基于遥测数据的科学机器学习辅助模型发现

Sebastian Micluta-Campeanu[a]，Avinash Subramanian[a]，Anas Abdelrehim[a]，Ranjan Anantharaman[a]，Rohit Dhumane[b]，Brad Carman[a]，Chris Rackauckas[a]

[a]JuliaHub Inc.[b]
Trane Technologies Inc.

arXiv:2603.15943v1 [cs.CE] 16 Mar 2026

摘要

将动态模型校准至数据，是构建暖通空调设备、热负荷和控制系统数字孪生的重要步骤。有时，当模型无法校准至数据时，一个可能的原因是模型作出了过多简化假设，因而缺失了部分物理机制。本文提出了一种称为 Dyad 模型发现的半自动化方法，该方法能够利用从数据中发现的符号表达式来增强模型的物理方程。我们在一个运输制冷机组的数字孪生上展示了该方法，以提高其预测性能；该模型使用遥测数据进行训练。我们提出了一种工程师参与的工作流，为用户提供建议，用户随后可接受或拒绝这些建议。据我们所知，这是首个人工智能辅助工程设计工作流。

关键词：模型发现、通用微分方程、校准、运输制冷

1. 引言

动力系统的校准可能是一项颇具挑战性的任务，尤其是在暖通空调与制冷领域（HVAC&R）中（Chakrabarty 等（2021））。为确保最终得到的高维非线性优化问题收敛，可能需要尝试多种校准方法（Rackauckas 等（2022））。然而，无法收敛的原因可能与此无关，例如参数缺乏可辨识性（Browning 等（2022）），或者模型的细节不够充分，无法捕捉数据中观察到的所有潜在动力学。本文提出一种半自动化方法，该方法以现有模型和一个数据集为输入，并据此提出对模型底层物理方程的修改。下文将这一过程称为模型发现。

模型发现不同于 SinDy（Fasel 等（2021））或经典线性系统辨识方法（Carlson 等（2021））等系统辨识方法，后两者完全由数据驱动。相比之下，我们的方法基于 Rackauckas 等（2020）提出的通用微分方程，该方法通过神经网络扩展动力系统，随后对扩展后的系统进行数据校准。我们在此基础上进一步加入了敏感性分析和符号回归等重要新功能，从而为用户开发的物理模型提供独特的洞见。

本文展示了如何将所提出的技术应用于货箱模型。货箱是运输制冷机组（TRU）的基本建模组成部分（Dhumane 和 Greene（2023）；Dhumane 和 Stinson（2024））。冷藏运输是现代经济的重要组成部分，确保食品和药品能够送达。随着人们日益关注能源效率和脱碳，我们需要

