

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

卷积神经网络加速热场反演*

钟嘉晨¹⁾ 朱昌良^{2)†} 沈翔瀛^{1)‡}

1) (中山大学理学院, 深圳 518107)

2) (南方科技大学理学院物理系, 深圳 518055)

(2025 年 12 月 25 日收到; 2026 年 2 月 9 日收到修改稿)

准确获取各向异性材料的热扩散张量对于先进电子器件热管理及复合材料无损检测具有重要意义, 但传统瞬态测量法难以有效解耦方向分量, 而基于数值迭代的反演方法面临计算耗时极长且易陷入局部极小值的挑战. 为此, 提出一种融合物理一致性约束的卷积神经网络反演框架, 旨在实现从瞬态热场图像序列到各向异性热扩散张量的快速、精准映射. 该方法构建了包含多尺度特征提取主干及物理投影层的深度网络架构. 针对各向异性参数在中心点源激励下的耦合难题, 设计了环形多源激励策略以增强热流方向的可辨识度; 同时引入掩膜加权全局池化机制抑制边界效应干扰. 在训练策略上, 采用参数监督预训练结合物理一致性微调的两阶段方案, 将热传导偏微分方程的动力学约束作为正则化项引入损失函数. 数值实验表明, 该方法能够独立且高精度地解耦主轴扩散系数分量, 将平均相对误差控制在 3% 以内, 且物理一致性约束显著提升了小扩散系数区间的反演鲁棒性. 与传统迭代算法及标准物理信息神经网络相比, 该框架将反演速度提升至毫秒级, 实现了“一次训练, 实时推断”, 为各向异性材料的实时光热成像检测提供了高效的计算范式.

关键词: 各向异性扩散, 深度学习, 物理一致性, 摊销推断**DOI:** 10.7498/aps.75.20251763**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251763

1 引言

随着后摩尔时代电子器件向高功率密度、微型化及三维集成方向迅猛发展, 热管理已成为制约系统性能、可靠性与寿命的核心瓶颈^[1-3]. 在微纳电子封装、航空航天热防护系统以及新型能源转换器件中, 准确获取材料的热物性参数是进行高效热设计的前提^[4-7]. 传统的均质材料假设已难以满足现代工程需求, 新型功能材料如石墨烯、六方氮化硼 (h-BN) 以及碳纤维增强复合材料等, 均表现出显著的各向异性热传导特性^[8-10]. 例如, 层状二维材料的内热导率可能比面外热导率高出数个数量

级. 若在热分析中忽略这种方向依赖性 (directional dependency), 将导致温度场预测产生巨大偏差, 进而引发器件的热失效. 因此, 如何快速、无损且精确地反演各向异性材料的热扩散张量 (thermal diffusivity tensor), 不仅是热物理领域的基础科学问题, 更是工业界亟待解决的关键技术难题^[11]. 这一问题的解决对于优化芯片散热路径、评估复合材料内部缺陷以及推动新型热电材料的工程应用具有不可替代的重要意义^[12,13].

目前, 材料热物性测量方法主要分为稳态法和非稳态 (瞬态) 法两大类. 稳态法 (如防护热板法) 虽然原理直观、精度较高, 但测量周期长, 且难以有效分离各向异性分量, 通常仅适用于大尺寸均质

* 广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2025B1515020077, 2024A1515030139) 和国家自然科学基金 (批准号: 12205138, 12505047, 12447161) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhucl@sustech.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: shenxy66@sysu.edu.cn

材料. 相比之下, 瞬态法通过施加动态热激励并观测温度响应来提取参数, 具有测量速度快、所需样品尺寸小等优势, 是当前研究的主流. 在瞬态测量领域, 激光闪射法 (laser flash method, LFM) 是目前应用最广泛的工业标准方法^[14]. 然而, 传统 LFM 主要基于一维绝热模型, 难以直接应用于二维或三维各向异性热流的解析. 尽管后续发展的时域热反射法 (TDTR) 和 3ω 法在微纳尺度薄膜测量中取得了成功, 但这些方法通常依赖于复杂的实验光路系统或接触式微纳加工^[15], 且数据分析模型往往假设热流沿特定方向传播, 在处理面内与面外热导率强耦合的复杂工况时, 参数反演的唯一性往往难以保证^[16].

为了处理复杂几何形状和边界条件下的各向异性反演, 基于偏微分方程 (PDE) 约束的数值优化方法应运而生. 这类方法将反演问题转化为一个最小化观测数据与正演模型残差的优化问题, 通常采用 Levenberg-Marquardt (LM) 算法或共轭梯度法进行迭代求解. 虽然该方法理论上具有普适性, 但在实际应用中面临三大痛点: 一是计算成本高昂, 每一次参数迭代都需要求解一次完整的非稳态热传导方程^[17], 对于高分辨率网格或长时序观测, 单次反演耗时可能长达数分钟至数小时, 无法满足工业在线检测的实时性要求. 二是局部极小值困境, 热传导反问题本质上是“不适定” (Ill-posed) 的, 目标函数曲面往往是非凸的. 若初始猜测值选取不当, 优化算法极易陷入局部极小值, 导致反演结果严重偏离真值^[18]. 三是对噪声敏感, 实验数据中的微小噪声可能在反演过程中被放大, 导致解的不稳定性, 通常需要引入 Tikhonov 等正则化项, 但正则化参数的选取往往依赖经验.

近年来, 深度学习技术的兴起为求解物理问题提供了新范式, 例如人工智能辅助物理材料的精准设计^[19-21], 以及机器学习在热学领域的广泛应用等^[22,23]. 早期的纯数据驱动方法 (如全连接神经网络) 试图直接学习从温度场到热物性参数的映射, 但由于缺乏物理约束, 模型在训练数据分布之外的泛化能力较差, 且常产生违背物理常识的预测 (如负的热导率)^[24,25]. 物理信息神经网络 (physics-informed neural networks, PINN) 通过将 PDE 残差引入损失函数, 在一定程度上解决了物理一致性问题^[26,27]. 然而, 标准的 PINN 模式通常针对单个实例, 将物理参数作为可训练变量, 通过最小化

PDE 残差进行逐次迭代优化. 其优势在于无需标签, 但推理速度慢 (分钟级), 且对初值敏感, 易陷入局部极小值. 同时对于每一个新的实验样本都需要重新优化网络权重, 这使得推理速度甚至慢于传统数值方法, 未能真正实现“一次训练, 实时推断”的工程目标^[28,29]. 近期, 针对非线性系统的改进型 PINNs 方法取得了显著进展, 例如在非线性动力学及复杂物理场重构中的应用^[30-32]. 这些方法在求解精度和物理约束处理上表现优异, 但通常仍需针对每个反演实例进行迭代优化. 相比之下, 本文提出的摊销推断框架旨在通过离线训练换取在线推理的毫秒级响应, 更适用于工业流水线上的实时热成像检测.

