

· 综述 ·

基于物理信息深度学习的高分子流变学研究：挑战、方法与应用

祁纪浩 陈欣 庞志威 林增 王超元 刘虎 沙金* 白志山

(华东理工大学机械与动力工程学院 上海 200237)

摘 要 高分子流变学旨在理解材料从微观到宏观的流动与变形特性,但传统建模方法在处理复杂非线性、多尺度模拟及数据解析方面长期面临挑战.物理信息深度学习(PIDL)通过将流变学物理定律嵌入深度神经网络,减少对大量数据的依赖,提高模型泛化能力和物理合理性,为解决高分子流变学面临的挑战提供新的途径.通过探讨PIDL的基本原理,包括其模型架构、物理信息损失函数设计(如MSE、MAE及稀疏/残差损失)和损失函数优化方法(如梯度下降、自适应权重调整),并分析PIDL在高分子流变学中的具体应用,涵盖了概率模型、生成式模型、神经算子、图神经网络和强化学习等多种模型架构,展示其在参数优化、流变特性预测、逆问题求解及数字孪生集成等方面的潜力.尽管PIDL展现出显著优势,但仍面临数据获取成本高、模型可解释性弱、多尺度求解精度不足及鲁棒性等问题.未来发展方向包括利用多保真技术、物理信息增强数据、优化算法、结合数字孪生、推断因果关系以及应用元学习和可解释人工智能(XAI)来提升模型性能和实用性.

关键词 物理信息深度学习, 高分子流变学, 建模与仿真, 智能预测与优化

引用: 祁纪浩, 陈欣, 庞志威, 林增, 王超元, 刘虎, 沙金, 白志山. 基于物理信息深度学习的高分子流变学研究: 挑战、方法与应用. 高分子学报, 2025, 56(11), 1910–1925

Citation: Qi J. H.; Chen X.; Pang Z. W.; Lin Z.; Wang C. Y.; Liu H.; Sha J.; Bai Z. S. Physics-informed deep learning for polymer rheology: investigating challenges, methodologies, and applications. *Acta Polymerica Sinica*, 2025, 56(11), 1910–1925

流变学是研究物质流动和变形的学科,其主要目的在于从微观到宏观的多尺度上了解材料的流动特性和结构特征,从而建立符合实际的介观和宏观的本构模型,并且进行实验验证,最终发展出可靠的经济的实验方法和计算方法推动相关领域应用^[1].高分子流变学研究高分子材料在流动和变形中的线性与非线性黏弹性特性,涵盖剪切黏度、拉伸黏度、法向应力差和应力松弛等关键特性,目标是优化加工工艺、设计高效设备,并解决流动不稳定性、表面缺陷等问题.研究成果广泛应用于挤出、注塑、吹塑、热成型、纤维

纺丝和增材制造等领域,对提升产品质量、降低成本和开发新材料意义重大^[2,3].

机器学习是由新的学习算法和理论的发展以及在线数据可用性和低成本计算的持续爆炸式增长推动的^[4,5].近年来,将物理信息机器学习(physics-informed machine learning, PIML)融入高分子流变学并解决实际问题成为当下时兴的研究课题^[6,7].通过提供模块化和可快速迭代、易于扩展且支持多物理场耦合的建模框架实现快速求解偏微分方程(partial differential equations, PDE),它可以探索巨大的设计空间、识别多维关联、管

2025-06-26收稿, 2025-08-15录用, 2025-09-26网络出版; 国家杰出青年科学基金(基金号 22225804)、国家自然科学基金(基金号 22408101)、上海市自然科学基金(基金号 25ZR1401085)和贵州省科技支撑计划(项目号 黔科合支撑 [2025] 一般091)资助.

* 通信联系人, E-mail: sjin@ecust.edu.cn

doi: 10.11777/j.issn1000-3304.2025.25155; CSTR: 32057.14.GFZXB.2025.7457

理病态问题^[8]. 这些优势使得机器学习已成为研究流体流动的常用工具, 特别是当与现有领域知识和物理系统研究产生的长期积累的实验准则与理论判据相结合^[9]. PIML泛指在一般机器学习框架中显式地耦合物理定律、守恒方程或领域知识的总体方法论, 其范畴既包括浅层模型(如高斯过程、稀疏回归), 也涵盖深度神经网络(deep neural network, DNN). 换言之, PIML是传统机器学习在“先验物理约束”维度上的自然扩展, 而非独立的新范式; 而物理信息深度学习(physics-informed deep learning, PIDL)特指以为DNN函数逼近器, 并以残差形式的物理方程作

为损失项的一类PIML子集^[10], 可以减少对大量训练数据的依赖, 提高模型的泛化能力和可解释性^[11], 同时确保模型输出遵循物理定律. 此外, PIDL还涉及到不确定性量化、贝叶斯方法、对抗性学习等多个方面, 为解决复杂的物理问题提供新的视角和工具^[12].

本综述依次梳理传统高分子流变学方法的不足, 阐明嵌入先验物理知识的PIDL如何提升预测精度, 并解析其损失函数与反馈优化机制; 随后探讨PIDL常用建模策略, 评估数据质量、泛化能力与多尺度求解等挑战, 总结现有解决方案及其未来方向, 整体思路如图1所示.