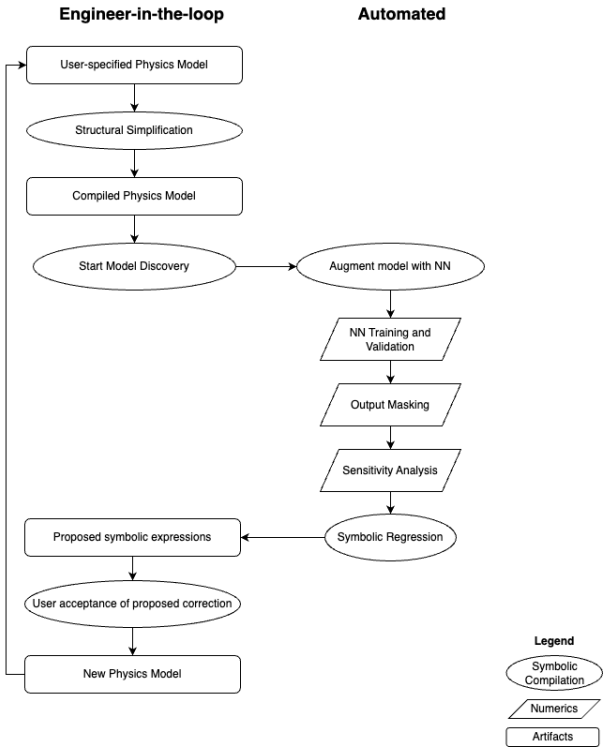


图 1：**Dyad 模型发现**。面向用户的工程师在环步骤位于左侧，而自动化流程位于右侧。最后，工程师可以选择接受或拒绝系统提出的更改。

提高对运输制冷机组（TRU）性能的预测能力，以支持车队规划和路线优化。TRU 包含一个货箱，该货箱通过一维热流体模型进行模拟，模型采用集总空气控制体，并包含若干参数（如热容），这些参数需根据测试数据进行校准。对于多温货物，问题更具挑战性，因为需要校准的未知参数有多个。此外，各机组之间的参数存在显著差异，进一步增加了问题的难度。自动化的模型校准或模型发现算法有助于提高对各个机组性能的预测能力。

运输制冷机组（TRU）由制冷系统（下文称为被控对象）、负载（下文称为货箱）以及控制系统组成，控制系统确保制冷系统将负载维持在特定设定点。Dhumane 和 Stinson（2024）详细描述了被控对象、货箱和控制系统的物理原理。本文将聚焦于货箱本身，它是 TRU 的主要负载。

货箱有时会划分为多个区域，并为每个区域设定不同的设定点，以便在同一趟运输中运送多种货物（ Dhumane 和 Greene（2023））。多区域货箱由多个货箱模型组成，各模型之间以隔板分隔，热量可通过隔板在货箱之间传导。本文采用一种科学机器学习（SciML）技术，改进双区域货箱模型的动态温度预测。具体而言，我们将使用通用微分方程（UDE）（Rackauckas 等（ 2020）），这是一种通过修正模型物理原理来提高预测能力的 SciML 技术。该方法借助建模与仿真产品 Dyad（原名 JuliaSim）（Rackauckas 等（2022））实现，并提供工程师指导的工作流程，以实现快速收敛。

本文其余部分安排如下：首先，我们介绍 UDE 方法的背景，并描述其在 Dyad 中的实现和工作流程，包括训练的不同阶段。最后，我们讨论这些结果对未来工作的启示。

2. 方法与工具

Dyad 模型发现由依次执行的四种数值方法组成。本节将逐一介绍这些方法及其所用的启发式方法。

2.1. 通用微分方程

通用微分方程是一种科学机器学习技术，用于修正常微分方程或微分代数方程系统的动力学。考虑以下形式的动力学物理模型，该模型由微分代数方程表示：

$$\frac{du_d}{dt} = f(u, x, p, t) \tag{1}$$

$$0 = g(u, x, p, t) \tag{2}$$

其中$u(0) = u_0$且$t \in (0, T)$，状态向量$u = \{u_d,\ u_a\}$其中u_d表示微分变量，u_a表示代数变量。考虑该系统的输出y，如图所示

$$\hat{y}(t) = h(u, x, p, t) \tag{3}$$

考虑一个测试数据集，其中记录了输出 $\{y(t_i) : t_i \in (0, T)\}$，以及输出中的一个残差

$$r = \|\hat{y} - y\|_2 \tag{4}$$

该技术试图通过引入一个神经网络修正项来修正这一残差项，该修正项作用于时间导数。该神经网络的输入是状态导数 u_d，输出则是所需的修正项。

例如，考虑修正项$NN(u_d, x, p, t; \theta)$，其中 θ 是神经网络的权重。该项会修改方程 2，从而生成一个新的动力系统。

$$\frac{du_d}{dt} = f(u, x, p, t) + NN(u, x, p, t; \theta) \tag{5}$$

$$0 = g(u, x, p, t) \tag{6}$$

$$\hat{y} = h(u, x, p, t) \tag{7}$$

随后求解的优化问题为

$$\min_\theta r = \min_\theta \|y - \hat{y}\|_2 \tag{8}$$

上述系统被表述为一个无约束优化问题，可以采用多种基于梯度或无梯度的方法进行训练。基于梯度的方法需要实现伴随方程，以计算残差相对于神经网络参数θ的梯度。通常使用反向模式自动微分来实现这一过程。SciML 软件栈提供了这些伴随方法的实现，见 Rackauckas 等（2020）；Rackauckas 和 Nie（2017）。