针对上述痛点, 本文提出了一种基于摊销推断 (Amortized Inference) 与物理一致性约束相结合的深度学习反演框架, 利用卷积神经网络 (CNN) 强大的特征提取能力, 构建了从瞬态热场图像序列到主轴与坐标轴对齐的各向异性热扩散张量的直接逆映射算子. 为了解决各向异性参数在中心点源激励下难以解耦的问题, 本研究设计了环形多源激励策略, 通过引入空间分布的非对称热流实现了对扩散张量主轴分量 (κ_x, κ_y) 的独立识别. 在模型构建层面, 先利用掩膜处理初始热场信息来减小边界效应, 再通过提出“掩膜加权全局池化”机制消除边界零填充干扰, 并引入 Sigmoid 物理投影层限制输出区间, 构建了融合物理先验的 CNN 架构; 同时, 为克服小参数区间的过拟合问题, 训练中引入了基于有限差分残差的物理一致性损失, 这种“监督预训练结合物理微调”的策略赋予了模型遵循热力学定律的归纳偏置, 显著提升了泛化能力. 该方法可以将反演过程实现为毫秒级的实时参数估计, 为实时热成像检测提供了更为有效的研究路径.

2 物理模型与数值背景

2.1 控制方程与问题定义

本文研究二维有界区域 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ 内的非稳态热传导问题. 在无内热源或内热源已知的情情况下, 温度场 $T(\mathbf{x}, t)$ 的演化遵循抛物型偏微分方程:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\kappa} \nabla T), \quad \mathbf{x} \in \Omega, t > 0, \quad (1)$$

其中, $\boldsymbol{\kappa}$ 为热扩散张量 (thermal diffusivity tensor). 为了模拟受控的实验环境并减少边界效应的影响,

本文在计算域边界设置 Dirichlet 恒温边界条件 $T|_{\partial\Omega} = 0$ [33,34]. 这种设置通常用于在有限的计算网格中近似无限大介质或理想热沉, 通过将边界置于热扩散波前尚未到达的远场位置, 并强制温度归零, 从而确保了数值解的适定性与物理一致性 [35]. 初始时刻系统处于热平衡状态, 即 $T(\mathbf{x}, 0) = 0$.

为了展示神经网络在较简单到较复杂的学习任务中的表现, 本文定义了两种典型的参数反演场景. 首先是各向同性场景 (isotropic), 假设介质均匀且各向同性, 扩散张量退化为标量 κ , 即 $\kappa_x = \kappa_y$, 此时仅需反演单一参数 κ . 其次是各向异性场景 (anisotropic), 假设介质的主轴与坐标轴对齐, 扩散张量表现为对角矩阵形式:

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_x & 0 \\ 0 & \kappa_y \end{pmatrix}, \quad \kappa_x, \kappa_y > 0. \quad (2)$$

在此场景下, κ_x 与 κ_y 的差异导致热流在空间分布上呈现椭圆对称性. 准确识别这种方向依赖性 (directional dependency) 是各向异性反演的核心难点.

2.2 初始激励策略

为了在反演过程中最大化参数的可辨识度, 我们针对上述两种场景设计了不同的初始高斯脉冲激励 $T_0(\mathbf{x})$:

$$T_0^{(m)}(\mathbf{x}) = A \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_m\|^2}{2\sigma_0^2}\right), \quad (3)$$

其中 σ_0 为热源宽度, \mathbf{x}_m 为激励中心.

对于各向同性场景, 热流呈圆形向外扩散, 为简化实验设置, 我们将单一点源置于区域几何中心 $\mathbf{x}_c = (0.5, 0.5)$. 而对于各向异性场景, 单一中心激

励产生的椭圆热场在某些角度下可能难以区分 κ_x 与 κ_y 的耦合效应. 为此, 采用环形等角布点策略, 在半径为 r_0 的圆环上均匀布置 M 个激励点:

$$\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_c + r_0 \left[\cos\left(\frac{2\pi m}{M}\right), \sin\left(\frac{2\pi m}{M}\right) \right],$$

$$m = 0, \dots, M-1. \quad (4)$$

如图 1 所示, 这种多源激励模式能够在不同方向上产生独立的热流演化路径, 从而显著增强模型对各向异性参数的解耦能力. 此外, 还对初始热场数据进行掩膜处理, 仅提取黄色圆形区域中的热场信息以此来减小边界效应带来的干扰.

2.3 数值正演与数据生成

训练数据通过高精度的数值模拟生成. 空间上, 将区域 Ω 离散为 $N \times N$ 的均匀网格 (本文取 $N = 128$), 利用二阶中心差分格式计算拉普拉斯算子; 时间上, 采用显式欧拉积分推进:

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \Delta t \left[\kappa_x \frac{T_{i+1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{dx^2} + \kappa_y \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{dy^2} \right]. \quad (5)$$

为保证数值稳定性, 时间步长 Δt 严格遵循 CFL 条件:

$$\Delta t \leq \frac{1}{2(\kappa_x/dx^2 + \kappa_y/dy^2)}, \quad (6)$$

该约束条件源自对显式差分格式的冯·诺依曼稳定性分析 (von Neumann stability analysis), 若违背此条件, 数值解将出现非物理的振荡并发散 [36]. 为了构建覆盖广泛物理特性的数据集, 对 κ_x 和各向

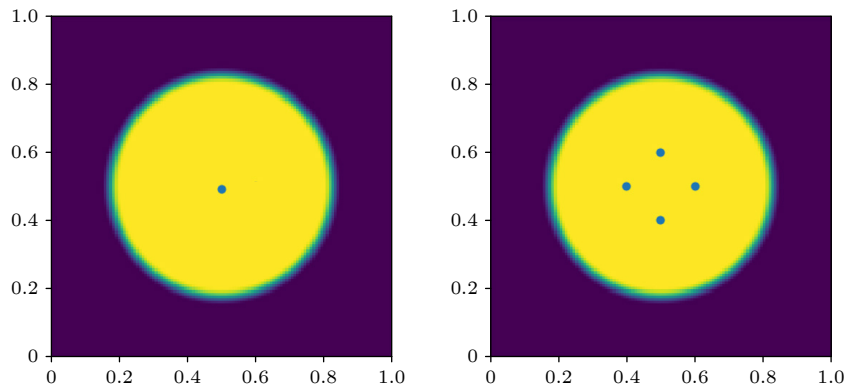


图 1 源与掩膜的位置示意图

Fig. 1. Schematic illustration of the positions of the source and mask.

异性比 $r = \kappa_x / \kappa_y$ 进行对数均匀采样 (log-uniform sampling). 同时, 引入“掩膜安全约束”, 确保早期热场主要分布在观测掩膜 R_{mask} 范围内, 避免边界反射对反演造成干扰.

3 深度神经网络架构

热传导系数反演通常被建模为最小化观测数据与正演模型残差的优化问题^[37]. 传统的迭代求解方法面临计算成本高、易陷入局部极小值等瓶颈^[38]. 基于深度学习的摊销推断 (amortized inference) 框架, 核心思想是利用神经网络 f_θ 参数化逆算子, 通过一次性的离线训练, 学习从温度场演化历史 \mathcal{X} 到物理参数 κ 的直接映射:

$$\hat{\kappa} = f_\theta(\mathcal{X}) \approx \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{X}). \quad (7)$$

一旦网络训练完成, 对于任意新的实验观测数据, 模型均可实现毫秒级的实时参数估计, 无需再进行

迭代优化.

