



基于物理信息神经网络的非均质材料力学研究进展

林从建, 楼俊斌, 李奕璇, 徐荣桥, 王冠楠*

浙江大学建筑工程学院, 杭州 310058

* 联系人, E-mail: guannanwang@zju.edu.cn

2024-06-26 收稿, 2024-08-08 修回, 2024-08-13 接受, 2024-08-14 网络版发表

国家自然科学基金(12322206, 12002303, 12192210, 12192214)和国家重点研发计划(2020YFA0711700)资助

摘要 非均质材料是工程领域中广泛应用的一个概念, 近年来深度学习方法的井喷式发展为非均质材料系统中许多复杂问题带来了新的解决思路. 然而, 深度学习因为其高度的并行性、非线性和大量的参数复杂运算, 使得其难以被直观解释, 在非均质材料领域的应用中容易遇到产生物理上无意义解、泛化性较低和依赖于高质量和数量的数据集等问题. 而基于物理信息的神经网络(physics-informed neural networks, PINNs)可以通过将物理知识与深度学习相结合, 有效解决上述问题, 从而逐渐成为固体力学与结构工程领域的热点方法, 并为预测或设计非均质材料系统提供了新的思路. 为了更好地了解相关方面的研究工作, 本文对非均质材料领域中PINNs方法的应用进行了系统综述, 总结了PINNs适应非均质材料问题特点的改进, 包括域分解方法等多种方法, 详细介绍了近年来PINNs在纤维/颗粒增强复合材料、混凝土、合金微结构、非均质材料弹性成像等非均质问题中的应用. 在此基础上, 展望了进一步的研究方向, 揭示了PINNs在非均质材料上更深入、广泛的应用前景.

关键词 物理信息神经网络, 非均质材料, 复合材料, 深度学习

非均质材料被广泛应用于航空航天、土木交通、材料科学等领域, 其形式多种多样, 包括纤维/颗粒增强复合材料、纤维混凝土、高性能电池、合金微结构等. 针对非均质材料的理论、数值和实验研究长期以来层出不穷, 主要用于预测复杂材料系统的力学性能并在此基础上实现对工程结构的设计要求. 传统的预测方法中实验测试最为直接, 结果相对来说也最为准确, 但是会浪费大量的人力和物力成本, 因此后期发展了细观力学、均匀化等一系列理论, 并构建出以物理模型为基础的理论 and 数值方法, 用于克服传统方法的弊端; 在深度学习方法兴起之前, 非均质材料领域物理模型的驱动解法已经取得了长足的发展. 其中部分问题虽然可以以偏微分方程描述, 但在求解过程中会面临物理模型准确度和计算速度的权衡取舍. 另一方面, 数值

解法(如有限元法)在逆问题、复杂集合区域、高维数据^[1]等方面同样面临挑战, 限制了其为非均质材料研究领域提供稳定可信的数据来源.

得益于GPU等计算机硬件的快速发展, 近年来深度学习方法在图像识别^[2~5]、自然语言处理^[6,7]、天气预报^[8]、基因组学^[9~11]等领域都取得了革命性的突破, 并展现出了强大的非线性函数逼近能力、快速的前馈预测响应、出色的参数反演功能以及高维数据的处理能力^[12], 从而成为了新兴的研究热点. 已有学者将深度学习领域的方法引入到非均质材料领域, 一定程度上解决了高维数据、参数反演等物理模型驱动解法面临挑战的问题^[13~15], 展现出了巨大的潜力与优势. 然而, 深度学习依旧不是万能的求解工具, 在实际应用中仍有不容忽视的弊端和困难, 主要表现为: 目前还没有能

引用格式: 林从建, 楼俊斌, 李奕璇, 等. 基于物理信息神经网络的非均质材料力学研究进展. 科学通报, 2024, 69: 4967–4982

Lin C J, Lou J B, Li Y X, et al. Recent progress on mechanics investigations of heterogeneous materials based on physical information neural networks (in Chinese). Chin Sci Bull, 2024, 69: 4967–4982, doi: [10.1360/TB-2024-0683](https://doi.org/10.1360/TB-2024-0683)

直观解释深度学习方法的理论依据,使得在某些关键领域对深度学习的应用偏向保守;另外,深度学习方法的准确程度很大程度上依赖于数据的数量和质量或者特定的领域知识,而高质量数据的获取不可忽视其高昂的成本。

总而言之,物理模型的驱动解法有可靠的理论依据,易于被人理解和接受,但是经常要在模型准确度和计算成本之间进行取舍。其中,理论方法计算速度较快但是模型准确度一般较低,数值解法准确度较高但是计算速度较慢,在逆问题、复杂集合区域、高维数据^[1]等方面表现不佳。深度学习方法具有非线性函数逼近能力、预测快速、能处理逆问题和高维数据等优势,但是也有缺乏直观理论解释以及依赖数据数量和质量困境。鉴于上述方法各自的优势和困境,将传统方法提炼的物理信息和新兴发展的深度学习方法结合便成为更具潜力的解决途径。虽然早在20世纪90年代,神经网络方法就已经被提出并尝试用于求解微分方程^[16,17],但受限于硬件计算资源的缺乏,上述尝试并没有流行发展起来。近年来,随着布朗大学的Karniadakis等人^[18~20]重新提出这一想法,并将其命名为物理信息神经网络(physics-informed neural networks, PINNs),PINNs逐渐获得广泛的研究和应用,成为新的热点。PINNs通过先验的物理知识指导网络结构设计并约束训练^[21],为神经网络赋予了一定的物理解释,能在少量训练数据的条件下自动满足物理约束条件,实现快速收敛,并能提高精度,提升泛化性能。因非均质材料有多种组成成分且不同组分间的界面处参数不连续等特点,研究时往往需要引入更复杂的理论分析以及更精细的数值建模方法,一定程度上限制了非均质固体材料的研究与应用。而以往研究积累的丰富的理论知识为PINNs在非均质材料领域内的应用奠定了基础,结合神经网络非线性函数逼近器的特点,越来越多的研究开始考虑使用PINNs解决非均质材料领域内的问题。

我们注意到目前尚无PINNs在非均质固体材料领域内应用的相关综述,本文对此进行了详细介绍,在此基础上展望了进一步的研究方向。首先,介绍了PINNs基本原理以及针对非均质材料问题所进行的改进;然后,介绍了PINNs在颗粒/纤维增强复合材料、合金微结构、混凝土以及其他非均质固体问题中的应用;最后,对当前已有研究进行了总结,展望了未来研究方向。

1 PINNs方法的理论及拓展

1.1 PINNs的基本工作原理

在以偏微分方程描述的物理问题中,目标就是找到满足边界条件和初始条件的非线性函数,而神经网络可以看作万能的非线性函数逼近器,可以通过参数的调整拟合任意的非线性函数,这为神经网络用于偏微分方程求解创造了可能。另一方面,基于深度学习方法中广泛使用的自动微分技术^[22],可以将偏微分方程微分形式以及相应的边界和初始条件添加到神经网络的损失函数中约束网络训练,这就是PINNs的一般设计思路。偏微分方程可以是整数阶偏微分方程、积分微分方程、分数阶偏微分方程或者随机偏微分方程,往往需要根据具体的偏微分方程形式构造特定的PINNs结构。下面我们文献中常见的黏性Burgers方程为例,重新回顾介绍PINNs的基本算法原理^[23]。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1)$$

假设式(1)是具有合适的初始条件和Dirichlet边界条件的黏性Burgers方程。 u 表示速度, ν 表示黏度系数, t 表示时间, x 表示位移。传统的物理模型可以通过直接求解偏微分方程获得解析解,当解析解较难获得时,可以通过有限差分或者有限元等方法进行求解,而PINNs则通过神经网络来获得解。如图1所示就是黏性Burgers方程对应的具体PINNs结构^[23]。左侧虚线框内的神经网络用于根据数据集中的输入变量预测方程的解,右侧虚线框内则将神经网络预测的解进行自动微分,构成了偏微分方程残差项。随后利用神经网络预测的解与数据集中的真值解计算的训练数据残差项,同偏微分方程的残差项共同构成神经网络的损失函数:

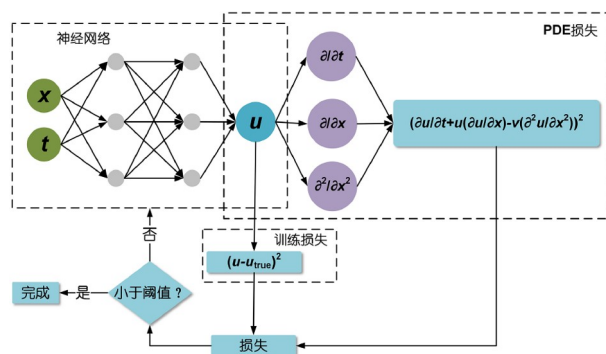


图1 (网络版彩色)PINNs结构及计算流程^[23]

Figure 1 (Color online) Structure of PINNs and computational flow^[23]

$$L = w_{\text{data}}L_{\text{data}} + w_{\text{PDE}}L_{\text{PDE}}, \quad (2)$$

其中, 训练数据残差项和偏微分方程残差项分别可以表示为

$$L_{\text{data}} = \frac{1}{N_{\text{data}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{data}}} (u(x_i, t_i) - u_i)^2, \quad (3)$$

$$L_{\text{PDE}} = \frac{1}{N_{\text{PDE}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{PDE}}} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^2 \Big|_{(x_j, t_j)}, \quad (4)$$

(x_i, t_i) 和 (x_j, t_j) 表示求解域内的采样点, u_i 表示方程的解函数在 (x_i, t_i) 处的值, w_{data} 和 w_{PDE} 是用于平衡两个残差项对训练结果影响程度的权重超参数. 该权重可以自定义, 也可以通过自动调优适应. 随后通过基于梯度的优化器最小化损失函数来训练网络. 损失函数的最小化则代表着训练数据残差项和偏微分方程残差项的值都尽可能小, 也就约束了网络的训练既要拟合训练数据, 也要接近偏微分方程的解, 自然也就受物理信息的约束.