2.1.1. 输出屏蔽

训练完该神经网络后，所需的修正基本上就已确定。用户可以选择此时停止训练，并使用由此得到的灰箱模型。不过，工程师也可以选择缩小修正的范围，具体步骤如下：

1. 减少校正数量（网络的输出维度）2. 减少进行这些校正所需的状态数量（最初，所有状态都用于训练）3. 将精简后的神经网络转换为符号回归。

本节解释如何降低神经网络的输出维度。我们会检查神经网络输出的幅值，并可以选择一个指标来确定

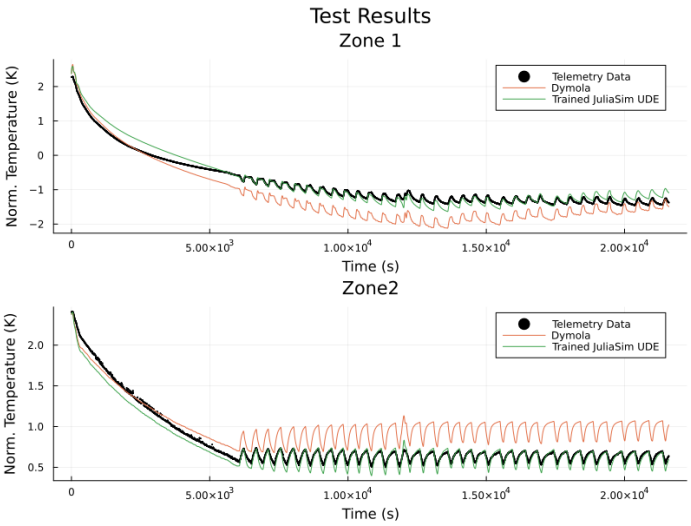


图2：训练后的 Dyad UDE 在未见过的数据集上的预测结果，使损失函数降低了 3%。

修正项的幅值是否相对较小。一种示例性启发式方法是，将修正项幅值与时间导数在整个时间范围内的最大值之比作为指标：

$$\frac{|\Delta d_i'|}{\max_T |d_i'|}$$

通过这种方式，可以确定排名靠前的输出。随后应用迭代掩蔽过程：取消对排名前 X 个输出的掩蔽，并掩蔽其余输出。该过程旨在确定需要保留的最少修正数量，使得损失函数满足公式 4。

减少输出维度的数量后，使用与上一节所述相同的过程，以较小的输出维度重新训练网络。

2.1.2. 敏感性分析

现在可以使用敏感性分析来减少输入维度。在最优参数下，计算从输入到输出的雅可比矩阵，并根据各列的相对大小选出排名靠前的输入变量。

2.1.3. 符号回归

最后，可以使用符号回归技术将神经网络替换为符号表达式（Cranmer（2023））。该技术会进行大规模分布式搜索，寻找将输入变量映射到输出修正值的表达式。模型参数也作为输入变量，以使所得表达式能够泛化到不同的模型参数。最后，符号回归会返回搜索得到的最佳方程。

*2.2. Dyad*中的实现

Dyad 是一种非因果建模环境（Rackauckas 等（2022）；Ma 等人（2021）），它将系统建模与机器学习结合起来。Dyad 的一个子模块 DyadAI 提供通用微分方程，并提供易于使用的自动化流程，以便应用通用微分方程。DyadAI 包含通用微分方程以及代理建模方法（Abdelrehim 等人，2025）。通用微分方程形式体系通过加入能够捕捉未知物理规律的机器学习模型，增强基于第一性原理的物理模型以及现有知识。