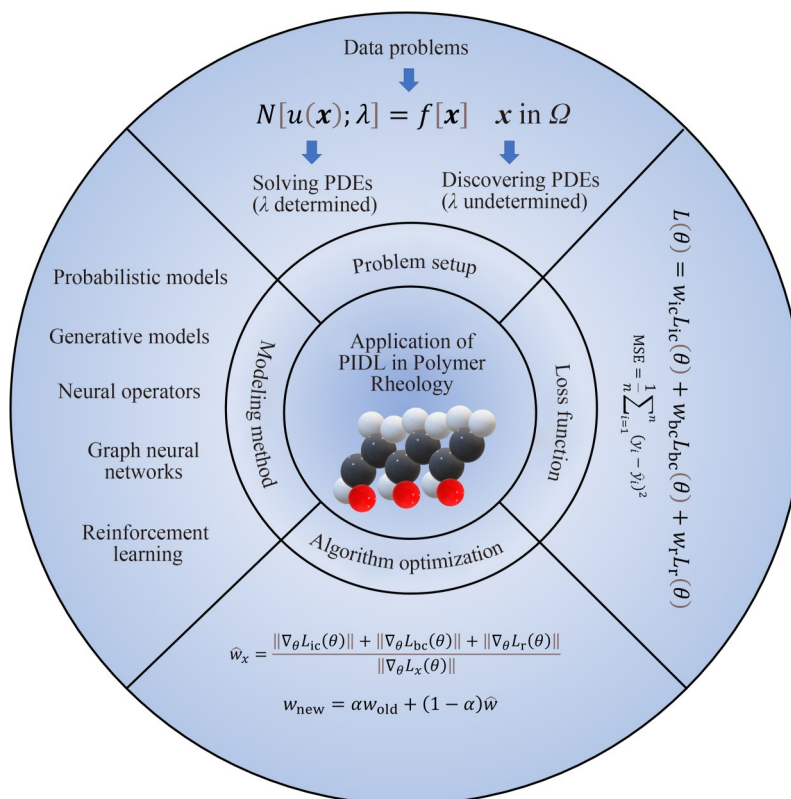


Fig. 1 The application framework of physics-informed deep learning in polymer rheology presented in this review.

1 高分子流变学面临挑战

流变学研究物质在应力作用下的流动和变形行为, 其特别关注黏性、弹性和塑性等物质属性, 以及黏度和剪切应力等核心参数, 并通过构建本构方程来描述这些属性和参数在不同条件下的表现. 其中, 黏度衡量流体对变形的抵抗能力, 而剪切应力与剪切速率之间的关系定义了流体的流动特性^[13]. 当前, 高分子流变学领域的主要研究方向集中在以下4个方面: 材料科学层面

深入探究聚合物、石油矿物及3D打印材料的流变性能及其环境依赖性; 流动预测层面研究流体扩散、界面流变行为及微尺度流动预测模型的开发; 聚合物物理层面解析分子结构-链动力学-宏观流变行为关联及其工业优化; 复合材料层面揭示界面科学、微观结构与宏观流变性能的耦合机制及其在高性能应用中的潜力, 详见表1.

高分子流变学目前面临的挑战和问题主要集中在流变学建模、多尺度方法和流变数据解析3个方面, 见表2.

Table 1 Research directions and contents of rheology.

Research direction	Research content	Ref.
Material science	In-depth investigation of the rheological properties of polymers, petroleum minerals, and 3D printing materials, and analysis of their performance changes different under environmental conditions.	[14–17]
Flow prediction	Study of fluid diffusion, rheological properties, interfacial rheological behavior, microfluidic technology, and the development and practical application of rheological behavior prediction models.	[18–20]
Polymer physics	Investigation of the relationship between molecular structure, chain dynamics of polymer materials, and their rheological behavior, as well as performance optimization in industrial applications.	[21–23]
Composite materials	Exploration of the interfacial science, microstructure, and macroscopic rheological properties of composite materials, and their potential in high-performance applications.	[24–26]

Table 2 State-of-the-art and limitations of traditional models, multiscale coupling strategies, and rheological data interpretation in polymer rheology.

Dimension	Mainstream approaches	Key limitations
Constitutive modeling	Oldroyd-B, Giesekus, PTT, XPP equations	High-shear non-linearity, temperature coupling, limited predictive accuracy for complex flows.
Multiscale coupling	MD-FE coupling, Lattice Boltzmann + FEM, Heterogeneous Multiscale Method	Scale-bridging gaps, prohibitive computational cost, ambiguous interface conditions.
Data analysis and inversion	Rotational rheometer, capillary rheometer, microfluidics, CFD-based parameter identification	Narrow measurement window, noisy boundary conditions, ill-posed inverse problems.

(1) 传统模型的局限性与挑战. 当前流变学模型在处理行为复杂的材料时, 难以准确地建立本构模型^[27]. 传统本构模型往往无法精确捕捉非线性、时间依赖性和温度依赖性的流变行为. 由于聚物流体本构方程缺乏准确性、缺乏普遍性且难以求解流动问题, 导致非线性黏弹性现象只能被半定量地理解^[28].

(2) 多尺度方法的需求. 对于多相多组分复杂流体的流变特性, 需要采用多尺度方法来进行研究. 当前研究对如何实现不同尺度间的有效贯通、不同尺度间结构和性能关系的认知存在断层^[29].