针对各向异性热扩散系数反演这一问题, 本文构建了一种融合物理先验的卷积神经网络 (convolutional neural networks, CNN) 架构. 该模型的设计准则是在保证计算轻量化的同时, 最大化对时空热场演化特征的捕获能力, 特别是对扩散椭圆主轴方向与离心率的敏锐感知. 网络整体架构如图 2 所示, 主要由多尺度特征提取主干、掩膜加权全局池化模块以及物理约束投影层三部分构成.

3.1 特征提取主干

模型的输入为早期的一组连续热场快照. 网络的输入为四维张量 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{C \times N \times N}$, 由 M 个独立激励位置下的 K 帧早期温度场堆叠而成, N 是热场的分辨率, 总通道数 $C = M \times K$. 为有效建立从高维温度场到低维物理参数的映射, 主干网络采用了“浅层预处理+深层残差提取”的层次化设计.

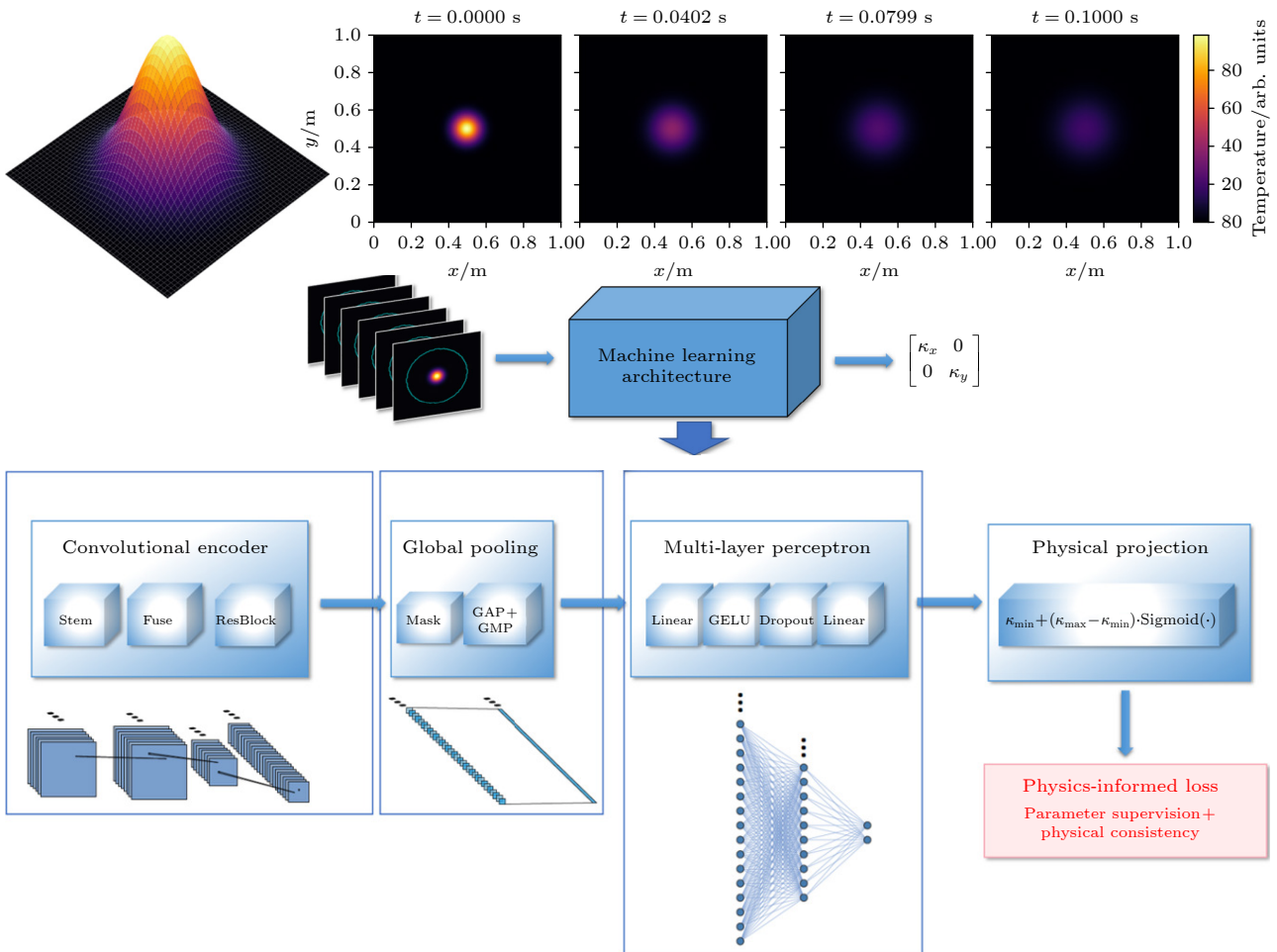


图 2 神经网络解决热场反演问题的流程示意图

Fig. 2. Schematic illustration of the workflow of solving the thermal field inversion problem using a neural network.

首先是 Stem 预处理模块. 原始温度场往往存在跨数量级的数值差异, 首层采用 3×3 卷积配合群归一化 (group normalization, GN) 与 GELU 激活函数. 相比于 ReLU, GELU 的平滑非线性特性更贴合热扩散过程的连续性. GN 则能消除不同激励强度带来的尺度偏差, 使得模型对激励源的绝对幅值变化不敏感^[39], 确保了在多源激励强度不一致时的反演鲁棒性. Stem 层输出通道数为 32, 保持原始分辨率.

其次是通道特征融合 (feature fusion). 为了让网络尽早感知不同激励源之间的互补信息, 在浅层引入 1×1 卷积进行跨通道线性组合. 该操作相当于在通道维度上进行加权聚合, 使网络能够自动学习如何从不同时刻 (t_k) 和不同源位置 (m) 提取最有利于反演的联合特征.

最后是多尺度残差阶段 (residual stages). 网络主体包含三个级联的残差阶段, 每个阶段由 2 个残差块组成, 每个残差块包含 2 层 3×3 卷积, 模型总深度约为 14 层. 每组模块均通过步长为 2 的卷积层进行下采样, 通道数随深度逐级倍增 ($32 \rightarrow 64 \rightarrow 128$), 逐步将特征图的空间分辨率减半. 这种设计不仅扩大了神经元的感受野, 使其能够从局部的温度梯度信息逐渐过渡到对整体热流衰减速率及扩散椭圆几何形状的感知^[40]. 最终输出的高维特征张量记为 $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{C' \times H' \times W'}$, 其中 $C' = 128$, 空间分辨率为输入的 $1/4$. 模型总参数量约为 0.85 M, 这种轻量化设计是实现毫秒级推理的关键.

3.2 掩膜加权全局池化

在实际实验场景中, 观测区域往往受到边界条件或传感器视窗的限制 (例如仅中心区域可见). 传统的全局平均池化 (GAP) 会对整个特征图进行无差别平均, 这会导致掩膜外的零填充区域 (zero-padding) 稀释有效特征, 产生不可忽视的偏差^[41].