2.2.1. 基于物理的热流体建模

首先，在Dyad中为TRU开发了一个热流体模型。TRU是一个隔热箱体，利用两个分区将其划分为三个不同的温度区域。该Dyad模型基于Dhumane 和 Greene（Dhumane 和 Greene（2023））开发的低至中等保真度Modelica模型。所开发的模型是由可组合的非因果符号模型生成的微分代数方程（DAE）系统。

我们关注的关键动态可观测量是 3 个区域各自的温度。我们关注的关键物理现象包括：热量从环境空气经由隔热壁传递到空气区域、热量从空气区域传递到制冷系统，以及空气区域内部和区域之间因空气泄漏而产生的质量传递。

基于物理的模型的完整细节见（Dhumane 和 Greene（2023））。概括而言：采用集总控制体模型表示空气区域，采用分布参数模型描述围护壁，即沿壁厚方向进行离散化（另外两个维度则保持为集总控制体）。空气区域内部实施对流换热，同时考虑通过围护壁的导热。箱体尺寸（高度、宽度、区域长度）以及传热传质关联参数等若干参数会影响模型，后者通过校准分析确定。两个区域由隔板分隔，隔板考虑了区域之间的导

热传递。

2.2.2. 结构简化

Dyad 中的物理模型本质上是一个微分代数方程系统。该系统由用户指定，随后会经过一系列转换和符号运算，例如 Ma 等人（2021）所述的 Pantiledes 算法降指标、别名消除、撕裂、虚拟导数等。这些符号运算能够精确保留系统，并非近似处理。最终得到的是一个规模更小、经过符号简化的方程系统。

2.2.3. 通用微分方程

Dyad 模型经过结构简化后，其动力学现在会通过神经网络进行扩充。最初，神经网络的输入维度为状态数量，输出维度为微分方程/变量的数量。在训练前会进行输入和输出归一化：输入归一化可防止神经网络的激活函数达到饱和，输出归一化则确保修正项不会过大，以免导致扩充后的系统不稳定。完成归一化后，会对神经网络进行训练，使混合系统的解与数据高度吻合。此外，Dyad 中的实验跟踪系统会同时训练多种不同架构。系统会自动为用户选出性能最佳的架构；如果需要，工程师也可以进入实验跟踪器，另选一个神经网络。

2.2.4. 掩蔽、敏感性分析与符号回归

优化问题收敛到一个解后，便会生成一个带有神经网络嵌入的新混合系统。为缩减神经网络的规模，会采用两种启发式方法：保留幅值最大的输出，同时掩蔽幅值较小的修正项。这会降低神经网络的输出维度。随后，使用较小的输出维度重新训练网络。

接下来进行敏感性分析，以确定哪些变量对这些修正项的贡献最大。这会降低修正项的输入维度。最后，采用 Cranmer （ 2023 ）的符号回归，以符号表达式替代神经网络的输入输出。将缩减后的输出、缩减后的输入变量以及人工选定的参数输入符号回归算法，由该算法生成最简表达式。最终得到一个新模型，其中包含可附加到原始模型的新符号表达式，并由用户选择是否采用。整个流程总结于图 1。

3. 结果

3.1. 测试模型、数据集与结构简化

多区域货箱模型的详细描述，以及用于构建该模型的离散化方案，可参见 Dhumane 和 Greene（2023）。我们的测试模型是一个双区域货箱模型，四周均设有隔热层。各区域通过隔板进行热隔离。货箱内的空气被建模为集总控制体。由于温度差异，各区域之间会发生热传递；由于温度差异，还会发生质量传递。双区域货箱模型还包含多种配置，对应于各区域的相对大小。我们的训练数据集对应于图4所示的 B 和 E 两种配置