(3) 流变数据解析的挑战. 实际物质流变数据获取成本高, 依赖简化假设的模型反演和参数恢复往往难以达到较好的准确性^[30], 导致在处理实际问题时准确性不足. 计算流体动力学(CFD)多模拟理想化条件, 对于现实流变数据的缺失或噪声边界条件等影响缺乏定量化考察手段^[9].

2 高分子流变学中的 PIDL 方法

与知识图谱、逻辑规则、人类反馈等其他先验知识相比, 物理知识因其独特的表现形式和内

在规律, 需专门设计才能嵌入机器学习模型^[6], PIML 正是通过将这类经过理论与实验双重验证的物理知识集成到模型中, 使其在遵循物理定律的同时具备数据驱动预测能力^[8]. 其中, 由 Raissi 等^[31]提出的物理信息神经网络(physics-informed neural network, PINN)方法, 通过学习结合先验知识的物理信息约束、数据边界/条件约束以及神经网络拟合偏差的损失函数项实现神经网络的学习和推理^[31,32], 用以求解 PDE 或常微分方程(ordinary differential equations, ODE). 通过引入适当的观察, 归纳或学习偏差, 能够有效地缓解训练数据短缺的问题, 并显著提高模型的泛化能力、可解释性和鲁棒性, 确保预测结果的物理合理性^[7].

随着机器学习在复杂的学习算法和高效预处理技术方面的进步, 物理信息机器学习向越来越深入的网络架构发展, 这种学习能力进步可总结为 PIDL^[33]. PIDL 利用具有大量层和参数的神经网络的形成多层非线性处理单元学习数据的多级抽象表示, 并进行数据特征提取和转换, 使模型能够有效捕捉数据中潜在的复杂结构和模式^[34],

在解决实际工程中的逆问题和高维问题，尤其在解决病态和逆问题时特别有效^[4,8]。此外，PIDL可以利用不规则分布在整个时空域的训练点，一次获得整个时空域的解，从而避免构建计算成本高昂的网格的需要^[31]。

2.1 PIDL模型架构

面向由少量数据或噪声实验观察描述的工程问题，PIDL将已知数据问题转化为微分方程的求解，通过将物理定律嵌入损失函数，采用自适应学习机制和优化反馈过程，使模型能够实时调整以满足物理约束。物理基本问题可转化为如下形式的微分方程求解^[31]：

$$N[u(\mathbf{x}); \lambda] = f[\mathbf{x}] \quad \mathbf{x} \text{ in } \Omega \quad (1)$$

$$B[u(\mathbf{x})] = g[\mathbf{x}] \quad \mathbf{x} \text{ in } \partial\Omega \quad (2)$$

式中， Ω 定义解的空间域，为D维空间向量的一个子集； $\mathbf{x}=[x_1, x_2, \dots, x_{d-1}; t]$ 为时空坐标系向量(space-time coordinate vector)， $u(\mathbf{x})$ 表示随时间 t 和空间 $\mathbf{x}$ 变化的潜在(隐藏)解； $N[u; \lambda]$ 是一个由解 u 和参数 λ 参数化的非线性算子，包含各种非

线性项和偏导数；参数 λ 具体形式取决于所模拟的物理问题：当 λ 已知时，称为对微分方程的求解，当 λ 未知时，则称为对微分方程的发现； f 为表征问题数据的函数； B 表示为与问题相关的任意初始或边界条件的算子， g 是边界函数。

在PIDL方法中， $u(\mathbf{x})$ 是通过由一组参数 θ 参数化的网络模型计算预测的，目的是产生近似解：

$$\hat{u}_\theta(\mathbf{x}) \approx u(\mathbf{x}) \quad (3)$$

其中 $\hat{u}_\theta$ 表示由参数 θ 实现的网络模型近似解，参数 θ 表示网络模型中所有未知参数的向量，代表代理模型以及在反向问题中的未知参数 λ 。基于以上对PIDL待求解问题的定义，PIDL模型构建通常包含两个模块：模型架构模块和物理信息损失函数模块。其中模型架构模块向模型输入变量(如空间和时间坐标)并输出物理场变量；物理信息损失函数模块通过定义损失函数，使架构得以遵循物理定律，同时使用优化器最小化损失函数，针对不同的建模输出不同的预测或量化指标^[35]，如图2所示。

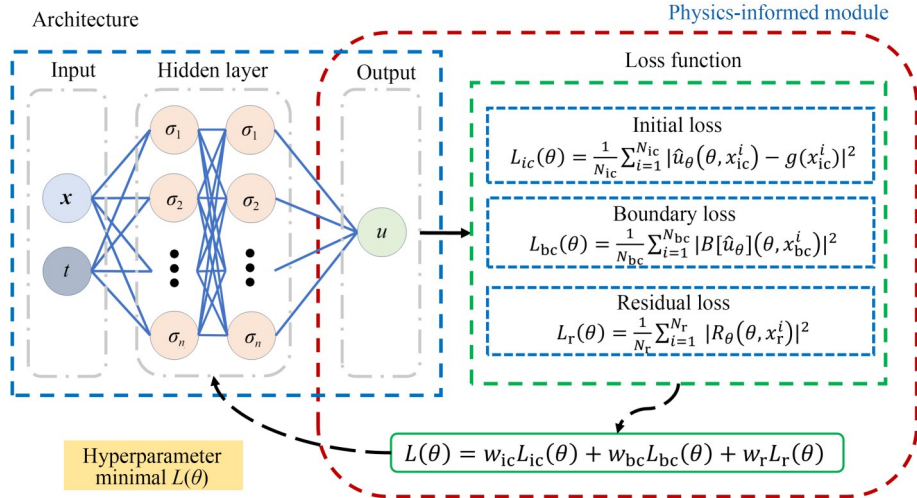


Fig. 2 PIDL network architecture diagram. The input vector and time are processed by the hidden layer of the model to obtain the output, and then the minimum value of θ is calculated through the loss function. The minimum value θ will be returned to the input layer of the network for iteration.

