化算法进行 50，000 次迭代，通过最小化方程（4）中的 PINN损失来估计模型参数。每次迭代时，从 $q(x,\ t)$中抽取一批新的残差评估点，并用其计算 PINN损失及其梯度。请注意，这些残差评估点批次不同于用于计算方程（8）中 $L_n(w)$ 的点集；对于给定实验，该点集是固定的。图1显示了使用批量大小为 32、学习率为 1×10^{-4} 时估计得到的 $w^\star$ 的物理信息神经网络解 $u(x,\ t,\ w^\star)$。该解对应的 PINN损失为 1.854×10^{-5}。尽管这个损失很小，但它表明，由于模型类的容量有限，真实的数据生成分布 $\delta(0)q(x,\ t)$无法由具有上述多层感知机架构的模型类（9）表示。

我们针对批量大小为 8、16 和 32，以及 Adam学习率为 $\eta\ 1 \times 10^{-3}$ 和 1×10^{-4}. 的情况计算 LLC估计值。此外，对于所有实验，我们都使用从 $q(x$、 $t)$。 中随机抽取的固定 256 个残差评估点来计算 LLC。为计算 LLC，我们采用残差的高斯似然 (5)。因此，LLC估计值不仅取决于 γ 的选择，也取决于标准差 σ。对于每个实验



(a) 物理信息神经网络解 $u(x,t,w^\star)$

(b) 逐点误差 $u(x,t) - u(x,t,w^\star)$

图1：批量大小为 32、Adam学习率为 1×10^{-4}. 时计算得到的物理信息神经网络解和估计误差

我们生成 2 条马尔可夫链蒙特卡洛链，并为每条链设置一个预热自适应区间作为初始化。

为确定局部学习系数估计器的超参数，我们作出以下观察：首先，这两个超参数都会控制用于估计局部学习系数的局部邻域范围；对于 γ，通过扩张或收缩以 $w^\star$ 为中心的先验来实现；对于 σ，则通过增大或减小局部邻域内 $L_n(w)$ 可取值的范围来实现。其次，鉴于真实数据生成分布不可实现，PINN损失始终不为零。因此，为使物理信息神经网络模型以非零概率解析真实的零残差，我们必须选择大于 PINN 最优残差均值（最优 PINN 损失的平方根）的 σ。

鉴于 $\gamma = 1$ 控制局部邻域的体积，我们取 $\gamma = 1$。对于上述架构，我们发现最优 PINN 损失为 $O(10^{-5})$，因此 σ 必须选择为 3×10^{-3} 或更大。鉴于 σ 也控制局部邻域的体积，我们取保守值 $\sigma = 1$。这个保守选择究竟会高估还是低估 LLC，并不完全明显。本文未展示的数值实验表明，较小的选择 $\sigma = 1 \times 10^{-2}$ 经常导致 LLC估计值为负，因此被弃用。对于 $\sigma = 1 \times 10^{-1}$ 估计的 LLC 值始终略高于 $\sigma = 1$的估计值，这表明，符合物理规律程度更高的物理信息神经网络模型类，其复杂度略高于符合物理规律程度较低的模型类。不过，鉴于 LLC估计值之间的差异