更具体地说，所研究的测试用例总结于表 2 和图4中。数据集由三个遥测数据实例组成，分别对应每个区域的温度。我们使用其中两个数据实例进行训练，另一个用于测试。

Dyad模型经过结构简化后，生成了一个编译后的模型，其中有36个状态，包括8个代数变量和28个微分变量。

3.2. 通用微分方程

作为起点，将一个神经网络 $\mathcal{N}: u \mapsto \Delta u'_d$ 附加到系统中，如方程5所示。神经网络的输入维度为系统中的状态总数（36），输出维度为系统中的微分方程总数（28）。使用Dyad的实验跟踪功能训练了多种不同的隐藏层和架构，并选出表现最佳的架构。对于此模型，训练了具有不同隐藏层大小的多层感知机。最终拟合结果如图2所示。

3.3. 掩蔽与敏感性分析

为了提高所得通用微分方程的泛化能力，Dyad 正在确定系统中影响最大的方程，并且仅针对这些特定方程生成神经网络输出数据。我们对上一步训练得到的神经网络进行了分析。在 28 个输出中，我们发现大多数神经网络输出实际上都接近于零，而幅值最大的前 2 个输出就足以在极低损失值下提供修正。

因此，我们构建并训练了一个具有 36 个输入和 2 个输出的新网络，所采用的过程与之前相同，最终获得了与先前网络相同的预测性能。最后，通过计算输出相对于输入的雅可比矩阵进行敏感性分析，以确定输出对哪些输入变量最为敏感。雅可比矩阵的热图如图3所示。

3.4. 符号回归

随后，使用符号回归 Cranmer（2023）对这些数据进行进一步处理，从而获得表示通用微分方程修正项的参数化表达式。符号回归需要一组输入变量和参数。我们将敏感性分析确定的排名前 7 的输入以及三个参数提供给符号回归，并生成了一个表达式。表X展示了提供给符号回归的输入。