2.2 流变信息损失函数与优化

2.2.1 损失函数定义

损失函数用于评估深度学习模型的性能，它考虑算法当前状态与理想状态之间的差异，并指导优化网络参数 θ 的更新方向。通过特定算法最小化损失函数，能够逐步调整网络参数，以提高模型的整体性能^[8]。如公式(3)所示， $\hat{u}_\theta(\mathbf{x})$ 表示未

知解 $u(\mathbf{x})$ 的模型近似解，其PIDL模型损失函数 $L(\theta)$ 可定义为^[36]：

$$L(\theta) = w_{ic} L_{ic}(\theta) + w_{bc} L_{bc}(\theta) + w_r L_r(\theta) \quad (4)$$

$$L_{ic}(\theta) = \frac{1}{N_{ic}} \sum_{i=1}^{N_{ic}} |u_\theta(\theta, x_{ic}^i) - g(x_{ic}^i)|^2 \quad (5)$$

$$L_{bc}(\theta) = \frac{1}{N_{bc}} \sum_{i=1}^{N_{bc}} |B[u_\theta](t_{bc}^i, x_{bc}^i)|^2 \quad (6)$$

$$L_r(\theta) = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} |R_\theta(t_r^i, x_r^i)|^2 \quad (7)$$

$$R_\theta(t_r, x_r) = \frac{\partial \hat{u}_\theta}{\partial t}(t_r, x_r) + N[\hat{u}_\theta](t_r, x_r) \quad (8)$$

式中, $L_{ic}(\theta)$ 表示初始条件损失, $L_{bc}(\theta)$ 表示边界条件的损失值, $L_r(\theta)$ 表示PDE的残差损失; w 表示各个损失项的权重, 其会随着每次迭代进行更新; x_{ic} 、 x_{bc} 、 x_r 分别表示初始条件、边界条件、PDE残差的采样点, 可以是固定网格的顶点, 也可以是每次迭代中随机采样的点; N 表示采样点的数量; R 表示PDE的残差函数, 指在给定的时空点 (t_r, x_r) 处神经网络的预测解和实际PDE方程的解之间的偏差。

在流变黏度预测中, 通常使用应用均方误差

(mean squared error, MSE)和平均绝对误差(mean absolute error, MAE)计算模型预测的对数黏度与实际测量值之间的误差和量化模型预测的准确性^[37]. MSE和MAE的公式如下:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (9)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (10)$$

式中, y_i 为实际值, $\hat{y}_i$ 为预测值, n 为样本数量. MSE对较大的误差有更大的惩罚, 因此对异常值非常敏感; 而MAE对每个误差的惩罚是线性的, 因此对异常值的惩罚不如MSE严重。

其他表征物质流变特性的本构方程以及对应特性的损失函数如表3所示。

Table 3 The constitutive equation and loss function of the rheological properties of substances.