1.2 非均质材料的改进PINNs方法

非均质材料系统有多种组成成分且在界面处参数不连续等特点使得一般的PINNs可能无法精确预测材料综合性能, 尤其是在不同组分间界面处, 因此许多学者根据非均质材料的特点对PINNs进行改进, 从而提高PINNs处理非均质材料系统相关问题的能力. 例如, Huhn等人^[24]在PINNs输入层后添加带旁路神经元的傅里叶特征变换层, 提高PINNs对高频函数问题的表示能力, 使得PINNs能更好地处理非均质材料辐射传输问题^[25]. 目前最常见的改进方法是向PINNs引入域分解方法, 以适应非均质材料系统多种组分的特点, 提高PINNs求解能力和准确度. Mao等人^[26]提到在高梯度区域适当聚类数据点可以提高局部区域的求解精度, 避免误差向全局扩散, 这实际上启发了域分解方法. 域分解方法是指将计算域分为若干个子域, 根据每个子域内解的先验知识约束网络训练, 提高局部区域求解精度. 在非均质材料相关问题中可以根据不同的组分划分子域. Kharazmi等人^[27,28]将变分原理和高阶多项式的域分解方法引入PINNs, 提出了一个一般框架——hp-变分物理信息神经网络(hp-variational physics-informed neural networks, hp-VPINNs). hp-VPINNs虽然对计算域进行了解, 但仍使用单个深度神经网络近

似整个计算域的解, 避免了对子域间界面条件的缝合处理. Liu等人^[29]将结合了域分解的变分物理信息神经网络引入非均匀固体力学问题中, 在有限的观测值(如应变分量)下有效捕捉非均匀材料的分布情况, 结果表明变分物理信息神经网络具有比有限元法更高的预测精度, 证明了引入域分解方法能有效提高PINNs处理非均质材料系统相关问题的能力. Jagtap等人^[30]也将域分解方法引入PINNs, 提出了离散子域的守恒物理信息神经网络(conservative physics-informed neural network, cPINN). cPINN允许为每个划分的子域构造独立的神经网络, 在每个子网络的损失函数中添加相应的强形式守恒量(如通量)连续性条件和强制两个子网络沿共有界面给出平均解的方式缝合所有子域. cPINN虽然也使用了域分解方法, 但如图2所示, 不同于hp-VPINNs仅使用单个神经网络, cPINN是对每个子域构造一个子网络, 与这种区别对应的是, hp-VPINNs的试验函数(trial functions)是全局的, 而cPINN的试验函数是局部的. cPINN的网络架构选择使得其具备并行化的能力, 可以为每一个子域分配一个计算节点, 通过界面条件与其他计算节点交互, 节约训练时间, 还允许根据子域特点灵活选择合适的神经网络, 具有制定元学习算法的潜在可能. 除此之外, cPINN还具有增强网络表示能力和反问题处理能力的优势, 并且可以高效地调整超参数, 加快收敛速度. Henkes等人^[31]使用cPINN^[30]解析通过 μ CT扫描获得的具有尖锐界面的非均质微结构中的非线性应力、位移能量场, 同样证明了域分解的引入有利于PINNs对非均质材料系统相关问题的处理. 正如图2所示, 有部分学者在cPINN的基础上进行了进一步的研究和改进. 扩展物理信息神经网络(eXtended PINNs, XPINNs)^[32]进一步推动了cPINN的发展. XPINNs对域的分解比cPINN更为灵活, 可以同时时间和空间域进行分解以及并行化处理, 并且可以扩展到任意类型的偏微分方程. 这些都是cPINN无法实现的. 随后, Papadopoulos等人^[33]在测定非均质材料中不同组分界面的Kapitza热阻的案例中, 验证了XPINNs在处理非均质问题时具有的高精度和鲁棒性的优势. 不同于cPINN的强形式表示, Wang等人^[34]提出的守恒能量法神经网络(conservative energy method based on neural networks, CENN)是基于离散子域神经网络的变分问题的守恒能量求解方法. 相比于cPINN, CENN在非均质材料中不同组分之间界面处的损失函数项具有更低阶的导数, 同时具有效率高、精度高、超参数少

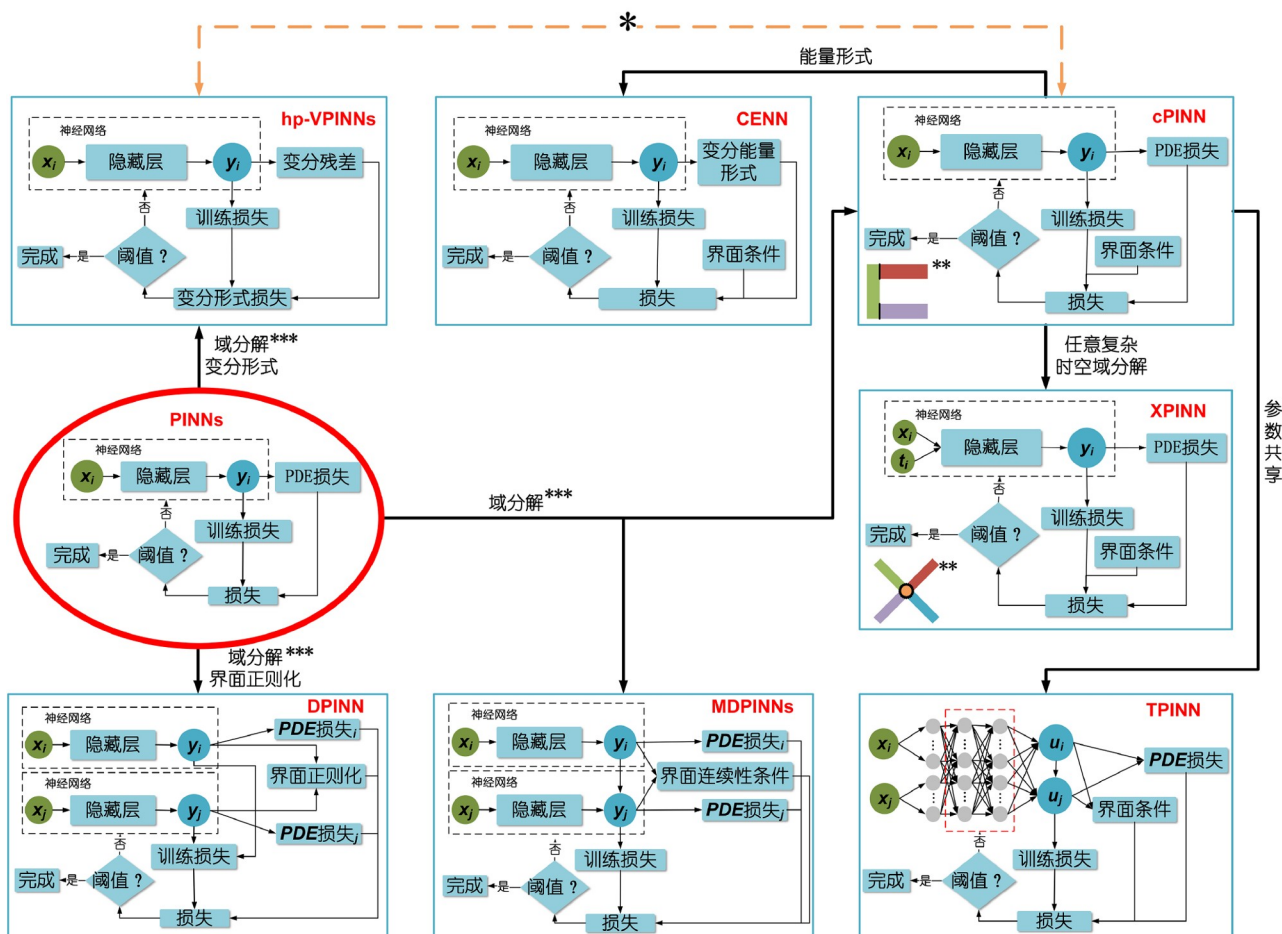


图 2 (网络版彩色)基于域分解的PINNs及相互关系。(*)：在cPINN中每个子域对应一个神经网络^[30]，使用的是局部试验函数(trial functions)；在hp-VPINNs中只有单个深度神经网络，使用的是全局试验函数^[28]。(**)：不同的域用不同的颜色互相区分，黑实线表示界面(interface)，图形“C”^[30]是简单域分解示意图，图形“X”^[32]是复杂域分解示意图。(***)：域分解。将计算域分为若干个子域，根据每个子域内解的先验知识约束网络训练，提高局部区域求解精度。在非均质材料相关问题中，可以根据不同的组分划分子域。具体的网络结构形式可能不同