为此, 本文提出并应用了掩膜加权全局池化 (mask-aware global pooling) 策略. 设 $M_{i,j}$ 为下采样至特征图分辨率 $H' \times W'$ 的二值或软掩膜, 并行计算以下两组统计量:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\text{avg}} &= \frac{\sum_{i,j} M_{i,j} \mathbf{F}_{i,j}}{\sum_{i,j} M_{i,j} + \epsilon}, \\ \mathbf{v}_{\text{max}} &= \max_{i,j} (M_{i,j} \odot \mathbf{F}_{i,j}). \end{aligned} \quad (8)$$

其中 ϵ 为防止除零的微小量. \mathbf{v}_{avg} 准确反映了有效观测域内的热扩散平均能量规模, 而 \mathbf{v}_{max} 则敏锐捕捉了热波前沿或热斑中心的最显著特征. 将二者拼接形成的全局描述向量, 能够更全面、鲁棒地表征非均匀热场的物理属性. 值得注意的是, 只要观测视窗位于材料内部且满足早期扩散条件, 模型即可忽略外部边界的几何复杂性, 为适应不同形状样品提供了可能.

3.3 物理投影与参数化输出

全连接层 (multilayer perceptron, MLP) 将提取的全局特征映射至实数空间. 池化层输出的 GAP 与 GMP 向量拼接后形成 256 维输入, 经过 Linear(256 \rightarrow 128)-GELU-Dropout-Linear(128 \rightarrow 2) 的层级结构, 最终输出预测值. 然而, 热扩散系数 κ 具有严格的物理约束——必须为正值, 且通常在对数尺度上分布. 直接回归无约束的输出极易导致非物理预测 (如负值).

本文采用的是对数均匀采样训练数据, 因此先选择使用 Log-Tanh 参数化, 但在实验中发现其在处理宽动态范围数据时梯度分布不均. 因此, 本文最终采用 Sigmoid 区间缩放作为物理投影层. 网络输出 logits z_i 通过以下变换映射到物理区间 $[\kappa_{\min}, \kappa_{\max}]$:

$$\hat{\kappa}_i = \kappa_{\min} + (\kappa_{\max} - \kappa_{\min}) \cdot \sigma(z_i), \quad i \in \{x, y\}. \quad (9)$$

这种参数化方式保证了预测结果始终落在合理的物理界限内, 且 Sigmoid 函数平滑的梯度特性有助于网络在反演早期的快速收敛.

3.4 损失函数与分阶段训练

为了在数据驱动的泛化能力与物理定律的严谨性之间取得平衡, 本文采用“监督预训练快速收敛, 物理微调逼近最佳”的两阶段训练策略. 总损失函数定义为

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{sup}} + \lambda_{\text{phys}} \mathcal{L}_{\text{phys}}. \quad (10)$$

在第一阶段, 仅利用数值模拟生成的精确标签进行监督训练, 设置 $\lambda_{\text{phys}} = 0$. 考虑到数据集的 κ 值服从对数均匀分布, 小数值样本占比较大但数值贡献小. 为避免模型过度关注大数值样本而忽略小数值样本的相对误差, 采用 L_1 范数 (MAE) 作为主损失函数:

$$\mathcal{L}_{\text{sup}} = |\hat{\kappa}_x - \kappa_x| + |\hat{\kappa}_y - \kappa_y|. \quad (11)$$

尽管监督学习能建立输入与输出的统计关联,但在数据稀疏或参数简并情况下,模型可能产生非物理的过拟合.为此,在第二阶段引入物理一致性损失 $\mathcal{L}_{\text{phys}}$ 作为正则化项.该项将网络预测的 $\hat{\kappa}$ 代入离散化的热传导方程,计算下一帧温度场的预测残差. $\mathcal{L}_{\text{phys}}$ 实际上向网络引入了物理归纳偏置 (inductive bias),约束解空间必须贴近热力学定律流形.通过惩罚违背物理规律的参数估计,该正则化项显著提升了模型在面对小扩散系数样本时的鲁棒性与泛化能力.

具体而言,将网络预测的扩散系数 $\hat{\kappa}$ 代入离散化的热传导方程算子 $\mathcal{N}(\cdot)$,以当前时刻真实观测帧 $T_k^{(m)}$ 为初值,向前演化一个时间步 Δt ,并计算其与真实下一帧 $T_{k+1}^{(m)}$ 在掩膜区域内的归一化差异:

$$\mathcal{L}_{\text{phys}} = \frac{1}{MK} \sum_{m,k} \frac{\|\mathcal{N}(T_k^{(m)}; \hat{\kappa}) - T_{k+1}^{(m)}\|_2^2}{\|T_{k+1}^{(m)}\|_2^2 + \epsilon}. \quad (12)$$

该损失项迫使神经网络的预测结果不仅在统计上逼近真值,而且在动力学行为上严格遵循热传导物理定律.这里未采用纯物理(无标签)训练,因为在早期热场演化中,仅凭下一帧预测很难完全消除参数解的简并性,监督信号的引入对于锁定全局最优解至关重要.

3.5 数据集构建与参数空间

物理区域设定为单位正方形 $\Omega = [0, 1]^2$,空间上采用 $N = 128 \times 128$ 的均匀网格剖分,对应的空间分辨率足以早期热扩散细节提供精细描述.为了模拟多样的各向异性材料,主扩散系数 κ_x 在 $[5 \times 10^{-3}, 5 \times 10^{-2}]$ 区间内进行对数均匀采样;各向异性比 $r = \kappa_x / \kappa_y$ 则在 $[1.0, 4.0]$ 范围内随机采样.这确保数据集覆盖了从各向同性 ($r = 1$) 到强各向异性 ($r = 4$) 的连续变化空间.

实验设置 $M = 4$ 个高斯热源,均匀分布在半径 $r_0 = 0.1$ 的圆环上,初始高斯分布标准差设为 $\sigma_0 = 0.03$.这种环形多点激励相比单点激励,能显著增加各向异性热流的方向性信息.观测总时长设定为 $t_K = 0.02$ s,共均匀采集 $K = 30$ 帧瞬态热场图像.同时,设置半径 $R_{\text{mask}} = 0.35$ 的软掩膜限制观测域,并在生成数据时严格执行了“安全过滤”准则,确保最大扩散长度 $\ell_{\text{max}} \approx \sqrt{2\kappa_{\text{max}}t_K}$ 始终小于掩膜边界距离,从而排除边界反射效应对反演结果的干扰.

根据问题的难易程度,最终针对各向同性和各

向异性的反演问题生成的数据集分别包含 400 和 1000 组独立样本,每组样本包含完整的时空演化序列与对应的真实参数标签.数据集按照 7 : 1.5 : 1.5 的比例随机划分为训练集、验证集和测试集.更进一步的实验中表明,仅需约 200 组独立样本即可使模型收敛并达到良好的泛化精度,这显著降低了高保真数值模拟的数据构建成本.

模型基于 PyTorch 深度学习框架实现,所有计算均在单块 NVIDIA RTX 4060 GPU (移动端) 上完成.训练过程采用 AdamW 优化器,以兼顾收敛速度与权重衰减正则化.参数监督的第一阶段学习率设定为 3×10^{-4} ,加入物理一致性的第二阶段学习率设置为 3×10^{-5} ,以帮助模型在训练后期跳出局部极小值并收敛至更平坦的极值区域.在第二阶段的物理微调中,物理损失权重系数设定为 $\lambda_{\text{phys}} = 0.4$.