Rheological properties	Constitutive equations	Loss function
Viscosity	Modified Bingham model:	$L = L_r + \alpha L_{bc} + \beta L_{ic}$
	$\tau = \tau_0 + \mu_p \dot{\gamma} + C \dot{\gamma}^2$	$L_r = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^4 \sum_{n=1}^{N_r} r_{\dot{\gamma}}^n p_i ^2$
	Herschel-Bulkley model:	$L_{bc} = \frac{1}{N_{bc}} \sum_{n=1}^{N_{bc}} \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_{bc}^n ^2$
	$\tau = \tau_0 + a \dot{\gamma}^b$ ^[38]	$L_{ic} = \frac{1}{N_{ic}} \sum_{n=1}^{N_{ic}} \mathbf{u}^n - \mathbf{u}_{ic}^n ^2$ ^[40]
Viscoelasticity	Carreau model:	
	$\tau = [\eta_0 + (\eta_\infty - \eta_0) \{1 + (\lambda \dot{\gamma})^2\}^{\frac{1}{n} - 1}]^{\frac{1}{2}} \dot{\gamma}^{1 - \frac{1}{n}}$ ^[39]	
	Kelvin-Voigt linear viscoelastic model:	$L_{vcl} = \int_{\Omega} \psi(\varepsilon^{n+1}, \varepsilon_v^{n+1}) d\Omega +$
	$\sigma_t = E_0 \varepsilon + \eta \frac{d\varepsilon}{dt}$ ^[41]	$\Delta t \int_{\Omega} \xi(\dot{\varepsilon}_v^{n+1}, \dot{\varepsilon}_v^n) d\Omega - \int_{\Gamma_i} \hat{u}^{n+1} t^{n+1} d\Gamma$ ^[43]
Hyperelastic	Z-W-T nonlinear viscoelastic model:	
	$\sigma_t = E_0 \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + E_1 \int_0^t \dot{\varepsilon} e^{-\frac{t-\xi}{\theta_1}} d\xi + E_2 \int_0^t \dot{\varepsilon} e^{-\frac{t-\xi}{\theta_2}} d\xi$ ^[42]	
	Lopez-Pamies hyperelastic model:	$L_{hyp} = \int_{\Omega} \hat{\psi}(X, \theta) d\Omega + \Delta t \int_{\Omega} \hat{u}^T(X, \theta) f_b d\Omega$
	$\psi = \sum_{r=1}^M \frac{3^{1-A_r}}{2A_r} \mu_r (I_1^{A_r} - 3^{A_r}) - \sum_{r=1}^M \mu_r \ln J + \frac{\lambda}{2} (J-1)^2$ ^[43]	$- \int_{\Gamma_i} \hat{u}^T(X, \theta) t^0 d\Gamma$ ^[43]
Elastoplasticity	G'sell-Jonas model:	$L = \frac{1}{n_{col}} \ (\sigma_r(r) - \sigma_\tau(r)) - r \frac{d\sigma_\theta(r)}{dr}\ ^2$
	$\sigma(\varepsilon, \dot{\varepsilon}) = K e^{h\varepsilon^2} (1 - e^{-W\varepsilon}) \dot{\varepsilon}^m e^{e/T}$ ^[42]	$+ \frac{1}{n_{col}} \ 2(\sigma_r(r) - \sigma_\tau(r)) + r \frac{d\sigma_\tau(r)}{dr}\ ^2$
		$+ \frac{1}{n_b} \ \sigma_r(a) - p\ ^2 + \frac{1}{n_b} \ \sigma_r(b) - p_0\ ^2$ ^[44]

此外, 损失函数还可以分类为稀疏损失函数或者残差损失函数. 常见稀疏损失函数方法包括L1正则化^[45]、总变分正则化^[46]、稀疏编码^[45]、压缩感知^[45]、稀疏径向基函数(RBF)^[47]、稀疏网格方法^[48]和稀疏张量分解^[49]等. 例如, 基于弱SINDy算法的损失函数可以用于识别稀疏非线性动态系统, 其稀疏损失函数如下^[50]:

$$L(\lambda) = \frac{\|G(\omega_\lambda - \omega_{LS})\|_2^2}{\|G\omega_{LS}\|_2^2} + \frac{\#I_\lambda}{S_j} \quad (11)$$

式中, $L(\lambda)$ 为损失函数, λ 是稀疏性正则化参数, ω_λ 为输出的稀疏解, ω_{LS} 是最小二乘解, G 是Gram矩阵, $\|\cdot\|_2$ 是欧几里得范数, $\#I_\lambda$ 为 ω_λ 中非零元素的数目, S_j 是模型库中项的总数. 稀疏损失函数可以在保持模型准确度的同时, 提高模型

的透明性.

对于一个给定的 $F(u)=0$, 其残差损失函数可定义为:

$$L_{\text{res}} = \int_{\Omega} |F(u(x))|^2 dx \quad (12)$$

式中, Ω 是 PDE 的定义域, x 是空间坐标. 在实际应用中, 这个积分通常通过数值方法(如蒙特卡罗积分或网格积分)来近似. 此外, 基于最小二乘加权残差(LSWR)方法残差损失函数^[51], 分别从平衡方程和边界条件中计算残差的平方, 并采用无量纲形式, 函数形式如下:

$$L = \chi_1 \int_{\Omega} R_g^2 d\Omega + \chi_2 \int_{\Gamma_i} R_i^2 d\Gamma_i = 0 \quad (13)$$

式中, R_g 是平衡方程的残差, R_i 是牵引边界条件的残差, Ω 是计算域, Γ_i 是牵引边界. 无量纲的比例因子 χ_1 和 χ_2 用于平衡不同损失项的尺度, 其选择与计算域中采样点的平均间距有关.

2.2.2 损失函数优化

常用的损失函数优化方法包括梯度下降^[36]、自适应学习率算法^[52]、正则化方法^[45]、贝叶斯优化^[53]等.

(1) 梯度下降. 通过计算每个损失项梯度的大小来自动调整权重 w , 其核心思想是确保每个加权损失项的梯度范数大致相等, 避免模型在训练过程中对某些损失项过度敏感. 如公式(4)中的权重 w 更新公式如下^[36]:

$$\hat{w}_{\text{ic}} = \frac{\|\nabla_{\theta} L_{\text{ic}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{bc}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{r}}(\theta)\|}{\|\nabla_{\theta} L_{\text{ic}}(\theta)\|} \quad (14)$$

$$\hat{w}_{\text{bc}} = \frac{\|\nabla_{\theta} L_{\text{ic}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{bc}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{r}}(\theta)\|}{\|\nabla_{\theta} L_{\text{bc}}(\theta)\|} \quad (15)$$

$$\hat{w}_{\text{r}} = \frac{\|\nabla_{\theta} L_{\text{ic}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{bc}}(\theta)\| + \|\nabla_{\theta} L_{\text{r}}(\theta)\|}{\|\nabla_{\theta} L_{\text{r}}(\theta)\|} \quad (16)$$