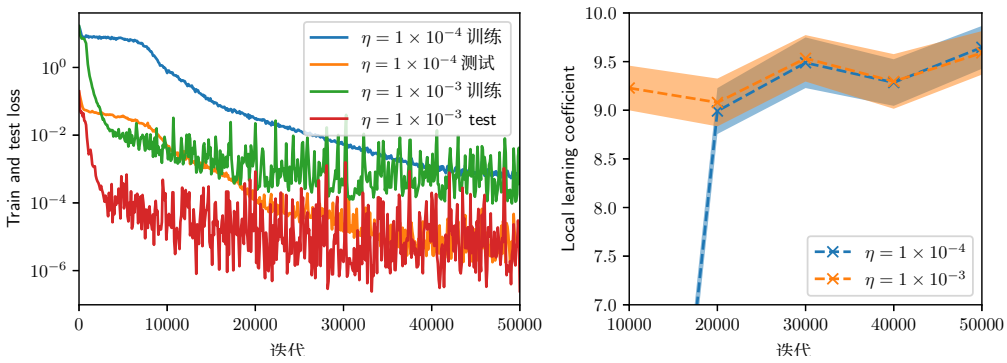
很小，我们采用了保守的选择。

图2总结了计算实验的结果。左侧面板显示了每100次迭代的训练损失和测试损失变化历史。在这里，测试损失是在均匀网格上对（$u(x,\ t,\ w) - u(x,\ t))^2$ 的平均值进行评估得到的，其中网格由（$x,\ t$）对组成。右侧面板显示了每10，000次迭代计算得到的LLC估计值。在解读早期迭代中出现的较小LLC估计值时，必须谨慎。对于早期迭代，参数估计值 w_t 并不是极小值；因此，马尔可夫链蒙特卡洛链覆盖了参数空间中满足 $L_n(w) < L_n(w_t)$ 的区域，从而得到较小且可能为负的值。除这一点外，可以看出，在所有实验（批量大小和学习率取不同值）中，估计的LLC均为 $\lambda(w^\star) \approx 9.5$。通过改变用于初始化 w 的伪随机数生成器种子进行的其他实验，也得到了相同的LLC估计值（见图3。）

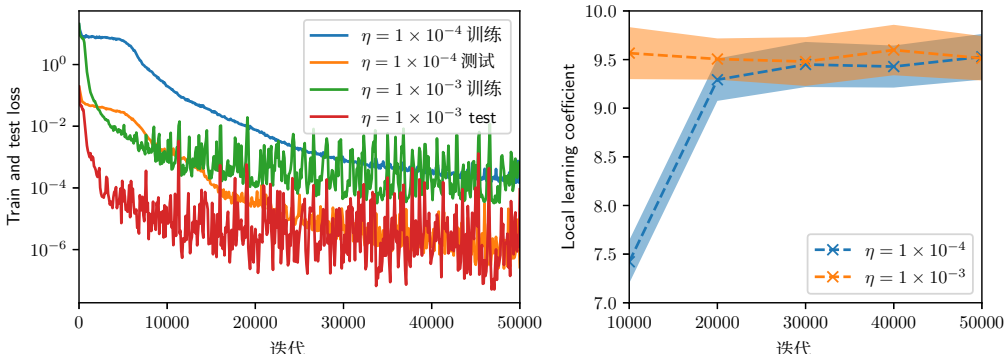
这一数值之所以引人注目，有两个原因：首先，尽管局部极小值 $w^\star$ 的估计在不同实验中差异极大，局部学习系数$\hat{}$的估计却非常一致。其次，$\lambda(w^\star)$显著小于物理信息神经网络模型的参数数量 $d = 20{,}601$。如果物理信息神经网络模型是正则的，那么它的参数数量 $O(10)$会小得多。这些结果表明，物理信息神经网络解对应于参数空间中一个非常平坦的区域，而不同的初始化和随机优化超参数选择都会导向同一区域。如图2和图3所示，较低的学习率 1×10^{-4}由于随机优化噪声较小，到达该区域所需的迭代次数多于较高的学习率 1×10^{-3}.

4. 讨论

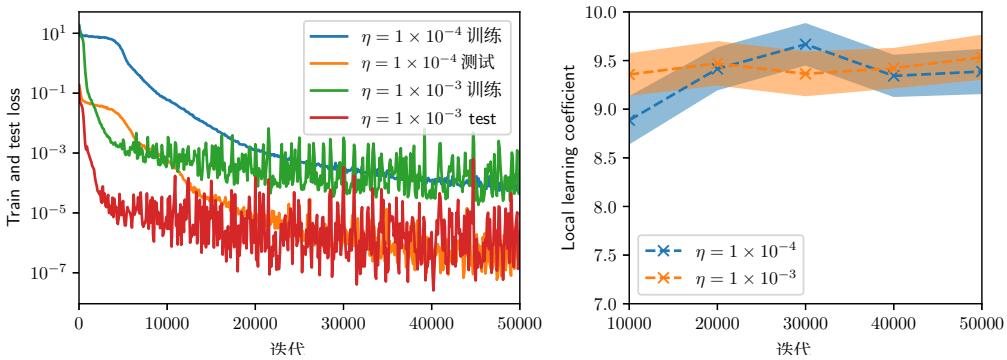
所提出的物理信息学习问题重构的一个重要局限在于，它仅适用于具有初始和边界条件硬约束的物理信息神经网络模型。在实践中，物理信息学习往往不施加此类硬约束，而是不仅惩罚控制方程的残差 $y_{\mathrm{GE}}(x,t) := \mathcal{L}(u(x,t,w)\ x,t)$，还惩罚初始条件的残差 $y_{\mathrm{IC}}(x,w) := u(x,0,w)$以及边界条件 $y_{\mathrm{BC}} := \mathcal{B}(u(x,t,w)\ x,t)$。这些残差也可视为物理信息神经网络模型的可观测量。因此，一种重构含多个残差的物理信息学习问题的可能方法是引入单一向量可观测量 $y := [y_{\mathrm{GE}}, y_{\mathrm{IC}}, y_{\mathrm{BC}}]$，并考虑