Figure 2 (Color online) PINNs based on domain decomposition and interrelationship. (*): In cPINNs, each subdomain corresponds to a separate neural network^[30], and local trial functions are used. In hp-VPINNs, only a single deep neural network is employed, and trial functions used are global^[28]. (**): Different subdomains are distinguished by different colors, and black solid lines represent interfaces. The graphic “C” is used to represent the simple domain decomposition^[30], while the graphic “X” is used to represent the complex domain decomposition^[32]. (***): Domain decomposition. The computational domain is divided into several subdomains, then the neural network is constrained during training based on prior knowledge of the solution within each subdomain to improve the accuracy of the solution in subdomains. Concerning heterogeneous materials, the computational domain can be divided according to different components. The specific network structure may be different

的优点, 比cPINN、深度能量法和数据驱动方法具有更优的性能. 而Manikkan等人^[35]则在cPINN的基础上进一步借鉴参数共享(迁移学习)的理念开发了一种新的迁移物理信息神经网络(transfer physics informed neural network, TPINN). 首先为每个非重叠子域构建相对应的一层或多层网络, 随后汇总至参数共享网络, 简化了网络结构, 在图2中也有所展示. 参数共享的理念帮助减少了参数空间维度、内存需求和计算负担, 并提高了精确度, 在求解非均质材料结构, 包括多层复合板、

二维非均质材料的热传导正演和参数反演问题时都有出色的表现。并且当偏微分方程式发生变化或不同子域的偏微分方程参数不连续时, TPINN依旧能有效处理正演和反演问题。Diao等人^[36]在多材料二维平面应变和三维拉伸问题中也同样验证了域分解方法和参数共享概念有利于提高PINNs的精度。

除此之外, 还有其他学者根据域分解方法和非均质材料的具体问题提出了各自对PINNs的改进方法. Dwivedi等人^[37]提出了分布式物理信息神经网络(dis-

tributed PINN, DPINN), 通过在损失函数中引入基于物理条件的界面正则化项保证DPINN各局部网络的同步. DPINN方法利用分段神经网络表示底层场, 而不是有限元方法中常见的分段多项式插值函数^[38]. 在非均质材料板一维热传导方程求解的示例中, DPINN表现出捕捉界面处不连续解的能力, 比传统PINNs更适合非均质材料问题的特点. Yadav等人^[38]则进一步证明了DPINN无须对体积锁定或捕获不连续点进行特殊处理, 同时由于DPINN无网格的性质, 能够避免“维度诅咒”. Zhang等人^[39]也基于域分解的方法开发了多域物理信息神经网络(multi-domain physics-informed neural networks, MDPINNs), 用于计算多层非均质材料线性和非线性瞬态热传导问题, 并将MDPINNs推广到最多四维问题. 域分解方法的运用提高了PINNs克服非均质材料系统界面不连续的问题, 但是可能会使得网络的构建复杂, 对计算资源需求量大. 而Sun等人^[40]提出的边界积分型神经网络(boundary-integral type neural networks, BINN)则不必进行域分解, 可以用单个神经网络处理非均质问题, 避免了域分解的劣势. 因为BINN利用边界积分方程将所有未知量都转移到边界上, 所以不需要对边界和界面条件再进行额外处理, 随后训练神经网络逼近未知量. 另外, BINN对边界积分方程的运用还减少了问题维数, 降低了自由度, 能适用于复杂的几何图形和大变形问题.

在非均质材料系统的复杂问题中, 有时高阶导数的存在会使得PINNs的预测不够准确, 导数降阶是应对这一问题的有效方法. 有部分学者在这方面开展了相关研究工作. Rezaei等人^[41]建立了混合形式物理信息神经网络(mixed formulation-based PINNs, MPINNs), 通过相互独立的网络分别输出未知主变量(解)和主变量的空间梯度, 随后在损失函数中以控制方程的强形式和弱形式(能量形式)分别约束主变量的空间梯度和主变量本身, 因此只需要一阶导数来构造物理损失函数从而达到导数降阶的目的. 这实际上是借鉴了有限元方法的思想, 不同的是MPINNs利用复杂的非线性插值, 在给定的配置点最小化偏微分方程及其能量形式, 而有限元方法则使用形状函数在单元节点上实现. 训练后的MPINNs具有在无初始数据的情况下求解给定边界值问题的能力, 这通过非均质固体的弹性问题和泊松方程求解(稳态扩散问题)进行了验证. Ren等人^[42]则在MPINNs^[41]的基础上, 同时受到Guo等人^[43]提出的基于迁移学习和物理信息神经网络的深度搭配方法

(deep collocation method, DCM)的启发, 提出了一个评估两种随机组分组成的材料的力学性能的综合计算框架. 该框架首先利用随机场水平切割方法重建相应材料的等效统计微观结构; 然后, 采用MPINNs并引入迁移学习扩展计算框架, 从而使得计算框架能够有效评估各种微观结构和边界条件下的力学性能, 在强非线性场变量等多个数值算例中证明了所提出的PINNs框架的准确性和高泛化能力. 另外, Ning等人^[44]通过运用近场动力学积分-微分方程来避免高阶导数, 建立了近场动力学信息神经网络(peridynamic-informed neural networks, PD-INN). PD-INN的训练采用渐进修正采样法而不需要标注数据, 在非均质板材界面位移算例中表现出与数值模拟非常接近的预测结果.

随着物理信息神经网络在非均质固体中应用的研究越加深入, 遇到的问题越加复杂, 普通的全连接神经网络已经难以获得满意的结果, 部分学者开始运用更加复杂的网络结构模型. 例如, 在非均质固体结构损伤方面, 使用物理信息约束下的循环神经网络(recurrent neural network, RNN)、门控循环单元(gated recurrent unit, GRU)或长短期记忆递归神经网络(long-short term memory, LSTM)较多, 可以发挥RNN/GRU/LSTM在处理时间序列问题上的优势^[45,46]; 在非均质系统的弹性成像方面, 则更多使用卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)或者U-Net结构, 因为CNN/UNet具有众所周知的视觉学习、语义分割的强大能力^[47-49]; 另外, Xu等人^[50]使用基于物理信息的卷积编码器-解码器神经网络(convolutional encoder-decoder neural network)预测非均质多孔介质热传导过程中的温度场和热流场; Hao等人^[51]提出一种新颖的融合物理信息的transformer网络模型(Conv-PhyFormer), 用于对铝合金高精度加工工具进行智能化高精度磨损预测等, 将在后续章节详细探讨.

另外, 值得一提的是, Liu等人^[29]和Rezaei等人^[41]在研究中都提到了使用多个单一输出的独立网络的结构. 已有研究表明, 这比具有多个输出的单一网络在相似任务中表现出更高的精确度^[52]. Ren等人^[53]采用多个单一输出的独立网络的架构, 在混合材料分布的非均质半无限域地震波建模的测试结果中也为这种网络结构的有效性提供了有力证明. 这种多个单一输出的网络结构在形式上与集成学习^[54,55]方法相似, 但二者之间确有不同. 前者是将多个预测目标分配给多个网络, 每个网络只负责专注预测一个目标; 而后者则是训练

多个网络模型, 每个网络模型的预测目标是一致的, 通过综合所有网络的意见获得最后的结果, 利用不同网络模型的多样性和互补性, 降低单个模型的偏差和方差, 获得更加稳健和准确的预测结果, 提高网络整体的泛化性和表达能力. 尤其当输出结果对网络超参数敏感时, 集成学习效果更加突出. 由于非均质系统中未知参数(如渗透性或扩散性)的空间变化性, 可能使得 PINNs 对超参数敏感, 产生训练发散的结果. 特别是在求解逆问题时, 由于解的非唯一性, 单一网络的训练更难稳定收敛. 而借鉴了集成学习形式的物理信息神经网络则可能具有更高的准确性, 产生更合理的结果. Aliakbari 等人^[56]便受集成学习方法的启发, 提出了一种集成物理信息神经网络(ensemble PINN, ePINN)方法, 通过非均质固体的热传导率的案例证明了集成学习方法对网络训练收敛的积极影响, 展现了良好的逆问题预测准确性, 减轻了与解的非唯一性相关的挑战. ePINN 使用并行神经网络集成, 每个子网络用先验知识对未知参数的可能模式和范围进行初始化, 随后将预测的参数输入到主神经网络中, 与变量网络共同通过控制方程和边界条件约束训练. 上述两种方式都有利于提高网络对非均质材料问题的预测精确度, 但代价是会增加网络的训练时间.

1.3 物理信息在神经网络中的其他表现形式

最常见的物理信息神经网络正如 1.1 节所述, 是将物理约束, 包括控制方程和边界、初始条件嵌入到损失函数中约束网络训练, 让神经网络学习物理知识. 1.2 节是在这种形式的基础上对网络结构进行改进以适应非均质材料系统的相关问题. 但实际上嵌入物理信息并非只有通过损失函数这一方式. 许多学者尝试以其他形式将神经网络与物理信息结合, 以解决非均质材料的问题. Jiang 等人^[57]首次将周期均匀化框架和深度神经网络结合, 构建了一种新的热传导非均质材料微观力学理论——物理信息深度均匀化网络(deep homogenization network, DHN). DHN 能以最小化强形式稳态热传导控制微分方程的残差形式给出的损失函数来获得代表单元的波动温度场; 构建周期均匀化层和随后的多个残差网络层, 保证单元格边缘温度和温度梯度的周期边界条件得到精确满足. 另外, 不同于有限元模拟在温度梯度分布计算时会出现不连续间断现象, DHN 的预测结果表现出显著的连续性. Wu 等人^[58]进一步证明 DHN^[57]也能有效预测二维和三维周期性非

均质材料的局部应力场和均匀模量.