式中, $\hat{w}$ 为更新后的对应权重, ∇_{θ} 表示参数 θ 的梯度, $\|\cdot\|$ 表示 L^2 范数. 在每个单独的权重更新后, 使用移动平均更新全局权重为 w_{new} , 公式如下:

$$w_{\text{new}} = \alpha w_{\text{old}} + (1 - \alpha) \hat{w} \quad (17)$$

式中, 参数 α 决定旧值和新值之间的平衡, 最后通过梯度下降更新参数 θ :

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \eta \nabla_{\theta} L(\theta_n) \quad (18)$$

式中, η 表示学习率, 决定在梯度方向上移动的步长. 通过梯度下降算法更新的权重, 确保每个加权损失项的梯度范数保持一致, 防止模型在训练过程中对特定损失项的过度拟合, 进而忽略了

其他损失项的重要性.

(2) 自适应权重调整. 自适应损失函数的核心是让神经网络集中注意力在求解困难的区域上, 训练网络同时最小化损失并最大化自适应权重实现. 通过数据驱动损失衡量预测值与观测数据之间的差异的方法, 利用自适应权重参数集合来确定损失的不确定性. 对应的自适应损失函数如下^[52]:

$$L(\epsilon; \theta; N) = \frac{1}{2} \sum_i \epsilon_i^2 L_{\text{PDE}}(\theta; N_i) + \log(\epsilon_i) \quad (19)$$

式中, ϵ_i 是自适应权重, θ 是模型参数, N_i 是与第 i 个损失项相关的数据点数量, L_{PDE} 是 PDE 残差的损失函数. 通过这种方法, 可以将相对 L^2 误差降低大约 2 个数量级, 与传统物理信息网络相比显现出更好的性能.

(3) 正则化. 正则化指在有限的训练集或不充分的迭代下, 通过对模型复杂度或平滑度施加惩罚, 实现对未见数据的良好泛化. 通过正则化损失项, 可以将不同数量级的损失项调整到大致相同的数量级, 允许算法在优化过程中同步优化所有损失项. L1 正则化与 L2 正则化是常用的两种正则化技术, 公式如下^[45]:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (20)$$

(4) 贝叶斯优化(Bayesian optimization, BO). 贝叶斯优化是一种针对非凸、高维、带噪声优化问题的黑盒优化框架, 其通过高斯过程代理模型近似目标函数, 利用先验均值和协方差函数定义先验分布, 为输入点提供后验分布, 并通过迭代数据采集和模型更新, 实现目标函数的优化^[53]. 此外, 通过引入物理信息修改高斯过程中核函数选择, 从而将物理信息整合到 BO 框架中^[54], 可以提高模型的预测能力和优化过程的效率.

3 PIDL 建模及高分子流变学应用

在高分子流变学中, PIDL 在解决高分子流变学中的参数优化、流变特性预测、逆问题求解和实时流体状态诊断等关键问题方面具有独特的应用优势. 首先, 通过从数据集中捕获潜在模式进行非线性建模, 利用先验模型生成具有物理精确时空相干性的真实瞬时流场, 能够揭示影响流体行为的深层次流变因素^[8,55]; 其次, 通过物理空间限制解空间, 以数据驱动和模型驱动混合的方式实现对复杂流变行为特征的理解和预测^[56];

再次, 将物理定律和统计学习技术相结合, 减少对高质量流变数据的需求, 有效提高对于流变行为模拟和预测的准确性^[8,57]. 最后, 将数字孪生融入到PIDL中的相关研究逐渐受到关注. 例如, 针对井筒清洁中的岩屑床厚度和高压高温(HPHT)条件下的流变特性的实时监控^[58], 应用CFD模拟和实验数据训练自动化学习模型, 并部署于数字孪生体中, 实现实时监控和预测钻井液流变特征变化. 基于多保真图神经网络架构(MF-RhiGNet)^[59]将数字孪生和机器学习算法结合起来, 创建挤出机装配的数字孪生模型, 以预测使用熔融丝材制造工艺打印的聚乳酸部件的性能. “数字流变仪”孪生体^[60]通过模型预测与实验数据相结合, 使用图神经网络挖掘流体内部微

观结构及其相互作用的复杂性特征.

当前, 研究者已建立起多种专门用于深度学习的框架, 以支持新算法和评估指标的开发, 包括Tensorflow^[61]、PyTorch^[62]、Keras^[63]、PaddlePaddle^[64]等, 并在此基础上构建用于PIDL的框架, 如DeepXDE^[65]、NVIDIA SimNet^[66]、PyDEns^[67]、NeuroDiffEq^[68]等, 用以支持多种算法的发展, 有效结合物理知识和数据驱动方法, 解决各种复杂的物理问题. 本节将当前常见的可与流变信息深度学习相结合模型架构分为5个类别: 概率模型、生成式模型、神经算子、图神经网络和强化学习, 如图3所示, 分别对各个模型架构原理及其优势进行阐述, 并介绍其当前应用现状.