4 结果与分析

为了全面评估所提深度学习框架解决热传导反问题的有效性,本节将从数值重构精度、各向同性基准测试以及各向异性参数的解耦能力三个维度展开论述.重点分析在无噪声的理想数值环境下,引入物理一致性约束 (physics-consistency constraint) 如何进一步修正纯数据驱动模型的微小偏差,并提升模型在小参数区间的反演灵敏度.

4.1 热场演化的数值精度验证

参数反演模型的可靠性取决于其是否能精确复现控制热流动的物理规律.为了验证网络预测参数在数值上的精确性,随机在各向同性的测试集中挑选某个样本,将反演得到的扩散系数 $\hat{\kappa}$ 代入正演差分方程,重构了 $t \in [0, 0.1]$ s 时段内的温度场演化,并与真实仿真数据进行对比.

如图 3 所示,以各向同性样本为例,重构热场 (reconstructed) 与真实真值 (ground truth) 在视觉上几乎无法区分.为了量化差异,计算了二者的绝对残差 (residual).结果显示,在温度场最大幅值达到 80 (任意单位) 的情况下,绝对残差主要分布在 ± 0.015 的极窄区间内.这种约为 10^{-4} 量级的相对误差表明,反演得到的参数具有极高的数值精度,网络成功捕捉到了支配热扩散的精细动力学特征.关于各向异性场景下参数解耦的详细量化分析,请参见图 4(d)–(f).

4.2 各向同性场景下的反演性能

作为基准测试, 我们评估了模型在各向同性介质 ($\kappa_x = \kappa_y = \kappa$) 中的表现. 如图 4(a) 所示, 预测值 $\ln \hat{\kappa}$ 与真值 $\ln \kappa$ 在整个参数空间内呈现出极高的线性度, 大部分散点紧密贴合 $y = x$ 对角线. 但是我们也注意到 κ 较小的预测值与真实值出现了明显的偏差, 这是因为在纯参数监督训练下越小的 κ 在损失函数中的占比也越小, 因此在一个数量级跨度的 κ 在尾部的学习效果会发生偏差.

相对误差分布 (图 4(b)) 显示, 绝大多数样本的预测误差控制在 2.5% 以内, 但是由于在小 κ 的训练效果更差, 因此出现了个别较大的相对误差值. 训练曲线 (图 4(c)) 表明, 对于自由度较低的标量反演任务, 仅依赖参数监督 (parameter supervision) 即可在 20 个 Epoch 内迅速收敛, 验证集平均相对误差 (MRE) 最终稳定在 2% 左右. 这证实

了在各向同性条件下, 热斑的几何扩散特征具有良好的可辨识度.

4.3 各向异性张量解耦与物理正则化效应

在各向异性场景中, 模型面临的挑战是从单一的热演化图像中独立解耦出 κ_x 与 κ_y . 图 4(d) 展示了测试集上的解耦结果. 无论是 κ_x 还是 κ_y , 其预测散点均未出现明显的分叉或偏离, 表明采用环形多点激励策略有效地打破了方向简并性, 实现了对扩散张量主轴分量的独立识别. 同时我们注意到, 由于在第二阶段的训练中损失函数考虑了物理一致性, 较小 κ 下预测值出现偏差的情况得到了解决, 相对误差的分布也更为平稳 (图 4(e)).

图 4(f) 的训练演化曲线进一步揭示了“物理一致性约束”在提升反演精度方面的关键作用. 训练过程分为纯参数监督阶段 (0—30 Epochs, 紫色区域) 和物理微调阶段 (30+ Epochs, 绿色区域). 在

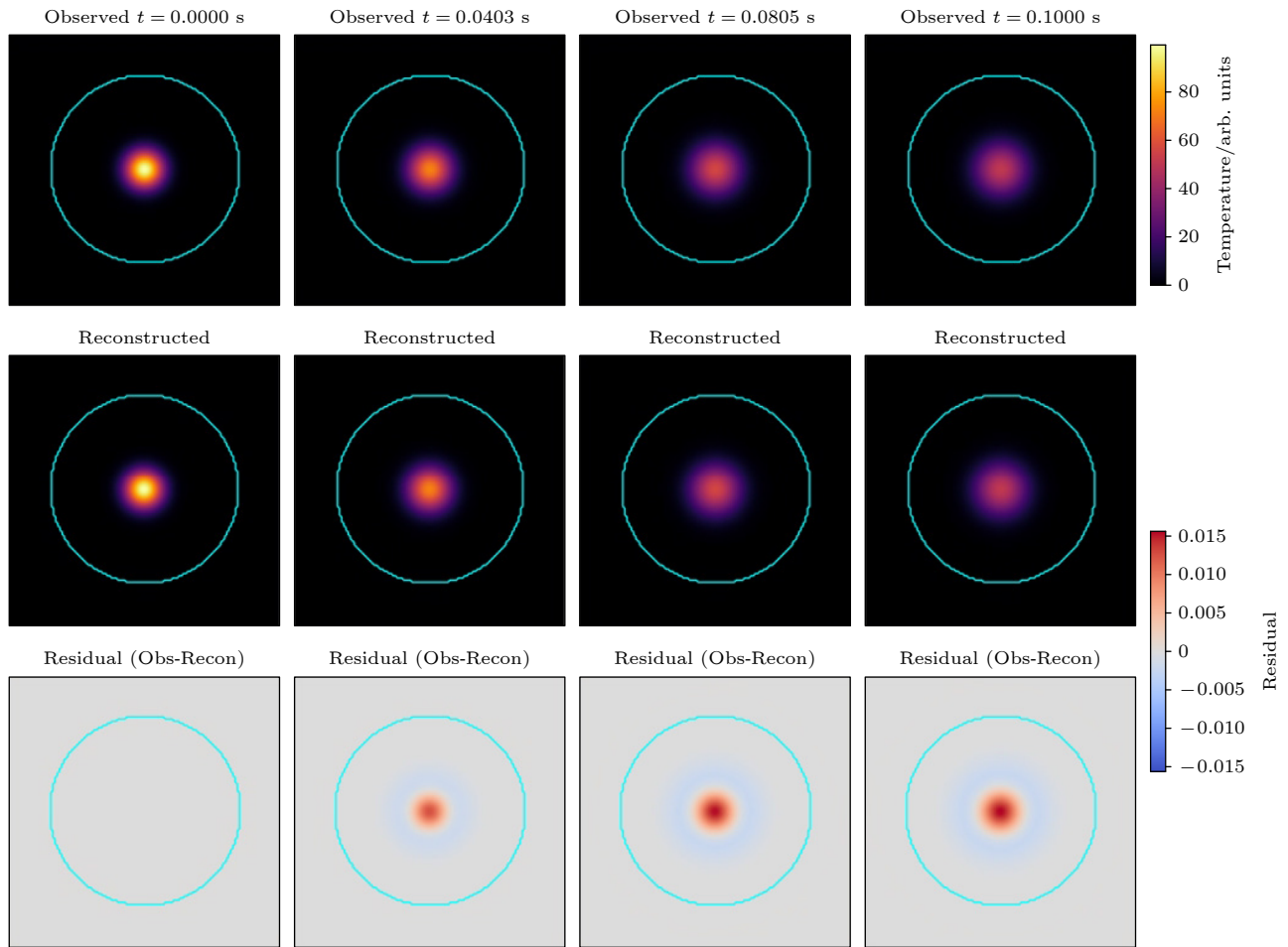


图 3 热场重构精度验证. 第一行至第三行分别为: 真实演化热场、基于预测参数重构的热场, 以及二者的绝对残差

Fig. 3. Validation of thermal field reconstruction accuracy. The first to third rows show the true evolving thermal fields, the thermal fields reconstructed from the predicted parameters, and the absolute residuals between them, respectively.