Liu 等人^[59]提出的深度材料网络(deep material network, DMN)是一种基于代表性体积元均匀化理论并借鉴二叉树结构的网络模型, 能用于多尺度非均质材料的建模, 并在任意材料和几何非线性的一般三维问题^[60]中展现出优势. DMN 是微观力学计算的替代模型, 通过输入每种组分的刚度, 获得相应的整体表现刚度^[61]. DMN 仅在线弹性数据集上训练, 却能在非线性和非弹性问题上有着非常高的精度, Gajek 等人^[62]从理论上揭示了这是因为应变率的一阶导数, 非均质材料的有效非弹性行为是由线弹性局部化决定的. 随后又有研究论证^[62,63], DMN 从材料内组分继承热力学一致性和应力-应变单调性并满足 Hill-Mandel 能量一致条件. 不同于 Liu 等人^[59,60]提出的 DMN 通过固定非均质材料层合板的层压方向并间次旋转的方式模拟, Gajek 等人^[62,64]提出的是可变层压方向的无旋转 DMN, 而 Noels 等人^[63,65]则不依赖于非均质层压板细观力学理论, 而是受有限元方法启发, 从离散的材料节点及其相互作用的观点出发, 提出了更一般化的 DMN 构建; Dey 等人^[61]引入了一种基于替代材料模型的新策略, 该策略与真实物理模型共享主要的非线性效应. Li^[66]则基于 DMN 提出了一种新的基于细观力学的参数深度材料网络(micromechanics-informed parametric deep material network, MIpDMN)结构, 使得 DMN 可以预测除力学特性外的其他物理特性. MIpDMN 使用单层前馈神经网络来解释 DMN 拟合参数对微观结构参数的依赖性, 并在网络的结构和输出上都规定了微观结构的力学约束.

常见的物理信息神经网络将物理信息视为神经网络的训练约束以规范、解释神经网络, 物理信息被视为神经网络的组成部分; 而有部分学者将神经网络视为一个强大的非线性拟合器, 用作理论方法中的参数拟合. 例如, Pishro 等人^[67]将 PINNs 的非线性拟合能力用于参数反演, 提高并行微元系统理论模型的精度; Ning 等人^[68]则利用神经网络在处理不连续问题上的良好表现, 用作满足最小势能原理的试函数来确定初始位移.

还有部分学者认为, 研究过程中通过各种手段, 包括理论方法、有限元模拟和实验, 从研究对象或过程的模拟和再现中获得的数据, 自然包含描述研究对象的物理信息, 而神经网络在训练时逼近数据集结果的过程中自然也就受到了物理信息的约束. 从这个角度看待的物理信息神经网络的应用案例并不少见, 例如

Mianroodi等人^[69]使用CNN从纳米多孔非均质材料的结构图像和分子静力学计算的相应弹性常数张量数据集中学习本构定律, 构建了无损多尺度本构关系模型; Wei等人^[70]基于非均质代表体积单元微观结构图像使用晶格粒子法模拟材料线弹性阶段位移场, 同微观结构图像一起用于完全卷积网络的训练, 预测非线性裂缝扩展模式等。

总之, 本节介绍的方法并非属于最常见的PINNs方法的拓展, 而是通过其他形式将物理信息与神经网络进行结合。这些方法在解决非均质材料某些具体领域的问题中发挥着重要作用, 有着出色的准确度和适用性。我们在本节中对这些方法做出简要罗列和说明以供读者参考。

2 PINNs在非均质材料中的应用

物理信息神经网络引入物理定律约束网络训练的特点, 使得它成为能被部分控制、理解的“灰盒”, 而神经网络中广泛使用的自动微分技术^[22]契合以偏微分方程微分形式描述的物理现象, 因而随着神经网络和深度学习的发展在众多领域中容易被接受, 逐渐有了广泛的应用。在非均质材料领域中, 物理信息神经网络也得到了非常多的关注。下文以纤维/颗粒增强复合材料、合金微结构、混凝土、弹性成像等为例, 介绍PINNs在非均质材料系统中的具体应用情况。各类具体应用以及对应的参考文献如图3中所示。

2.1 PINNs在纤维/颗粒增强复合材料中的应用

纤维/颗粒增强复合材料指根据特定需求将增强纤维/颗粒材料和基体材料优化组合而成的非均质材料, 展现出在某方面比单一材料更加突出的能力。如今, 纤维/颗粒增强复合材料已经在航空航天、医学、建筑交通等许多领域发挥了巨大作用, 取代了传统的单一材料。纤维/颗粒增强复合材料从设计生产到使用涉及许多物理过程, 有学者将PINNs引入纤维/颗粒增强复合材料, 展现了PINNs的独特优势。

在纤维/颗粒增强复合材料的热力学问题方面, 许多学者进行了PINNs的应用研究。Niaki等人^[71]解耦热传导-树脂固化耦合系统, 将对应的物理约束分别添加到两个独立的子网络的损失函数中, 交替顺序训练两个网络以适应模拟纤维增强复合材料在高压环境中的热化学固化演变过程。Meng等人^[72]则受到系统解耦方法和顺序训练算法的启发^[71], 提出了一种新的物理信

息傅里叶神经算子框架(physics-informed Fourier neural operator, PIFNO), 用于分析碳纤维增强热固性复合材料热化学固化过程。该框架以函数对函数的形式直接施加全局物理约束, 构建固化周期与温度或固化程度的解算子映射。Gajek等人^[73]运用深度材料网络并结合有限元方法用于纤维增强复合材料的完全耦合热力学宏观双尺度模拟。Harandi等人^[74]利用MPINNs^[41]的导数降阶带来的精度优势求解非均质固体静态热-力耦合方程组, 并讨论了顺序训练算法^[71,75]和完全耦合训练算法的不同。Lu^[76]将微分求积法应用于基于三阶剪切变形理论的运动方程得到的屈曲响应数据实现向网络内引入物理信息, 分析多尺度混杂复合材料双弯曲板的湿热力学屈曲响应。其中多尺度混杂复合材料是指在宏观尺度和纳米尺度都考虑了增强材料已达到各自增益的混杂复合材料^[77]。Shen等人^[78]则根据Helling-Reissner变分原理, 将层内位移应力平衡方程弱形式和层间连续性条件引入损失函数中, 分析不同边界条件下纤维复合材料层合板的热弹性, 同时降低了计算自由度。

纤维/颗粒增强复合材料的损伤问题则是另一个获得许多学者关注的话题。Liu利用DMN^[59]分别进行纤维增强复合材料界面脱黏损伤分析^[79]以及颗粒增强复合材料裂纹萌生和演化分析^[80]。Tao等人^[81]创建了一种通过间断拉伸疲劳试验测得的导波信息表征纤维增强聚合物层压板疲劳损伤的无监督深度学习框架。该框架由用于波形特征提取的卷积自动编码器(convolutional autoencoder, CAE)、用于疲劳载荷状态识别的RNN和用于对提取的波形特征的演化行为建模的神经微分方程模块组成。Borkowski等人^[45]也运用RNN, 并在损失函数中添加线弹性卸载的物理约束, 开发了一个PINNs代理模型, 用于模拟由基体损伤驱动的编织陶瓷基复合材料的多尺度非线性本构行为。Idrissi等人^[82]则提出了一种多尺度热力学信息神经网络(multiscale thermodynamics informed neural networks, MuTINN)宏观代理模型, 用于解释编织复合材料的各向异性纱线损伤和弹塑性聚合物基体行为。Ciampaglia等人^[83]则基于能量守恒定律和碰撞控制方程, 应用PINNs预测折纸复合材料碰撞管的破碎响应, 开发折纸管的快速优化设计方法。

纤维/颗粒增强复合材料的工程制造优化问题与复合材料产品的最终性能关系紧密, 部分学者尝试使用PINNs模拟生产工序, 优化生产过程, 解决生产过程中

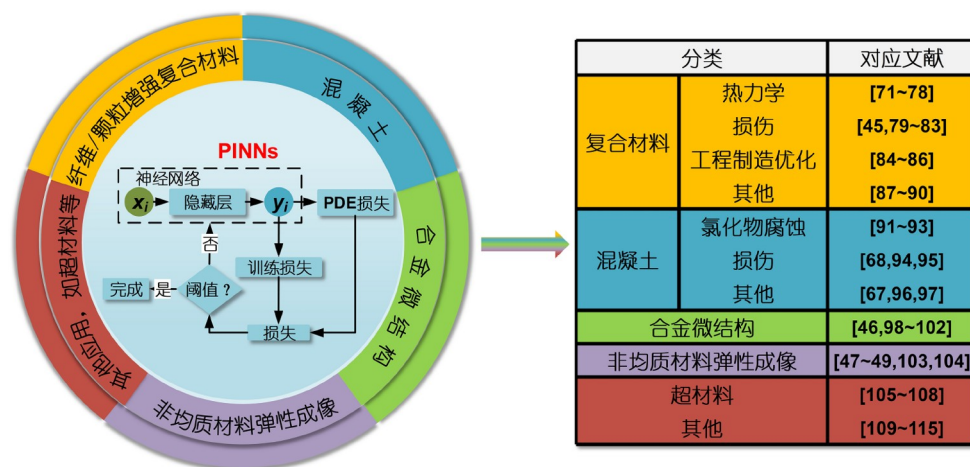


图 3 (网络版彩色)PINNs在非均质材料中的应用分类及对应文献

Figure 3 (Color online) Classification of PINNs for applications in heterogeneous materials and corresponding literature