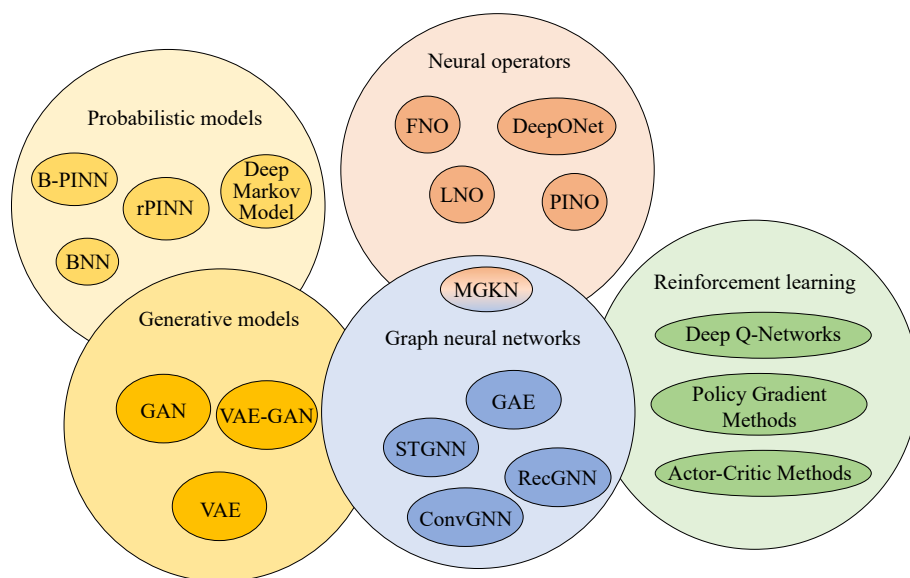


Fig. 3 Common deep learning model classification. The application of these deep learning models provides new ideas for polymer rheology.

3.1 概率建模

概率模型通过引入概率分布, 利用数学工具模拟现实世界中的随机事件和不确定性现象, 在处理复杂性和不确定性问题时具有显著优势. 通过结合贝叶斯推断和神经网络形成贝叶斯神经网络(BNN), 能够提供模型预测的不确定性估计^[69]. 贝叶斯物理信息神经网络(BPINN)应用BNN参数化神经网络, 并将物理模型整合到网络损失函数中: 将网络权重视为随机变量, 并假设它们遵循某种概率分布, 从而提供模型预测的不确定性估计^[70,71]. 此外, 概率物理约束贝叶斯学习框架(PPCBLF)将物理定律整合到贝叶斯神

经网络中模型中, 通过构建物理学知情的似然函数来确保贝叶斯模型输出满足物理约束, 特别适用于解决受物理定律严格限制的问题^[72]. 针对高质量数据稀缺问题, 多保真贝叶斯神经网络(MBNN)框架^[73]将DNN用于拟合低保真数据, BNN用于捕获低高保真数据间的相关性, PINN用于编码物理定律然后利用汉密尔顿蒙特卡洛(HMC)方法估计后验分布以量化不确定性. 此外, 利用贝叶斯方法结合卷积神经网络, 从图像中提取流变学特征, 并采用马尔可夫链蒙特卡洛方法估计模型参数不确定性, 预测沥青结合料流变性能^[74]. 针对多尺度模拟问题, 通过高斯过程

回归结合微观耗散粒子动力学模拟和宏观谱元方法, 自适应地选择关键采样点, 从而在保持准确性的同时, 显著减少昂贵的微观模拟数量^[75].

此外, 概率图形模型(probabilistic graphical models, PGMs)与深度学习融合, 概率图图信息神经网络(GINN)^[76]通过用深度神经网络替换概率图模型中的计算密集部分, 加快了模型对流变性质物理量的预测速度, 实现数据驱动的不确定性量化和决策支持. 非马尔可夫链动态模型基于Rouse-Bueche-Zimm 珠子-弹簧模型, 通过引入异质性和非马尔可夫效应, 结合内部黏度框架, 利用双曲余弦函数代替传统指数函数来更精准地刻画松弛行为, 显著提升对聚合物松弛和蠕变行为的描述能力^[77].

3.2 生成式模型

生成式模型通过概率建模估计并生成与原始数据分布相似的分布, 并基于生成分布计算给定输入变量下目标变量的条件概率. 常见的深度学习生成模型包括变分自编码器(VAE)、生成对抗网络(GAN)、潜在狄利克雷分配(LDA)、受限玻尔兹曼机(RBM)及其变体深度置信网络(DBN)等^[78]. VAE模型由编码器和解码器构成, 通过变分推断训练模型, 最小化输入数据的潜在表示与重构之间的差异, 同时最大化潜在表示的不确定性^[79]. 通过在编码与解码过程中嵌入条件信息, 能够从空间稀疏观测中重建非线性流动, 并量化预测的不确定性^[80]. 将贝叶斯推理及降维技术应用于VAE潜在空间数据的操控, 以此处理模型依赖性或者激励特性导致动态行为跨越多个响应机制的问题^[81,82]. 在VAE损失函数中引入涡度、动量和连续性方程等物理约束, 可基于二维平面测量数据实现三维湍流速度场的重构^[83]. 此外, 面向已知控制方程但系统参数或解的测量数据有限的随机微分方程问题, 如毛细管流变测试场景, 通过最小化物理约束微分算子重构数据和训练数据在潜在和高维输入空间中的最大均值差异, 在流体模拟、跨尺度流体动力学模拟等方向具有潜在应用场景^[84,85].