(a) 批量大小 $= 8$

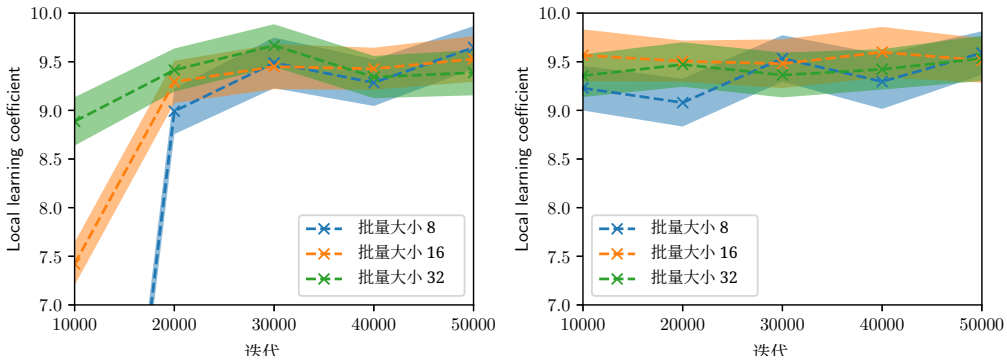


(b) 批量大小 $= 16$

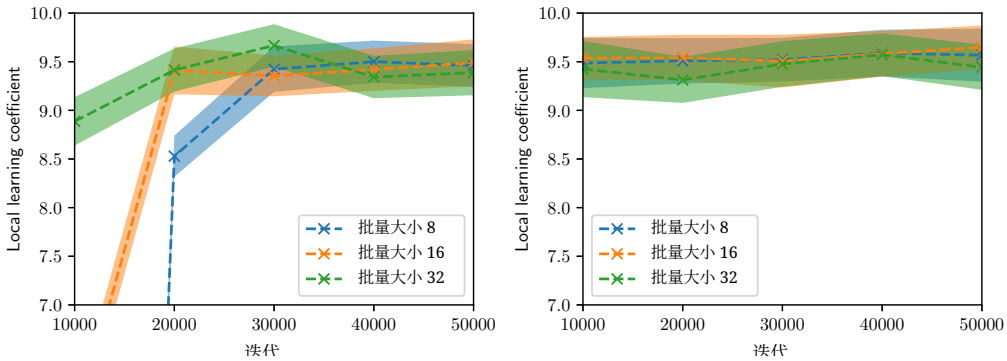


(c) 批量大小 $= 32$

图2：不同批量大小和 Adam学习率下的训练和测试历史记录（左图，每 100 次迭代显示一次），以及 LLC估计值及其 95%置信区间（右图，每 1,000 次迭代显示一次）。



(a) 第一次初始化



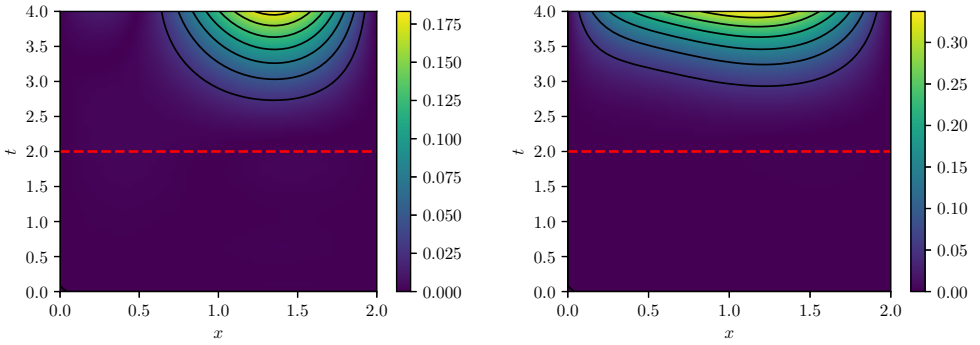
(b) 第二次初始化

图3：在不同批量大小和 Adam 学习率下，并针对两种初始化计算得到的 LLC估计值，每1,000次迭代显示一次95%置信区间 η 。左： $\eta = 1 \times 10^{-4}$。右： $\eta = 1 \times 10^{-3}$。