的一些关键问题。Ghauch^[84]基于第一性物理原理构建PINNs代理模型,研究纤维增强复合材料轻量化制造的整体优化问题,最多能在70维的参数空间中发现最优向量,实现纤维/颗粒增强复合材料的设计优化。Würth等人^[85]使用PINNs进行纤维增强复合材料的热化学制造工艺优化,同时对材料设计参数和加工工艺参数进行优化。该方法具有比传统方法快500倍的优化速度。林静明等人^[86]则将转弯半径、纤维角偏差以及轨迹间距等多目标优化问题转换成目标域内的泛函优化问题,构建PINNs探索纤维增强复合材料自动铺设最优轨迹规划。该方法能兼顾轨迹的方向性、可铺性以及间隙质量,有效提高纤维/颗粒增强复合材料构件的制造效率和质量。

除了上述应用, PINNs在纤维/颗粒增强复合材料其他问题方面也有良好表现,如求解纤维增强复合材料弹性变形及其不确定性量化^[87]、多尺度杂化纳米复合材料微板结构的波色散研究^[88]、结合迁移学习构建多保真物理信息神经网络(multi-fidelity physics informed neural network, mfPINN)探究碳纤维增强聚合物复合材料板受撞击位置的声发射源定位^[89]、DMN融合有限元建模方法搭建短纤维增强复合材料多尺度并行仿真方法^[90]等。

2.2 PINNs在混凝土中的应用

混凝土是指由水泥作为胶凝材料,砂石作为集料,与水以及其他外加剂和掺合料按比例制成的复合材料,其内部组分具有高度随机的非均匀分布的特点,是现

代土木工程最不可或缺的材料,因此通过研究找到提高混凝土材料结构耐久性、安全性的方法非常具有实际价值。氯化物的腐蚀是钢筋混凝土结构劣化的重要原因之一。氯化物在混凝土结构中的非线性扩散行为以及基于菲克第二定律描述的氯化物扩散控制方程适合使用PINNs进行模拟,许多学者对此进行了研究以期获得更有效合理的耐久性设计。Wan等人^[91]基于菲克第二定律或修正菲克第二定律描述的氯化物扩散控制方程,使用PINNs求解氯化物传输方程,验证了在考虑Langmuir结合或Freundlich结合的非稳态浸没试验和加速氯化物迁移的试验中可以用于识别氯化物扩散系数,也证明了PINNs抵抗数据噪音的稳健性和优异的泛化性能。Duan等人^[92]使用物理约束深度神经网络来识别混凝土的氯离子扩散系数以及模拟混凝土中氯离子随时间的未来传输分布和侵蚀过程。Shaban等人^[93]则在其基础上^[92]将预测氯离子在混凝土中的扩散系数以及浓度的时空域分布问题扩展到二维层面,并用实验案例进行了验证。

部分学者尝试将PINNs用于混凝土断裂损伤方面的研究。Miele等人^[94]使用相关的非线性动力学模型生成数据,随后使用人工神经网络从训练数据中学习蕴含的物理信息,用于混凝土结构振动声调制损伤定位。随后进一步向神经网络中引入迁移学习和多保真的概念^[95],以混凝土板的内部隐藏裂缝识别为例,展示了构建的物理知情的机器学习模型(physics-informed machine learning, PIML)在结构健康监测方面的潜力。Ning等人^[68]则基于键合的近场动力学积分微分方程,

建立了用于准脆性板裂纹萌生和扩展行为模拟的近场动力学能量约束神经网络(peridynamic energy-constrained PINNs, PD-ENN), 将神经网络作为断裂解域内满足最小势能原理的试函数, 通过优化全局网络参数, 使总势能最小来确定板的初始位移。

除了氯离子扩散模拟和结构损伤判断, PINNs在混凝土研究领域还有其他应用。Pishro等人^[67]将PINNs用于提高求解超高性能混凝土与钢筋之间局部黏结应力-滑移关系的并行微元系统理论模型的精度。Zhang等人^[96]提出了基于流变本构偏微分方程的Rheology-Net框架模型, 用于预测新拌混凝土等胶凝材料的触变行为, 建立了宏观黏性流动行为与微观结构变化的联系。Yamaguchi等人^[97]提出了基于钢筋混凝土桥墩动态响应控制方程和PINNs的全非线性弹簧多自由度损伤识别算法, 揭示了弹性刚度和延性系数沿钢筋混凝土桥墩高度的分布及其退化情况, 用于桥墩抗震分析。

2.3 PINNs在合金微结构中的应用

合金在宏观层面被视为一种均质材料, 但在微观层面可以认为是非均匀结构。目前已经有成熟的理论体系支撑PINNs在这一方面的进一步研究。Kumar等人^[98]使用基于PINNs的数值反演方法计算伪二元扩散耦合系统中合金组分的扩散系数。Hasan等人^[46]以校准Ti-7Al合金的晶体塑性参数为例, 将PINNs应用于微观结构敏感材料的逆向设计。Liu等人^[99]基于任意曲率表面的离散拉普拉斯算子来捕捉非局部壳体结构中的循环软化。通过纳入塑性应变速率的二阶梯度, 从模拟壳体微观结构的代表体积元生成的应力应变数据中提取屈服面及其演变的特征输入人工神经网络, 训练预测非均质屈服面及其演变。经过训练的网络模型可以捕捉马辛效应, 该效应是载荷反转时循环软化的特征。Ciampaglia等人^[100]则采用物理信息神经网络预测缺陷和微观结构对增材制造AlSi10Mg合金部件的疲劳强度的影响。运用两个网络分支分别训练预测缺陷和微观结构, 在随后的自定义层中计算与疲劳强度之间的先验关系公式, 计算结果传递给后续的可训练层, 最终预测疲劳强度。该方法可以同时分析工艺参数和疲劳响应之间的关系。

部分学者尝试用PINNs解决合金生产过程中的难题, 优化合金的制造过程, 并取得了一些成果。其中微观结构相分离和相变问题就是典型案例。Cooper等人^[101]提出了一种误差感知PINNs集成学习方法用于研

究合金微观结构相分离问题。首先根据Allen-Cahn偏微分方程和相应的边界条件对3个初始化参数不同且互相独立的PINNs的训练过程进行约束, 随后通过反误差加权平均将3个网络的输出合并。集成学习可以有效解决高误差“热点”问题, 实现误差均质化, 提高PINNs的预测准确度。Chen等人^[102]提出了硬约束宽体物理信息神经网络(hard-constraint wide-body physics-informed neural network, HWPINN)对合金的相变问题进行研究。HWPINN添加了一个副网络, 每一层的计算结果同主网络的同层计算结果共同汇入主网络的下一层。通过增加副网络这一宽体结构增强了网络的预测有效性。另外, HWPINN在损失函数中以硬约束取代传统的边界或初始条件约束。

2.4 PINN在非均质材料弹性成像中的应用

还有部分学者将PINNs应用于弹性成像。弹性成像是一种在不同载荷条件下, 利用变形和力测量来重建物体弹性分布的成像技术。但目前的弹性成像技术应用于非均质材料时具有横向分辨率远低于轴向分辨率, 依赖于材料不可压缩的假设等不足之处。Yin等人^[103]提出了基于剪切波弹性成像(shear wave elastography, SWE)和PINNs的深度神经网络方法——SWENet。在SWENet损失函数中编码非均质材料弹性特性的空间变化控制方程; 另外, 从波运动的快照中同时推断剪切波涉及的相关区域内的弹性特性, 并将预测误差也编入损失函数中。与传统的SWE方法相比, SWENet能利用更多的波运动特征, 并能在逆分析中无缝集成多源数据。由基体和夹杂物组成的软复合材料, 无论夹杂物规则还是不规则几何形状, 其剪切模量都能被SWENet准确识别。Chen等人^[47]则提出了结合弹性理论和深度学习方法的ElastNet, 可以在没有测量的情况下学习区域的可能弹性分布, 并生成任意分辨率的弹性图像。ElastNet中神经网络主要用于预测弹性模量场, 而在随后在另一项研究中, Chen等人^[48]在ElastNet^[47]基础上添加了另一个深度神经网络模型用于预测应变场, 再根据本构关系计算应力场。应力场通过卷积层传递用以计算残余力。训练过程通过静态平衡方程进行约束, 以最小化残余应力, 随后使用反向传播更新预测的横向位移和杨氏模量。该方法允许去除材料不可压缩的假设, 从而能够同时重建弹性模量和泊松比场, 并且可以减轻“蛋壳”效应(刚性材料的存在阻止了软材料中应变的产生)带来的潜在误差。Kamali等人^[104]则运用PINNs,

并结合应变数据、法向应力边界条件、本构方程和平衡方程,同时预测弹性模量和泊松比场.包含刚性圆形夹杂物的矩形域有限元模拟、嵌入硬质夹杂物的水凝胶样品、代表人脑切片的不同灰质和白质区域以及复杂几何特征的矩形水凝胶样品三个案例证明了PINNs准确地捕捉了力学性能和组织界面的空间分布.随后,Kamali等人^[49]受文献^[48,104]启发又使用U-Net网络结构开发了弹性反演神经网络模型EI-UNet. EI-UNet能综合应变图、法向应力边界条件和域物理信息推断力学参数的空间分布.