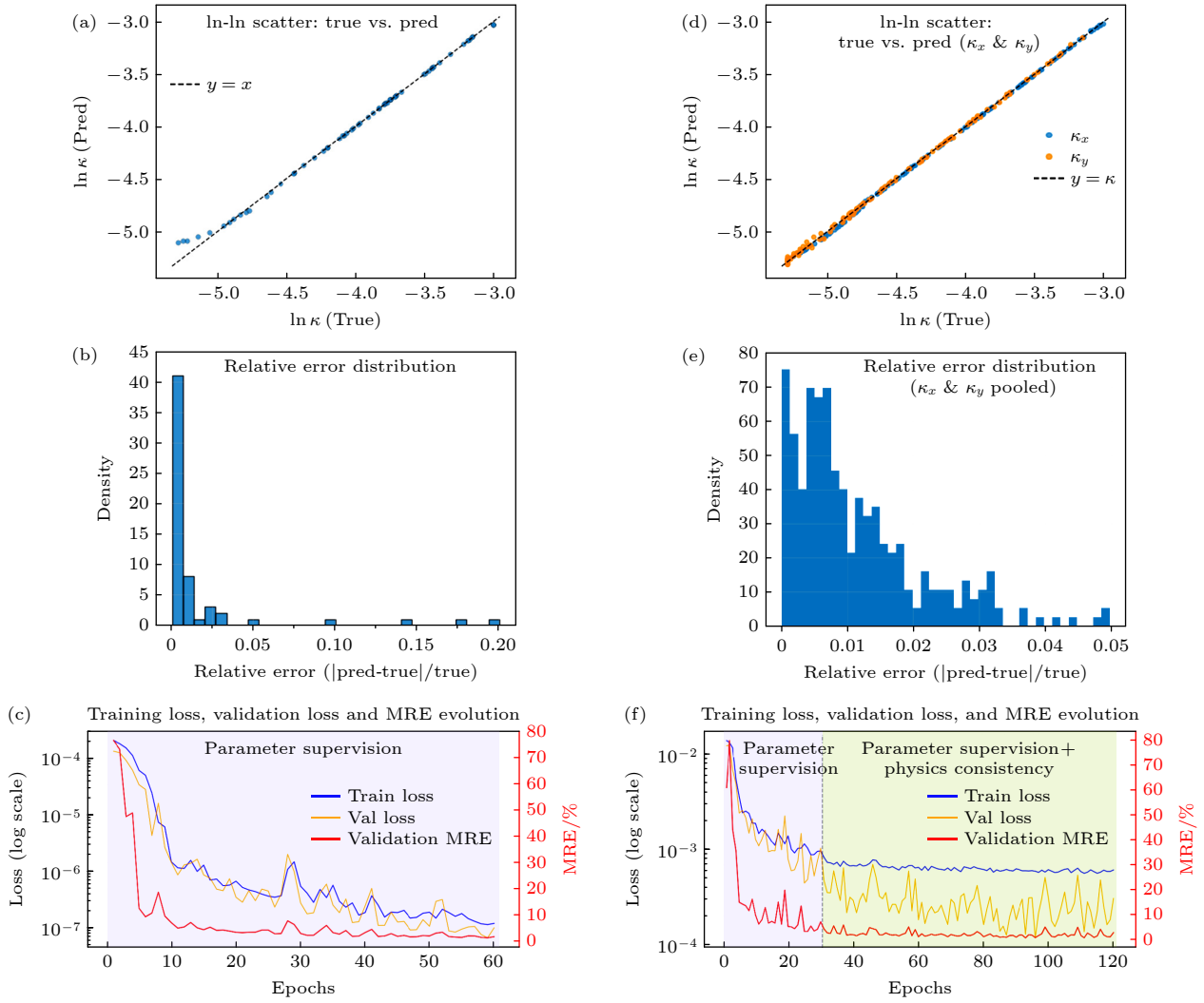


图 4 各向同性场景测试结果 (a) 预测值与真值的对数散点图; (b) 相对误差直方图; (c) 训练过程显示仅依靠监督学习即可实现收敛。各向异性场景测试结果 (d) κ_x 与 κ_y 的联合散点图证明了良好的参数解耦能力; (e) 相对误差相比图 (b) 分布更为稳定; (f) 训练曲线展示了在 Epoch 30 引入物理一致性损失 (绿色区域) 后, 验证集误差进一步降低且收敛过程更趋稳定, 体现了动力学约束对参数可辨识度的提升作用

Fig. 4. Test results for the isotropic case: (a) Logarithmic scatter plot of the predicted values versus the true values; (b) histogram of the relative error; (c) the training process shows that convergence can be achieved using supervised learning alone. Test results for the anisotropic case: (d) The joint scatter plot of κ_x and κ_y demonstrates good parameter decoupling capability; (e) the relative error distribution is more stable than that in panel (b); (f) the training curve shows that after introducing the physics-consistency loss at Epoch 30 (green region), the validation error is further reduced and the convergence process becomes more stable, indicating that dynamical constraints improve parameter identifiability.

纯监督阶段, 虽然 Loss 总体呈下降趋势, 但验证集 MRE (红色曲线) 存在振荡。这主要是因为在小扩散系数样本中, 热扩散极其缓慢, 早期热场在空间上的延展范围很小 (受限于网格分辨率)。这导致不同的小 κ 值可能对应着极其相似的热场图像 (即“参数简并”现象), 使得纯图像特征提取难以精确定位最优解。引入物理损失 $\mathcal{L}_{\text{phys}}$ 后, 验证集 MRE 曲线显著平滑同时验证集的损失函数进一步下探。物理损失项利用差分方程计算下一帧的预测残差, 这实际上是引入了时间维度上的动力学约束。从当

前帧的静态图像出发, 利用两个参数在下一时刻演化趋势的微小差异, 使得物理一致性损失可以捕捉到这种动态差异, 进一步提升模型在小参数区间的反演精度与稳定性。

5 结论

针对各向异性材料热物性参数快速测量的难题, 本文提出了一种融合物理一致性约束的深度卷积神经网络反演方法, 通过对二维非稳态热传导过

程的系统研究, 实现了快速且稳健的摊销反演. 构建的 CNN 架构成功实现了从早期瞬态热场图像到各向异性扩散张量的高精度映射. 与传统迭代反演相比, 该方法实现了毫秒级的实时推理, 且能够独立解耦 κ_x 与 κ_y 分量, 平均相对误差控制在 3% 以内.