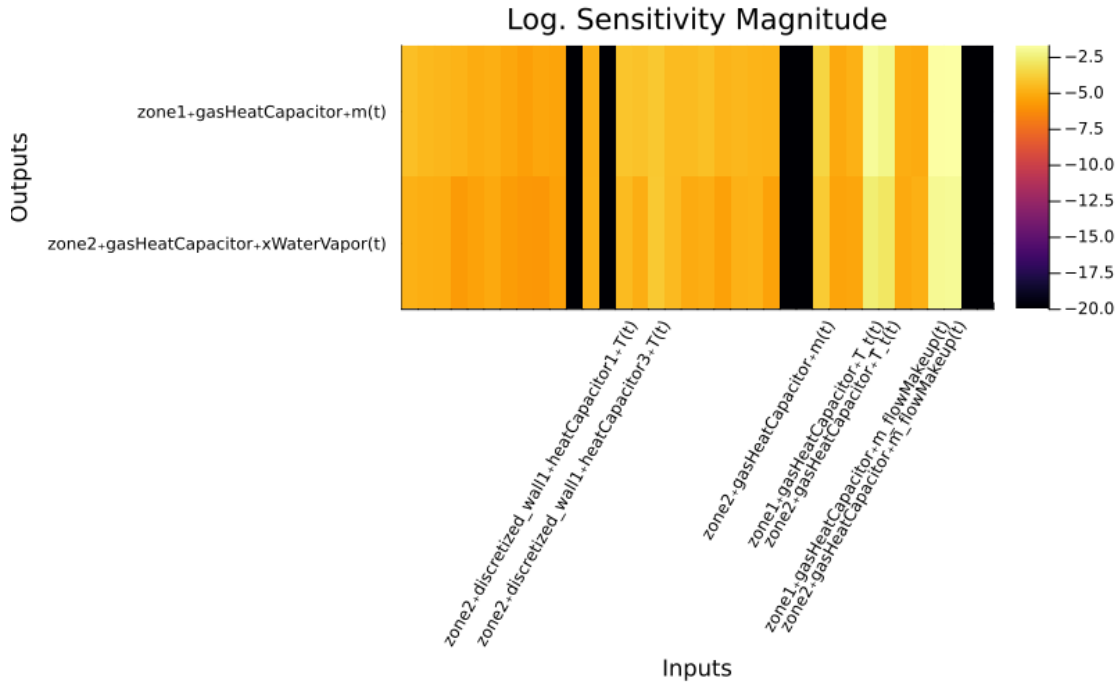


图3：雅可比矩阵的热图 ，作为敏感性分析的一部分计算得出。排名前7的输入项标记在X轴上。以“_t(t)”结尾的输入项 " 表示由模型编译生成的虚拟导数 由模型编译完成。

变量	Type	描述
xPartition	参数	两个分区的相对大小
initialAirTemperatureZ1	参数	区域1初始温度
区域2初始空气温度	参数	区域2初始温度
区域1.gasHeatCapacitor.m_flowMakeup	微分变量	区域1质量流量
区域2.gasHeatCapacitor.m_flowMakeup	微分变量	区域2质量流量
区域2.discretized_wall1.heatCapacitor1.T	微分变量	墙壁离散元件中的温度
区域2.discretized_wall1.heatCapacitor3.T	参数	墙壁离散元件中的温度
区域2.gasHeatCapacitor.m	代数变量	区域2内的质量
区域1.gasHeatCapacitor.T_t	虚拟导数	区域1中温度的二阶导数
区域2.gasHeatCapacitor.T_t	虚拟导数	区域1中温度的二阶导数

表 1：提供给符号回归程序的输入变量，根据敏感性分析的结果和对模型的一些了解确定。

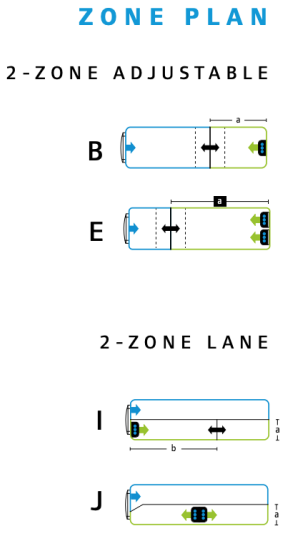


图4：双区域箱体模型的拖车配置。Dyad UDE 使用配置B和E进行训练，并在专有配置上进行测试。

ID	尺寸		温度	
	区域1	区域2	区域1	区域2
1	9m	4.5m	-20C	0C
2	2.5m	11m	-25C	4C
3	4.5m	9m	-20C	2C

表 2：训练集（#1 和 #3）与测试集（#2）中的不同车辆配置

图 5 展示了对前两个测试数据集应用符号回归过程后得到的修正项。我们可以看到，符号表达式由特定区域配置的参数化，例如区域 2 的初始空气温度或隔板长度。使用符号表达式表示修正项，使我们能够获得更通用的修正项。为了测试结果，我们使用了最后一个测试用例。

4. 讨论

Dyad-UDE 工作流使用了若干符号和数值计算阶段，因此，要利用此方法，模型自然需要移植到 Dyad。这可以通过 Dyad 图形化程序完成，也可以通过在 Julia 中编写 Dyad 建模语言（JSML）代码来实现。JSML 是一种嵌入 Julia 的非因果声明式语言。在本例中，测试模型从 Modelica 语言移植到了 JSML。

未经工程师批准，不会进行模型更新。工程师还可以在训练过程的每个阶段自主做出选择，例如，从超参数搜索结果列表中选择合适的架构、确定要屏蔽的输出变量数量，以及最重要的一点：选择纳入符号回归的输入变量。在本案例中，我们决定将三个参数纳入回归，这一选择基于对模型本身的了解。这凸显了工程师参与其中的必要性。