2.5 PINN在其他非均质材料中的应用

除了上述较为常见的应用对象之外,许多学者还将PINNs用于解决其他非均质材料系统问题.比如非均质的超材料方面,就有学者尝试使用PINNs.超材料是一类因其精密的几何结构以及结构尺寸而使光、电磁波改变其通常性质的人造材料.Chen等人^[105]通过将亥姆霍兹方程加入损失函数来构造PINNs,解决涉及多相互作用的纳米结构以及多组分纳米颗粒的光子超材料的逆散射问题,成功应用于检索光子超材料有限尺寸散射系统的有效介电常数.随后,另一项研究^[106]通过向损失函数中添加全矢量麦克斯韦方程组,从近场数据中反演未知散射物体在谐振区的复介电常数和磁导率的空间分布,并证明了在平面波和点源激发下都能很好地收敛到真实的纳米结构材料参数.他们还进一步开发了具有可训练损失权值的自适应PINNs,能极大提高材料逆重构精度,以及从近场数据中检索三维未知物体的空间相关介电常数.Chen等人^[107]受Chen等人^[106]将麦克斯韦方程组运用于神经网络的启发,开发了一种混合数据和物理信息的卷积神经网络WaveY-Net,能以高速度和高精度预测周期性、高介电对比度的硅-二氧化硅复合纳米光子结构的电磁场分布,加速衍射光子器件的局部和全局自由形状优化.Ghosh等人^[108]则在深度全连接神经网络中添加LSTM和回归层,并将麦克斯韦方程组解的分析方程作为物理信息添加进回归层中,用于分析空间周期复合材料的光学响应,以及一、二维结构复合材料的设计优化.

部分学者还在压电半导体^[109]、聚氨酯相变泡沫复合材料^[110]、高速氧气燃料喷涂NiCr-Cr₃C₂涂层性能^[111]、非均质反应堆中子扩散问题^[112]、非均质系统水力渗透^[113~115]等领域对PINNs的应用进行了积极探索,展现了PINNs的独特优势.

3 总结与展望

PINNs同时具有神经网络的非线性函数逼近能力和一定程度上的物理解释,可以视为一种无网格方法,能应对传统方法难以应对的维数灾难问题,能在有效降低网络结构的复杂度和对数据要求的情况下增强泛化能力,减少过拟合现象.本文介绍了PINNs在非均质材料系统中的应用.首先讲述了PINNs的基本计算原理,并总结了PINNs在面对非均质材料问题的特点方面进行的改进,包括根据非均质材料多种组成成分的特点运用域分解的方法,在损失函数中额外考虑边界相容条件;运用导数降阶方法应对描述问题的方程是高阶偏微分方程时导致的网络训练精度不高的问题;物理信息与大模型结合应对实际中越加复杂的物理问题;还有深度材料网络等其他类型的物理神经网络.随后介绍了PINNs在非均质材料中的实际应用,其中以纤维/颗粒增强复合材料、混凝土、合金微结构和非均质材料弹性成像等方面的应用最为广泛,并且应用的问题主要集中在热力学问题、材料属性方面(强度、疲劳损伤等),因为这些方面的研究已经积累了大量的偏微分方程理论模型.

虽然迄今为止PINNs在非均质材料方面的应用已经涌现了大量的研究成果,但是PINNs作为相对其他传统网络模型而言较为“年轻”的网络,仍然有许多问题亟待解决.

(1) PINNs的设计思路都是根据具体的问题进行具体设计,不同的偏微分方程就需要构造不同的PINNs进行解决,而且依赖于对于具体问题的先验知识,对网络进行相应的改进才能获得更优秀的表现,使得PINNs虽然对相似问题的泛化性很好,但是不同类型的问题则无法直接迁移使用,这一定程度上限制了PINNs的推广.能否开发一个通用的PINNs框架,使得对于任意的偏微分方程都可以在该框架下得到解决,是需要继续探讨的问题.

(2) 现今PINNs的应用范围主要集中在应用成熟的非均质材料系统,而对于新兴的材料,例如超材料、纳米材料等则应用成果相对较少,一方面可能需要相关理论的发展,另一方面也可以针对新材料的新特点构建新型网络结构.

(3) 目前在非均质材料问题上对PINNs的训练主要还是使用单一来源的数据,但也有学者使用多源数据对PINNs进行训练.可以开展对PINNs多源数据训练的研究,优化PINNs网络结构,在降低数据获取成本、加

速收敛、提高预测精度等方面进一步改善PINNs。
总之, PINNs在非均质材料中的应用已经取得了许

多出色的成果, 但是还有许多方向可以进行深入研究,
需要PINNs在实际工程应用中进行不断地检验和革新。

参考文献

- Ames W F. Numerical Methods for Partial Differential Equations. San Diego: Academic Press, 2014
- Farabet C, Couprie C, Najman L, et al. Learning hierarchical features for scene labeling. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2012, 35: 1915–1929
- Tompson J J, Jain A, LeCun Y, et al. Joint training of a convolutional network and a graphical model for human pose estimation. *Adv Neural Inf Process Syst*, 2014, 27: 1799–1807
- Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Commun ACM*, 2017, 60: 84–90
- Jin C Z, Qi D L, He Y, et al. Realizing high-fidelity image reconstruction for compressed ultrafast photography with an untrained self-supervised neural network-based algorithm (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2024, 69: 2765–2776 [金诚攀, 齐大龙, 何宇, 等. 基于免训练自监督式神经网络算法实现压缩超快成像高保真图像重构. *科学通报*, 2024, 69: 2765–2776]
- Collobert R, Weston J, Bottou L, et al. Natural language processing (almost) from scratch. *J Mach Learn Res*, 2011, 12: 2493–2537
- Li H. Deep learning for natural language processing: Advantages and challenges. *Natl Sci Rev*, 2018, 5: 24–26
- Bi K, Xie L, Zhang H, et al. Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks. *Nature*, 2023, 619: 533–538
- Leung M K K, Xiong H Y, Lee L J, et al. Deep learning of the tissue-regulated splicing code. *Bioinformatics*, 2014, 30: i121–i129
- Xiong H Y, Alipanahi B, Lee L J, et al. The human splicing code reveals new insights into the genetic determinants of disease. *Science*, 2015, 347: 1254806
- Alipanahi B, Delong A, Weirauch M T, et al. Predicting the sequence specificities of DNA- and RNA-binding proteins by deep learning. *Nat Biotechnol*, 2015, 33: 831–838
- LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*, 2015, 521: 436–444
- Li X, Liu Z, Cui S, et al. Predicting the effective mechanical property of heterogeneous materials by image based modeling and deep learning. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2019, 347: 735–753
- Hoq E, Aljarrah O, Li J, et al. Data-driven methods for stress field predictions in random heterogeneous materials. *Eng Appl Artif Intelligence*, 2023, 123: 106267
- Ye S, Li M, Zhang K, et al. Extracting the properties of constituent phases from the overall response of composites: A deep neural network method. *Composite Struct*, 2022, 293: 115707
- Lagaris I E, Likas A, Fotiadis D I. Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations. *IEEE Trans Neural Netw*, 1998, 9: 987–1000
- Lagaris I E, Likas A C, Papageorgiou D G. Neural-network methods for boundary value problems with irregular boundaries. *IEEE Trans Neural Netw*, 2000, 11: 1041–1049
- Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics informed deep learning (Part I): Data-driven solutions of nonlinear partial differential equations. 2017, arXiv: [171110561](https://arxiv.org/abs/1711.10561)
- Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics informed deep learning (Part II): Data-driven discovery of nonlinear partial differential equations. 2017, arXiv: [171110566](https://arxiv.org/abs/171110566)
- Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *J Comput Phys*, 2019, 378: 686–707
- Willard J, Jia X, Xu S, et al. Integrating scientific knowledge with machine learning for engineering and environmental systems. *ACM Comput Surv*, 2022, 55: 1–37
- Baydin A G, Pearlmutter B A, Radul A A, et al. Automatic differentiation in machine learning: A survey. *J Mach Learn Res*, 2018, 18: 1–43
- Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning. *Nat Rev Phys*, 2021, 3: 422–440
- Huhn Q A, Tano M E, Ragusa J C. Physics-informed neural network with Fourier features for radiation transport in heterogeneous media. *Nucl Sci Eng*, 2023, 197: 2484–2497
- Wang S, Wang H, Perdikaris P. On the eigenvector bias of Fourier feature networks: From regression to solving multi-scale PDEs with physics-informed neural networks. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 384: 113938
- Mao Z, Jagtap A D, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks for high-speed flows. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2020, 360: 112789
- Kharazmi E, Zhang Z, Karniadakis G E. Variational physics-informed neural networks for solving partial differential equations. 2019, arXiv:

191200873

- 28 Kharazmi E, Zhang Z, Karniadakis G E M. hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 374: 113547
- 29 Liu C, Wu H A. A variational formulation of physics-informed neural network for the applications of homogeneous and heterogeneous material properties identification. *Int J Appl Mech*, 2023, 15: 2350065
- 30 Jagtap A D, Kharazmi E, Karniadakis G E. Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: Applications to forward and inverse problems. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2020, 365: 113028
- 31 Henkes A, Wessels H, Mahnen R. Physics informed neural networks for continuum micromechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2022, 393: 114790
- 32 Karniadakis A D J G E. Extended physics-informed neural networks (XPINNs): A generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations. *CiCP*, 2020, 28: 2002–2041
- 33 Papadopoulos L, Bakalakos S, Nikolopoulos S, et al. A computational framework for the indirect estimation of interface thermal resistance of composite materials using XPINNs. *Int J Heat Mass Transfer*, 2023, 200: 123420
- 34 Wang Y, Sun J, Li W, et al. CENN: Conservative energy method based on neural networks with subdomains for solving variational problems involving heterogeneous and complex geometries. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2022, 400: 115491
- 35 Manikkan S, Srinivasan B. Transfer physics informed neural network: A new framework for distributed physics informed neural networks via parameter sharing. *Eng Comput*, 2023, 39: 2961–2988
- 36 Diao Y, Yang J, Zhang Y, et al. Solving multi-material problems in solid mechanics using physics-informed neural networks based on domain decomposition technology. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2023, 413: 116120
- 37 Dwivedi V, Parashar N, Srinivasan B. Distributed learning machines for solving forward and inverse problems in partial differential equations. *Neurocomputing*, 2021, 420: 299–316
- 38 Yadav G K, Natarajan S, Srinivasan B. Distributed PINN for linear elasticity—A unified approach for smooth, singular, compressible and incompressible media. *Int J Comput Methods*, 2022, 19: 2142008
- 39 Zhang B, Wang F, Qiu L. Multi-domain physics-informed neural networks for solving transient heat conduction problems in multilayer materials. *J Appl Phys*, 2023, 133: 245103
- 40 Sun J, Liu Y, Wang Y, et al. BINN: A deep learning approach for computational mechanics problems based on boundary integral equations. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2023, 410: 116012
- 41 Rezaei S, Harandi A, Moeineddin A, et al. A mixed formulation for physics-informed neural networks as a potential solver for engineering problems in heterogeneous domains: Comparison with finite element method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2022, 401: 115616
- 42 Ren X, Lyu X. Mixed form based physics-informed neural networks for performance evaluation of two-phase random materials. *Eng Appl Artif Intelligence*, 2024, 127: 107250
- 43 Guo H, Zhuang X, Chen P, et al. Analysis of three-dimensional potential problems in non-homogeneous media with physics-informed deep collocation method using material transfer learning and sensitivity analysis. *Eng Comput*, 2022, 38: 5423–5444
- 44 Ning L, Cai Z, Dong H, et al. A peridynamic-informed neural network for continuum elastic displacement characterization. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2023, 407: 115909
- 45 Borkowski L, Skinner T, Chattopadhyay A. Woven ceramic matrix composite surrogate model based on physics-informed recurrent neural network. *Composite Struct*, 2023, 305: 116455
- 46 Hasan M, Ender Eger Z, Senthilnathan A, et al. Microstructure-sensitive deformation modeling and materials design with physics-informed neural networks. *AIAA J*, 2024, 62: 1864–1874
- 47 Chen C T, Gu G X. Learning hidden elasticity with deep neural networks. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2021, 118: e2102721118
- 48 Chen C, Gu G X. Physics-informed deep-learning for elasticity: Forward, inverse, and mixed problems. *Adv Sci*, 2023, 10: 2300439
- 49 Kamali A, Laksari K. Physics-informed UNets for discovering hidden elasticity in heterogeneous materials. *J Mech Behav Biomed Mater*, 2024, 150: 106228
- 50 Xu J, Wei H, Bao H. Physics-informed neural networks for studying heat transfer in porous media. *Int J Heat Mass Transfer*, 2023, 217: 124671
- 51 Hao C, Mao X, Ma T, et al. A novel deep learning method with partly explainable: Intelligent milling tool wear prediction model based on transformer informed physics. *Adv Eng Inf*, 2023, 57: 102106
- 52 Haghighat E, Raissi M, Moure A, et al. A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 379: 113741
- 53 Ren P, Rao C, Chen S, et al. SeismicNet: Physics-informed neural networks for seismic wave modeling in semi-infinite domain. *Comput Phys Commun*, 2024, 295: 109010
- 54 Seni G, Elder J. Ensemble Methods in Data Mining: Improving Accuracy through Combining Predictions. San Rafael: Morgan & Claypool

- Publishers, 2010
- 55 Hastie T, Tibshirani R, Friedman J H, et al. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. New York: Springer, 2009
 - 56 Aliakbari M, Soltany Sadrabadi M, Vadasz P, et al. Ensemble physics informed neural networks: A framework to improve inverse transport modeling in heterogeneous domains. *Phys Fluids*, 2023, 35: 053616
 - 57 Jiang J, Wu J, Chen Q, et al. Physically informed deep homogenization neural network for unidirectional multiphase/multi-inclusion thermoconductive composites. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2023, 409: 115972
 - 58 Wu J, Jiang J, Chen Q, et al. Deep homogenization networks for elastic heterogeneous materials with two- and three-dimensional periodicity. *Int J Solids Struct*, 2023, 284: 112521
 - 59 Liu Z, Wu C T, Koishi M. A deep material network for multiscale topology learning and accelerated nonlinear modeling of heterogeneous materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2019, 345: 1138–1168
 - 60 Liu Z, Wu C T. Exploring the 3D architectures of deep material network in data-driven multiscale mechanics. *J Mech Phys Solids*, 2019, 127: 20–46
 - 61 Dey A P, Welschinger F, Schneider M, et al. Training deep material networks to reproduce creep loading of short fiber-reinforced thermoplastics with an inelastically-informed strategy. *Arch Appl Mech*, 2022, 92: 2733–2755
 - 62 Gajek S, Schneider M, Böhlke T. On the micromechanics of deep material networks. *J Mech Phys Solids*, 2020, 142: 103984
 - 63 Nguyen V D, Noels L. Micromechanics-based material networks revisited from the interaction viewpoint; robust and efficient implementation for multi-phase composites. *Eur J Mech-A Solids*, 2022, 91: 104384
 - 64 Gajek S, Schneider M, Böhlke T. An FE–DMN method for the multiscale analysis of short fiber reinforced plastic components. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 384: 113952
 - 65 Nguyen V D, Noels L. Interaction-based material network: A general framework for (porous) microstructured materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2022, 389: 114300
 - 66 Li T. Micromechanics-informed parametric deep material network for physics behavior prediction of heterogeneous materials with a varying morphology. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2024, 419: 116687
 - 67 Pishro A A, Zhang Z, Amini Pishro M, et al. UHPC-PINN-parallel micro element system for the local bond stress–slip model subjected to monotonic loading. *Structures*, 2022, 46: 570–597
 - 68 Ning L, Cai Z, Dong H, et al. Physics-informed neural network frameworks for crack simulation based on minimized peridynamic potential energy. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2023, 417: 116430
 - 69 Mianroodi J R, Rezaei S, Siboni N H, et al. Lossless multi-scale constitutive elastic relations with artificial intelligence. *npj Comput Mater*, 2022, 8: 67
 - 70 Wei H, Yao H, Pang Y, et al. Fracture pattern prediction with random microstructure using a physics-informed deep neural networks. *Eng Fract Mech*, 2022, 268: 108497
 - 71 Niaki S A, Haghighat E, Campbell T, et al. Physics-informed neural network for modelling the thermochemical curing process of composite-tool systems during manufacture. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 384: 113959
 - 72 Meng Q, Li Y, Liu X, et al. A novel physics-informed neural operator for thermochemical curing analysis of carbon-fibre-reinforced thermosetting composites. *Composite Struct*, 2023, 321: 117197
 - 73 Gajek S, Schneider M, Böhlke T. An FE–DMN method for the multiscale analysis of thermomechanical composites. *Comput Mech*, 2022, 69: 1087–1113
 - 74 Harandi A, Moeineddin A, Kaliske M, et al. Mixed formulation of physics-informed neural networks for thermo-mechanically coupled systems and heterogeneous domains. *Numer Meth Eng*, 2024, 125: e7388
 - 75 Amini D, Haghighat E, Juanes R. Physics-informed neural network solution of thermo–hydro–mechanical processes in porous media. *J Eng Mech*, 2022, 148: 04022070
 - 76 Lihua L. Simulation physics-informed deep neural network by adaptive Adam optimization method to perform a comparative study of the system. *Eng Comput*, 2022, 38: 1111–1130
 - 77 Safarpour M, Rahimi A, Noormohammadi Arani O, et al. Frequency characteristics of multiscale hybrid nanocomposite annular plate based on a Halpin–Tsai homogenization model with the aid of GDQM. *Appl Sci*, 2020, 10: 1412
 - 78 Shen Y, Han Z, Liang Y, et al. Mesh reduction methods for thermoelasticity of laminated composite structures: Study on the B-spline based state space finite element method and physics-informed neural networks. *Eng Anal Bound Elem*, 2023, 156: 475–487
 - 79 Liu Z. Deep material network with cohesive layers: Multi-stage training and interfacial failure analysis. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2020, 363: 112913
 - 80 Liu Z. Cell division in deep material networks applied to multiscale strain localization modeling. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 384:

113914

- 81 Tao C, Zhang C, Ji H, et al. Fatigue damage characterization for composite laminates using deep learning and laser ultrasonic. *Compos Part B-Eng*, 2021, 216: 108816
- 82 El Fallaki Idrissi M, Praud F, Meraghni F, et al. Multiscale Thermodynamics-Informed Neural Networks (MuTINN) towards fast and frugal inelastic computation of woven composite structures. *J Mech Phys Solids*, 2024, 186: 105604
- 83 Ciampaglia A, Fiumarella D, Boursier Niutta C, et al. Physics based data driven method for the crashworthiness design of origami composite tubes. *Int J Mech Mater Des*, 2024, 20: 445–462
- 84 Ghauch Z G. Comprehensive surrogate-based optimization of lightweight composite manufacturing. *AIAA J*, 2022, 60: 4352–4366
- 85 Würth T, Krauß C, Zimmerling C, et al. Physics-informed neural networks for data-free surrogate modelling and engineering optimization—An example from composite manufacturing. *Mater Des*, 2023, 231: 112034
- 86 Lin J M, Xu K. Automated fiber placement path planning for complex surfaces via physics-informed neural network (in Chinese). *J Nanjing U Aeronaut Astronautics*, 2023, 55: 914–923 [林静明, 许可. 基于PINN的复合材料自动铺放轨迹整体规划. *南京航空航天大学学报*, 2023, 55: 914–923]
- 87 Bharadwaja B V S S, Nabian M A, Sharma B, et al. Physics-informed machine learning and uncertainty quantification for mechanics of heterogeneous materials. *Integr Mater Manuf Innov*, 2022, 11: 607–627
- 88 Wei X. On the wave dispersion of a multi-scale hybrid nanocomposite microstructure via deep neural network technique. *J Vib Control*, 2024, 30: 1872–1888
- 89 Kalimullah N M M, Shelke A, Habib A. A probabilistic framework for source localization in anisotropic composite using transfer learning based multi-fidelity physics informed neural network (mfPINN). *Mech Syst Signal Processing*, 2023, 197: 110360
- 90 Liu Z, Wei H, Huang T, et al. Intelligent multiscale simulation based on process-guided composite database. 2020, arXiv: 200309491
- 91 Wan Y, Zheng W, Wang Y. Identification of chloride diffusion coefficient in concrete using physics-informed neural networks. *Construction Building Mater*, 2023, 393: 132049
- 92 Duan K, Cao S, Zou Z, et al. Revealing the nature of concrete materials using soft computing models. *J Building Eng*, 2022, 59: 105148
- 93 Shaban W M, Elbaz K, Zhou A, et al. Physics-informed deep neural network for modeling the chloride diffusion in concrete. *Eng Appl Artif Intelligence*, 2023, 125: 106691
- 94 Miele S, Karve P M, Mahadevan S, et al. Diagnosis of internal cracks in concrete using vibro-acoustic modulation and machine learning. *Struct Health Monitoring*, 2022, 21: 1973–1991
- 95 Miele S, Karve P, Mahadevan S. Multi-fidelity physics-informed machine learning for probabilistic damage diagnosis. *Reliability Eng Syst Saf*, 2023, 235: 109243
- 96 Zhang T, Wang D, Lu Y. RheologyNet: A physics-informed neural network solution to evaluate the thixotropic properties of cementitious materials. *Cement Concrete Res*, 2023, 168: 107157
- 97 Yamaguchi T, Mizutani T, Chang C M. A physics-informed neural network for the nonlinear damage identification in a reinforced concrete bridge pier using seismic responses. *Struct Control Health Monitoring*, 2024, 2024: 5532909
- 98 Kumar H, Esakkiraja N, Dash A, et al. Utilising physics-informed neural networks for optimisation of diffusion coefficients in pseudo-binary diffusion couples. *Philos Mag*, 2023, 103: 1717–1737
- 99 Liu D, Yang H, Elkhodary K I, et al. Cyclic softening in nonlocal shells—A data-driven graph-gradient plasticity approach. *Extreme Mech Lett*, 2023, 60: 101995
- 100 Ciampaglia A, Tridello A, Paolino D S, et al. Data driven method for predicting the effect of process parameters on the fatigue response of additive manufactured AlSi10Mg parts. *Int J Fatigue*, 2023, 170: 107500
- 101 Cooper C, Zhang J, Gao R X. Error homogenization in physics-informed neural networks for modeling in manufacturing. *J Manufacturing Syst*, 2023, 71: 298–308
- 102 Chen S, Liu Z, Zhang W, et al. A hard-constraint wide-body physics-informed neural network model for solving multiple cases in forward problems for partial differential equations. *Appl Sci*, 2023, 14: 189
- 103 Yin Z, Li G Y, Zhang Z, et al. SWENet: A physics-informed deep neural network (PINN) for shear wave elastography. *IEEE Trans Med Imag*, 2023, 43: 1434–1448
- 104 Kamali A, Sarabian M, Laksari K. Elasticity imaging using physics-informed neural networks: Spatial discovery of elastic modulus and Poisson's ratio. *Acta Biomater*, 2023, 155: 400–409
- 105 Chen Y, Lu L, Karniadakis G E, et al. Physics-informed neural networks for inverse problems in nano-optics and metamaterials. *Opt Express*, 2020, 28: 11618–11633
- 106 Chen Y, Dal Negro L. Physics-informed neural networks for imaging and parameter retrieval of photonic nanostructures from near-field data. *APL Photonics*, 2022, 7: 010802

- 107 Chen M, Lupoiu R, Mao C, et al. High speed simulation and freeform optimization of nanophotonic devices with physics-augmented deep learning. *ACS Photonics*, 2022, 9: 3110–3123
- 108 Ghosh A, Elhamod M, Bu J, et al. Physics-informed machine learning for optical modes in composites. *Adv Photonics Res*, 2022, 3: 2200073
- 109 Wu C, Xiao Z, Guo Y, et al. Analysis of nonlinear multi-field coupling responses of piezoelectric semiconductor rods via machine learning. *Int J Smart Nano Mater*, 2024, 15: 62–74
- 110 Liu B, Wang Y, Rabczuk T, et al. Multi-scale modeling in thermal conductivity of polyurethane incorporated with phase change materials using physics-informed neural networks. *Renew Energy*, 2024, 220: 119565
- 111 Gui L, Wang B, Cai R, et al. Prediction of in-flight particle properties and mechanical performances of HVOF-sprayed NiCr–Cr₃C₂ coatings based on a hierarchical neural network. *Materials*, 2023, 16: 6279
- 112 Wang J, Peng X, Chen Z, et al. Surrogate modeling for neutron diffusion problems based on conservative physics-informed neural networks with boundary conditions enforcement. *Ann Nucl Energy*, 2022, 176: 109234
- 113 Faroughi S A, Soltanmohammadi R, Datta P, et al. physics-informed neural networkss with periodic activation functions for solute transport in heterogeneous porous media. *Mathematics*, 2023, 12: 63
- 114 Lehmann F, Fahs M, Alhubail A, et al. A mixed pressure-velocity formulation to model flow in heterogeneous porous media with physics-informed neural networks. *Adv Water Resour*, 2023, 181: 104564
- 115 Chakraborty A, Rabinovich A, Moreno Z. Physics-informed neural networks for modeling two-phase steady state flow with capillary heterogeneity at varying flow conditions. *Adv Water Resour*, 2024, 185: 104639

Summary for “基于物理信息神经网络的非均质材料力学研究进展”

Recent progress on mechanics investigations of heterogeneous materials based on physical information neural networks

Congjian Lin, Junbin Lou, Yixuan Li, Rongqiao Xu & Guannan Wang^{*}

Department of Civil Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China

^{*} Corresponding author, E-mail: guannanwang@zju.edu.cn

Heterogeneous materials are a widely utilized concept in the field of engineering. The explosive development of deep learning methods in recent years has introduced new approaches for addressing many complex problems within heterogeneous material systems. However, deep learning, due to its high degree of parallelism, nonlinearity, and numerous complex parameter operations, is difficult to interpret intuitively. In the application of deep learning to heterogeneous materials, challenges such as generating physically meaningless solutions, low generalization, and reliance on high-quality and large datasets are often encountered. Physics-informed neural networks (PINNs) effectively address these issues by integrating physical knowledge with deep learning methods. Consequently, PINNs have gradually become a popular method in the fields of solid mechanics and structural engineering, offering new ideas for predicting and designing heterogeneous material systems. To better understand the related research work, this paper provides a systematic review of the application of PINNs in the field of heterogeneous materials and summarizes the improvements of PINNs adapted to the characteristics of the problems of heterogeneous materials, including the use of the idea of domain decomposition, the use of reducing the order of derivatives to cope with the poor training accuracy of the network resulting from the higher-order partial differential equations which describe the problem, the combination of physical information and large models to cope with the increasingly complex physical problems in practice and other types of physical neural networks such as deep material networks. Subsequently, the practical applications of PINNs in heterogeneous materials are systematically introduced, with the most extensive applications in composites, concrete, alloy microstructures, and elastography of heterogeneous materials, etc., and are mainly focused on thermodynamic problems and material properties (strength, fatigue damage, etc.), as a large number of theoretical models of partial differential equations (PDEs) have already been accumulated in the research of these areas. On this basis, we look forward to further research directions and highlight the prospects for more in-depth and extensive applications of PINNs to heterogeneous materials. Three main points are mentioned: (1) Different types of problems cannot be directly migrated to use PINNs trained for other types of problems, which limits the generalization of PINNs to a certain extent. Is it possible to develop a generalized framework for PINNs, so that arbitrary partial differential equations can be solved under this framework? (2) Nowadays, the application of PINNs mainly focuses on the mature heterogeneous material systems, while the emerging materials, such as meta-materials and nano-materials, have fewer applications. On the one hand, it may need the development of related theories, and on the other hand, it can be used for the construction of new network structures according to the new characteristics of the new materials. (3) At present, the training of PINNs on heterogeneous materials mainly uses single-source data, but some scholars use multi-source data to train PINNs. Research on training PINNs with multi-source data can be carried out to optimize the network structure of PINNs, and further improve the PINNs in terms of reducing the cost of data acquisition, accelerating the convergence, and improving the prediction accuracy.

physical informed neural networks, heterogeneous materials, composites, deep learning

doi: [10.1360/TB-2024-0683](https://doi.org/10.1360/TB-2024-0683)