具有模型 $p(y \mid x,\ t,\ w)q(x,\ t)$。 的统计学习问题。在这种表述中，所有残差的样本数 n 都相同，这与通常为 PINN损失的每一项使用不同数量残差评估点的做法相悖。尽管如此，我们注意到，正如第2节所述，使用随机批次进行 PINN 学习近似于最小化总体损失 $L(w) \equiv \lim_{n\to\infty} L_n(w)$，这表明包含多个残差的物理信息学习问题与上述重新表述之间可能存在等价关系。此外，在考虑物理信息学习中常用来调整 PINN损失中不同残差权重的权重系数时，必须格外谨慎。这些问题将在未来的工作中进一步研究。

所提出的物理信息学习问题统计学习分析

对 PINN 预测中不确定性的量化具有重要启示。PINN 预测中的贝叶斯不确定性量化（UQ）通常通过为模型参数选择先验和一组固定的残差评估点，并从 PINN 参数的后验分布中进行采样来实现（例如，参见 [15, 16]）。正如 [15], 所指出的，由于 PINN 模型具有奇异性，对 PINN 损失进行马尔可夫链蒙特卡洛采样在计算上极具挑战性。不过，未必需要如此全面地探索参数空间，因为候选解在参数空间中可能相差很大，却对应于范围有限的损失值，因而也只对应有限范围的可能预测结果。换言之，鉴于所涉及的 PINN 模型具有奇异性，这项分析表明，对于物理信息学习中的贝叶斯不确定性量化，采用函数空间视角是合理的。



(a) $|u(x,\ t) - u(x,\ t,\ w^0)|$　　(b) $|u(x,\ t) - u(x,\ t,\ w^1)|$

图 4：通过对物理信息神经网络模型参数进行不同的初始化，得到两个不同参数向量w^0和 w^1的物理信息神经网络逐点绝对估计误差。两个参数估计均使用批量大小为 32 以及 1×10^{-4} 的 Adam学习率，经过 100，000 次迭代计算得到。尽管两种情况下的结果均表现出相似的损失$L_n(w)$值（$O(10^{-5})$，并且具有相似的局部学习系数 $\hat{\lambda}(w^0) \approx \hat{\lambda}(w^1) \approx 9.5$，但它们表现出明显不同的外推行为。

最后，本文分析还揭示了物理信息神经网络的外推能力。众所周知，物理信息神经网络，尤其是时变物理信息神经网络，在训练时间窗之外的时间范围内外推能力有限（0，T]（例如，参见 [17]。）本文分析表明，这并非由所求解的初边值问题、时空残差评估点的数量与分布，或优化算法所导致，而是因为物理信息学习估计模型

参数时，实际上是通过最小化 $L(w) \propto \mathbb{E}_{q(x,t)}[\mathcal{L}(u(x,t,w)\ x,t)]^2$, 来实现的；也就是说，最小化输入生成分布 $q(x,t)$ 上的期望损失，而该分布的支撑集由时空训练窗口给定。尽管沿平坦极小值分布的物理信息神经网络解候选的损失值都处于有限范围内，但无法保证对于不同的损失$L'(w) \propto \mathbb{E}_{q'(x,t)}[\mathcal{L}(u(x,t,w)\ x,t)]^2$ 也会如此，因为平坦极小值的结构与原始损失的定义密切相关，而原始损失又与输入生成分布及因此与时空训练窗口密切相关。事实上，可以预期，两个损失 $L(w)$在容差范围内的 ws，其外推损失 $L'(w)$会大相径庭（例如，参见图 4）；这与文献中报告的外推结果一致。

5. 结论

本文将针对初边值问题的物理信息学习重新表述为一种适用于硬约束参数化的统计学习问题。基于这一重新表述，我们指出，物理信息学习中的物理惩罚项并非通常所认为的正则化项（例如，参见 [2]），而是无限的数据来源；此外，采用随机批次残差评估点的物理信息学习等价于最小化 $L(w) \propto \mathbb{E}_{q(x,t)}[\mathcal{L}(u(x,\ t,\ w)\ x,\ t)]^2$。此外，我们表明，即使在残差评估点数量趋于无穷的极限 $n \to \infty$ 下，物理信息神经网络损失景观也并非由离散的、测度为零的局部极小值构成，而是由非常平坦的局部极小值构成，这些局部极小值对应于复杂度较低（相对于模型参数数量而言）的模型类。我们通过计算热方程初边值问题在不同初始化方式和学习超参数选择下的局部学习系数（LLC），刻画了物理信息神经网络损失景观中局部极小值的平坦程度。结果发现，在所有研究过的初始化方式和超参数设置下，估计得到的局部学习系数都非常相近，这表明实验中得到的不同物理信息神经网络参数估计值周围的邻域具有相似的平坦性。最后，我们讨论了所提出的分析对量化物理信息神经网络预测的不确定性以及物理信息神经网络模型外推能力的影响。