实验表明了物理正则化的关键作用. 在参数监督的基础上引入基于 PDE 的物理一致性约束, 能够显著提升模型在小扩散系数区间的反演稳定性. 动力学约束有效减少了静态图像反演中的参数简并现象. 另外还提出了多源激励的有效性. 环形多点激励策略配合掩膜加权池化机制, 结果表明是捕捉各向异性特征的有效的实验设计, 为非接触式热成像测量提供了新的扫描策略参考.

本文采用的摊销推断模式属于“带物理先验的摊销推断 (amortized inference with physical prior)”. 我们通过一次性的离线训练, 学习从热场空间到参数空间的逆映射算子. 物理一致性项在此处作为正则化约束, 而非唯一的驱动力. 其核心优势在于“一次训练, 实时推理”, 将反演耗时从分钟级压缩至毫秒级, 比传统的迭代反演和由“场”到“场”的 PINN 更适用于实时监测场景.

附录 A1

在数据驱动的反演任务中, 输入数据的质量直接决定了参数的可辨识度. 针对早期热场反演, 关键的实验设计参数包括观测时间窗 t_{\max} 、激励半径 r_0 以及掩膜半径 R_{mask} .

基于热扩散长度 $l_d \approx \sqrt{4\kappa t}$ 的物理尺度, 我们总结出以下能够最大化各向异性信息量的选型准则. 首先是时间窗的选择. 采集时间 t_{\max} (文中取 0.02 s) 并非固定值, 而是由物理判据 $\sqrt{2\kappa_{\max} t_{\max}} < R_{\text{mask}}$ 决定. 前者确保热流尚未完全混合, 保留了各向异性的方向特征; 后者确保扩散波未触及掩膜边界, 避免了边界反射对反演的干扰. 在采集数量方面, 本研究选取 30 帧作为输入, 旨在利用时间维度的冗余信息对抗测量噪声, 起到类似低通滤波的效果.

其次是激励半径与掩膜. 环形激励半径 r_0 的引入打破了中心点源的对称性. 实验表明, 当 r_0 略大于初始热斑宽度且处于掩膜视窗的 $1/3$ — $1/2$ 处时, 热场能够展现出最显著的椭圆演化特征, 从而显著降低 κ_x 与 κ_y 的耦合度.

附录 A2

目前的框架基于“主轴与坐标轴对齐”的假设, 这在复

合材料铺层分析中具有代表性. 针对更通用的场景, 模型可从以下维度扩展. 针对一般正定对称张量 (SPD), 对于主轴旋转的材料, 可增加一个角度参数 θ 或直接反演完整的张量分量 κ_{xy} . 这仅需调整网络输出层的维度, 无需改变主干架构. 针对空间变系数反演, 对于非均匀介质 $\kappa(\mathbf{x})$, 可将网络尾部的 MLP 替换为解码器 (decoder), 构建 U-Net 架构以实现“图像到图像”的参数场重构. 此时, 拉普拉斯正则化或低维基函数展开将是防止过拟合的关键技术.

然而, 本方法在工程落地时仍面临一定局限. 首先, 模型训练依赖于已知的几何边界条件, 当实际样品的边界形状复杂或未知时, 预训练模型的泛化能力会下降. 其次, 当前仅考虑了绝热或恒温边界, 对于复杂的对流换热边界条件, 需要构建更精细的正演模型库以覆盖真实工况.

附录 B1

对于输入张量 \mathbf{x} , 我们叠加了标准差 (相对幅度) 为 $\delta = 0.01$ 的高斯噪声项 $\mathbf{N} \sim \mathcal{N}(0, \delta^2)$. 实验结果表明, 在引入该噪声项后, 模型反演的预测结果依然保持稳定 (如图 B1). 这主要得益于两个方面: 一是卷积神经网络 (CNN) 中的卷积核与池化操作天然具有低通滤波特性, 能够有效平滑高频随机噪声; 二是训练阶段引入的物理一致性约束 (PDE Loss) 迫使模型学习符合热力学定律的流形.

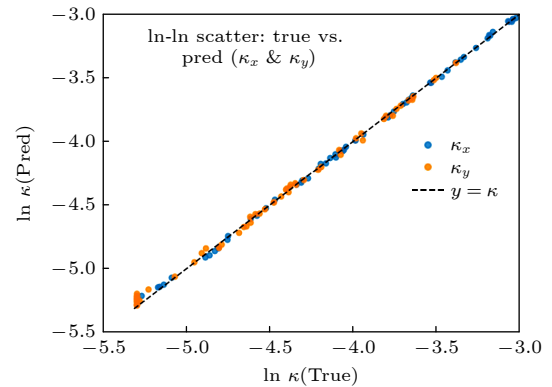


图 B1 样本带有噪声情况下各向异性场景预测值与真值的对数散点图

Fig. B1. Logarithmic scatter plot of the predicted values versus the true values for the anisotropic case under noisy samples.

参考文献

- [1] Moore A L, Shi L 2014 *Mater. Today* **17** 163
- [2] Pop E 2010 *Nano Res.* **3** 147
- [3] Luo T L, Ding Y F, Wei B J, Du J Y, Shen X Y, Zhu G M, Li B W 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 234401 (in Chinese) [罗天麟, 丁亚飞, 韦宝杰, 杜建迎, 沈翔瀛, 朱桂妹, 李保文 2023 *物理学报* **72** 234401]