神经网络的每个训练阶段都通过实验跟踪器测试了 500 多种不同的架构和超参数组合。每次训练运行都会提交到 JuliaHub 云产品，并通过作业 ID 与实验跟踪器关联。

符号回归完成后，我们注意到最终表达式中出现了虚拟导数，这是因为它们源自先前的灵敏度分析。虚拟导数不具有物理意义，只是编译过程产生的一种伪影。未来还需研究如何消除这些虚拟导数，以保留具有物理意义的物理量。

最后，这些修正会应用于已编译模型（即结构简化之后）。未来还需研究如何在编译前修正用户代码中的特定方程。

5. 结论

模型发现是自动补全系统模型的强大工具。在这项工作中，模型发现能够准确拟合数据，并外推至未见过的条件。它们是提高基于组件的模型准确性的有前景的工具，并且本文在 Dyad 中展示了一套工作流程。

参考文献

Abdelrehim,A., Gandhi,D., Yalburgi,S.,Bharambe, A., Anan- tharaman, R., Rackauckas, C.V., 2025。主动学习增强



图5：符号回归生成的最终符号表达式。生成这些表达式仅使用了五个输入变量和两个参数。

JuliaSim 中喷气发动机的代理建模，载于：AIAA SCITECH 2025Forum，第2323页。

Browning, A.P., Drovandi, C., Turner, I.W., Jenner, A.L., Simp- son, M.J., 2022. 随机参数微分方程模型的高效推断与可辨识性分析。PLOS Computational Biology 18, e1010734。

Carlson, F.B., Fält, M., Heimerson, A., Troeng, O., 2021. Controls ystems. jl：Julia 中的控制工具箱，载于：2021年第60届 IEEE 决策与控制会议（CDC），IEEE。第 4847–4853 页。

Chakrabarty, A., Maddalena, E., Qiao, H., Laughman, C., 2021。用于模型校准的可扩展贝叶斯优化：耦合建筑与暖通空调动态的案例研究。Energy and Buildings 253，111460。Cranmer, M., 2023。使用 PySR 和 symbolicregression.jl 进行可解释机器学习以开展科学研究。arXiv 预印本 arXiv:2305.01582。Dhumane, R., Greene, M., 2023。多温货物挂车的建模与校准。Dhumane, R., Stinson, M., 2024。运输制冷机组工作周期仿真的通用建模框架。Fasel, U., Kaiser, E., Kutz, J.N., Brunton, B.W., Brunton, S.L., 2021。带控制的稀疏识别动力学：教程，载于：2021 年第 60 届 I EEE 决策与控制会议（CDC），IEEE。第 16–21 页。Ma, Y., Gowda, S., Anantharaman, R., Laughman, C., Shah, V., Rackauckas, C., 2021。ModelingToolkit：用于基于方程的建模的可组合图变换系统。arXiv 预印本 arXiv:2103.05244。Rackauckas, C., Gwozdz, M., J ain, A., Ma, Y., Martinuzzi, F., Rajput, U., Saba, E., Shah, V.B., Anantharaman, R., Edelman, A. 等，2022。使用 Julia 将建模与仿真同机器学习相结合，载于：2022 年建模与仿真年会（ANNSIM），IEEE。第 1–17 页。

Rackauckas, C., Ma, Y., Martensen, J., Warner, C., Zubov, K., Supekar, R., Skinner, D., Ramadhan, A., Edelman, A., 2020。面向科学机器学习的通用微分方程。arXiv 预印本 arXiv:2001.04385。

Rackauckas, C., Nie，Q., 2017年. Differentialequa- tions.jl——一个用于求解 Julia 中微分方程的高性能、功能丰富的生态系统。《开放研究软件期刊》第5卷。统一资源定位符：https://app.dimensions.ai/details/publication/pub.1085 and http://openresearchsoftware.metajnl.com/articles/1 数字对象标识符：10.5334/jors.151。由 https://app.dimensions.ai 导出，日期为2019年5月5日。