致谢

本材料基于美国能源部（美国能源部）科学办公室、高级科学计算办公室所支持的工作

研究。太平洋西北国家实验室由Battelle根据合同DE-AC05-76RL01830为美国能源部运营。

参考文献

[1] E. Lau, Z. Furman, G. Wang, D. Murfet, S. Wei, 《局部学习系数：一种奇点感知复杂度度量》，载于：Y. Li, S. Mandt, S. Agrawal, E. Khan（编），《第 28 届人工智能与统计国际会议论文集》，机器学习研究论文集第 258 卷，PMLR，2025年，第 244–252 页。网址：https://proceedings.mlr.press/v258/lau25a.html[2] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang，物理信息机器学习，《自然综述：物理学》3 (6) (2021年) 422–440。[3]S. Watanabe, 《代数几何与统计学习理论》，第 25 卷，剑桥大学出版社，2009年。[4] M. D. Homan, A. Gelman, 《无 U 转向采样器：自适应设定哈密顿蒙特卡洛的路径长度》，《机器学习研究杂志》15 (1) (2014年) 1593–1623。[5]M. Welling, Y. W. Teh, 《通过随机梯度朗之万动力学进行贝叶斯学习》，载于：《第 28 届国际机器学习会议论文集》，ICML'11，Omnipress，美国威斯康星州麦迪逊，2011年，第 681–688 页。[6] J. Heek, A. Levskaya, A. Oliver, M. Ritter, B. Rondepierre, A. Steiner, M. van Zee，Flax：面向 JAX 的神经网络库及生态系统（2024年）。网址：http://github.com/google/flax[7]A. Cabezas, A. Corenflos, J. Lao, R. Louf，BlackJAX：JAX 中可组合的贝叶斯推断（2024年）。arXiv:2402.10797。[8] J. Hoogland, G. Wang, M. Farrugia-Roberts, L. Carroll, S. Wei, D. Murfet，Transformer 中的损失景观退化与阶段式发展，《机器学习研究汇刊》（2025年）。网址：https://openreview.net/forum?id=45qJyBG8Oj

[9] A. Muhamed, V. Smith, 《遗忘的几何：通过局部学习系数分析机器遗忘》，载于：ICML 2025 可靠且负责任的基础模型研讨会，2025年。网址：https://openreview.net/forum?id=qKh7Aip3JC[10]X. Li, J. Deng, J. Wu, S. Zhang, W. Li, Y.-G. Wang, 使用傅里叶展开求解对流扩散方程的软、硬边界约束物理信息神经网络, 《计算机与应用数学》159 (2024年) 60–75。doi：https://doi.org/10.1016/j.camwa.2024.01.021。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122124000348 [11]L. Lu, R. Pestourie, W. Yao, Z. Wang, F. Verdugo, S. G. Johnson, 具有硬约束的物理信息神经网络及其逆向设计应用, 《SIAM科学计算杂志》43 (6) (2021年) B1105–B1132。arXiv：https://doi.org/10.1137/21M1397908，doi：10.1137/21M1397908。网址：https://doi.org/10.1137/21M1397908[12] A. M. Tartakovsky, Y. Zong, 采用时空 Karhunen–Loève 展开的偏微分方程正问题与逆问题的物理信息机器学习方法, 《计算物理学杂志》499 (2024年) 112723。doi：https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112723。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999123008185 [13]T. Imai, 《实对数典范阈值估计》，arXiv 电子预印本（2019年）arXiv:1906.01341arXiv:1906.01341，doi：10.48550/arXiv.1906.01341。[14] S. Watanabe, 《广泛适用的贝叶斯信息准则》14 (1) (2013年) 867–897。[15]Y. Zong, D. A. Barajas-Solano, A. M. Tartakovsky, 《用于贝叶斯数据同化的随机物理信息神经网络》，《计算方法与应用力学及工程》436 (2025年) 117670。doi：10.1016/j.cma.2024.117670。

[16]L. Yang、X. Meng、G. E. Karniadakis，B-pinns：用于含噪数据下正向与逆向偏微分方程问题的贝叶斯物理信息神经网络，《计算物理学杂志》425（2021年）109913。doi：https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109913。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999120306872[17] Y. Wang、Y. Yao、Z. Gao，用于物理信息深度学习的外推驱动的网络架构，《神经网络》183（2025年）106998。doi：https://doi.org/10.1016/j.neunet.2024.106998。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0893608024009274