- [4] Garimella S V, Fleischer A S, Murthy J Y, Keshavarzi A, Prasher R, Patel C, Bhavnani S H, Venkatasubramanian R, Mahajan R, Joshi Y K, Sammakia B, Myers B A, Chorosinski L, Baelmans M, Sathyamurthy P, Raad P E 2008 *IEEE Trans. Compon. Packag. Technol.* **31** 801
- [5] Zweben C 1998 *JOM* **50** 47
- [6] Ding Y F, Zhu G M, Shen X Y, Bai X, Li B W 2022 *Chin. Phys. B* **31** 126301
- [7] Shen X 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 090801
- [8] Balandin A A 2011 *Nat. Mater.* **10** 569
- [9] Jo I, Pettes M T, Kim J, Watanabe K, Taniguchi T, Shi L 2013 *Nano Lett.* **13** 550
- [10] Fukushima H, Drzal L T, Rook B P, Rich M J 2006 *J. Therm. Anal. Calorim.* **85** 235
- [11] Hematiyan M, Khosravifard A, Shiah Y 2015 *Int. J. Heat Mass Transfer* **89** 685
- [12] Zhao L D, Lo S H, Zhang Y, Sun H, Tan G, Uher C, Wolverton C, Druvid V P, Kanatzidis M G 2014 *Nature* **508** 373
- [13] Snyder G J, Toberer E S 2008 *Nat. Mater.* **7** 105
- [14] Parker W J, Jenkins R, Butler C, Abbott G 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 1679
- [15] Cahill D G, Braun P V, Chen G, Clarke D R, Fan S, Goodson K E, Keblinski P, King W P, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Phillpot S R, Pop E, Shi L 2014 *Appl. Phys. Rev.* **1** 011305
- [16] Feser J P, Cahill D G 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 104901
- [17] Huang C H, Wang S P 1999 *Int. J. Heat Mass Transfer* **42** 3387
- [18] Colaço M J, Orlande H R B, Dulikravich G S 2006 *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.* **28** 1
- [19] Zhu C, Fang C, Jin Z, Li B, Shen X, Xu L 2024 *Appl. Phys. Rev.* **11** 031401
- [20] Zhu C, Bamidele E A, Shen X, Zhu G, Li B 2024 *Chem. Rev.* **124** 4258
- [21] Shen X, Zhu G, Li B 2023 *Sci. China Phys. Mech.* **66** 260501
- [22] Zhu C, Luo T, Li B, Shen X, Zhu G 2024 *J. Appl. Phys.* **135** 195103
- [23] Zhu C, Shen X, Zhu G, Li B 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 124402
- [24] Daw A, Karpatne A, Watkins W D, Read J S, Kumar V 2022 *Knowledge-guided Machine Learning: Accelerating Discovery Using Scientific Knowledge and Data* pp353-372
- [25] Willard J D, Jia X, Xu S, Steinbach M, Kumar V 2022 *ACM Comput. Surv.* **55** 1
- [26] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E 2019 *J. Comput. Phys.* **378** 686
- [27] Cai S, Wang Z, Wang S, Perdikaris P, Karniadakis G E 2021 *J. Heat Transfer* **143** 060801
- [28] Lu L, Jin P, Pang G, Zhang Z, Karniadakis G E 2021 *Nat. Mach. Intell.* **3** 218
- [29] Li Z, Kovachki N, Azizzadenesheli K, Liu B, Bhattacharya K, Stuart A, Anandkumar A 2021 *Proc. 9th Int. Conf. Learn. Represent (ICLR)*
- [30] Yang A, Sun Y, Wang J, Wang P, Li N 2026 *Chin. J. Phys.* **99** 12
- [31] Wang P, Sun Y, Li S 2025 *Nonlinear Dyn.* **113** 31541
- [32] Yang A, Xu S, Liu H, Li N, Sun Y 2025 *Nonlinear Dyn.* **113** 1523
- [33] Givoli D 1992 *Numerical Methods for Problems in Infinite Domains* (Amsterdam: Elsevier Science)
- [34] Hahn D W, Özisik M N 2012 *Heat Conduction* (John Wiley & Sons)
- [35] Reddy J N, Gartling D K 2010 *The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics* (3rd Ed.) (Boca Raton: CRC Press)
- [36] Anderson D, Tannehill J C, Pletcher R H, Munipalli R, Shankar V 2020 *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer* (CRC Press)
- [37] Ozisik M N 2018 *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications* (Routledge)
- [38] Gosselin L, Tye-Gingras M, Mathieu-Potvin F 2009 *Int. J. Heat Mass Transfer* **52** 2169
- [39] Wu Y, He K 2018 *Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV)* 2018 pp3-19
- [40] Luo W, Li Y, Urtasun R, Zemel R 2016 *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* **29** 4898
- [41] Kayhan O S, van Gemert J C 2020 *IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, June 13-19, 2020 pp14248-14258

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Convolutional neural network-accelerated thermal field inversion*

ZHONG Jiachen¹⁾ ZHU Changliang^{2)†} SHEN Xiangying^{1)‡}¹⁾ (*School of Science, Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China*)²⁾ (*Department of Physics, School of Science, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China*)

(Received 25 December 2025; revised manuscript received 9 February 2026)

Abstract

Accurate acquisition of the thermal diffusivity tensor for anisotropic materials is critical for the thermal management of advanced electronic devices and the non-destructive testing of composite materials. However, traditional transient measurement methods struggle to effectively decouple directional components, while numerical iteration-based inversion methods face challenges such as high computational costs and susceptibility to local minima. To address these issues, this paper proposes a convolutional neural network (CNN) inversion framework integrated with physical consistency constraints, aiming to achieve a rapid and precise mapping from transient thermal field image sequences to anisotropic thermal diffusivity tensors. Based on the amortized inference paradigm, a deep network architecture comprising a multi-scale feature extraction backbone and a physical projection layer is constructed. To resolve the strong coupling of anisotropic parameters under central point source excitation, a multi-source ring excitation strategy is designed to enhance the identifiability of heat flow directions. Additionally, a mask-aware global pooling mechanism is introduced to eliminate boundary effect interference. In terms of training strategy, a two-stage scheme combining parameter-supervised pre-training with physics-consistency fine-tuning is adopted, where the dynamic constraints of the heat conduction partial differential equation (PDE) are incorporated into the loss function as a regularization term. Numerical experiments demonstrate that the proposed method can independently and accurately decouple the principal diffusion coefficients, with an average relative error controlled within 3%. Furthermore, the physical consistency constraint significantly improves inversion robustness in the small diffusion coefficient regime. Compared with traditional iterative algorithms and standard physics-informed neural networks (PINNs), this framework accelerates the inversion speed to the millisecond level, realizing “once-trained, real-time inference”, thereby providing an efficient computational paradigm for real-time photothermal imaging detection of anisotropic materials.

Keywords: anisotropic diffusion, deep learning, physical consistency, amortized inference**DOI:** [10.7498/aps.75.20251763](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251763)**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251763](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251763)

* Project supported by the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2025B1515020077, 2024A1515030139) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12205138, 12505047, 12447161).

† Corresponding author. E-mail: zhucl@sustech.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: shenxy66@sysu.edu.cn



卷积神经网络加速热场反演

钟嘉晨 朱昌良 沈翔瀛

Convolutional neural network-accelerated thermal field inversion

ZHONG Jiachen ZHU Changliang SHEN Xiangying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070001 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251763

CSTR: 32037.14.aps.75.20251763

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251763>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于注意力卷积神经网络的高质量全息图快速生成算法

Fast generation algorithm of high-quality holograms based on attention convolutional neural network

物理学报. 2025, 74(8): 084203 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241713>

基于卷积神经网络的白蚀缺陷超声探测

Ultrasonic detection of white etching defect based on convolution neural network

物理学报. 2022, 71(24): 244301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221504>

深度学习代理模型的容性耦合氩等离子体流体模拟: 非对称推理与定量可信边界

Capacitively coupled argon plasmas fluid simulations with deep learning surrogate model: Asymmetric inference and quantitative trust boundaries

物理学报. 2025, 74(23): 235205 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251290>

基于物理信息神经网络的绝热捷径动力学分析

Dynamic analysis of shortcut to adiabaticity based on physical information neural network

物理学报. 2025, 74(11): 114204 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250147>

利用深度学习从质子成像反演激光等离子体中的磁场分布

Reconstruction of magnetic field distributions in laser plasma interaction from proton radiography by deep learning

物理学报. 2026, 75(3): 114204 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251243>

基于轻量残差复合增强收敛神经网络的粒子场计算层析成像伪影噪声抑制

Artifact noise suppression of particle-field computed tomography based on lightweight residual and enhanced convergence neural network

物理学报. 2024, 73(10): 104202 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231902>