2014年提出的GAN模型^[86]通过生成模型G和判别模型D的对抗过程来实现高质量数据生成、去噪和增强. 其中G用于捕捉数据分布, D用于估计样本来自训练数据而非G的概率, 最大化D的错误概率以实现非结构化数据的生成和保

持数据统计属性^[87]. 在此基础上, 条件GAN模型(cGAN)^[88]可以用于进行多相流在多孔介质孔尺度建模的研究, G负责根据输入的多孔介质结构预测入侵流体的分布, D区分生成器输出的图像与真实数据之间的差异, 条件输入是多孔介质的几何结构, G和D通过交替执行梯度下降步骤进行优化, 实现多孔介质结构的预测. 将U-Net编码-解码器架构融合到G中, 编码器通过连续的卷积和池化操作逐步提取不同尺度的特征, 解码器通过上采样和卷积重建流场的高分辨率表示, 最终通过卷积网络的D从随机分布的稀疏数据中重建全局湍流尾迹^[89]. 混合深度对抗自编码器(VAE-GAN)^[90]结合VAE和GAN的架构, 通过卷积神经网络压缩高维数据至低维表示, 实现参数化非线性流体流动的快速准确预测. 基于LSTM的VAE-GAN方法^[91]将LSTM网络应用于VAE的编码器和GAN的生成器与判别器中, 用于时间序列异常检测. 基于GAN的超分辨率重建模型^[92]应用G从低分辨率输入生成高分辨率的湍流流场数据, D区分生成的高分辨率流场数据和真实的高分辨率流场数据, 实现高分辨率流场的重建. 针对多尺度建模问题, VAE-GAN通过在有限的真实数据基础上生成高质量的虚拟数据, 实现从微观成分到宏观黏弹性性能的多尺度关联建模; 通过在多种成分数据上训练, 模型能够泛化到未见的成分组合, 并在复杂工况下准确预测沥青结合料成分以及黏弹性性能^[93].

3.3 神经算子

神经算子能够在不同的边界/初始条件和加载下实时推断系统响应, 无需进一步训练或仅需非常轻微的训练. 2019年首次提出的深度算子网络(DeepONet)^[94]通过设置分支网络(branch net)接受连续坐标、主干网络(trunk net)接受输入函数, 并分别输出特征, 最后通过点积合并两个网络输出, 解决了无限维函数空间中对非线性连续算子的逼近问题. 通过正则化方法, DeepONet能够引入物理信息约束^[95], 并通过多层模型有效捕捉非局部特性, 实现高效的算子近似. 与传统神经网络不同, 神经算子离散化不变性使其在不同网络结构和分辨率的数据时保持有效学习和泛化^[96]. 2021年提出的傅里叶神经算子网络(FNO)方法^[97]通过将输入函数映射到傅里叶空间来捕捉频谱信息, 利用算子网络学习频谱上的变换规则, 最后

通过逆傅里叶变换将输出映射回原始空间,提高网络的收敛速度和泛化能力.在此基础上结合物理信息约束,称为物理信息神经算子(PINO)^[98].首先在低质量模拟数据上进行初步训练FNO算子,在施加物理约束损失函数后使用高质量数据进行算子重构,并利用全解析模拟数据进行模型微调,解决了超分辨率预测和多尺度动态系统近似的问题.此外,拉普拉斯神经算子(LNO)利用拉普拉斯变换对输入空间进行分解,并引入输入空间函数与系统响应之间的物理意义明显的极点-留数关系,从而使算子更具可解释性和泛化能力^[99].将可积分核函数通过高斯-勒让德积分等方法引入神经算子网络^[100],不显式地定义特征空间和映射函数,能够实现不规则域上的算子学习,并提高模型的可解释性.在分子流变学实际应用中,针对多尺度模拟问题,将运动学和本构关系直接嵌入框架中,利用神经算子学习从宏观应变到微观物理行为的映射关系,从而在少量训练数据下实现高效、高精度的多尺度模拟,用于捕捉材料的非线性行为^[101].此外,神经网络算子与复杂流体本构方程融合, PINO与DeepONet或者FNO通过用傅里叶-空间或深度网络替代传统数值求解器,学习从随机流场函数到应力响应的泛化映射,一次性获得“流变仪数字孪生”.以Giesekus高分子熔体为例,应用4层FNO一次性学习10000条随机二维速度梯度历史到应力张量的映射;训练仅依靠本构方程残差作损失,无需实验数据,在100条未知剪切-拉伸耦合流场上, σ_{11} 、 σ_{22} 、 σ_{12} 的相对误差均小于3%,推理延迟毫秒级,比传统逐例求解快千倍,为高分子复杂加工场景提供了实时、零样本的数字孪生流变仪^[102].

3.4 图神经网络

图神经网络(GNNs)主要是为解决现实世界数据以非欧几里得域图形式存在的挑战,克服传统深度学习模型在处理非结构化数据时的局限性. GNNs通过学习节点和边的结构表示来处理各种机器学习任务^[103].常见GNN包括递归图神经网络(RecGNN)^[104]、卷积图神经网络(ConvGNN)^[105]、图自编码器(graph autoencoders, GAE)^[106]和时空图神经网络(spatial-temporal graph neural networks, STGNNs)^[107]等.

GNN在流变学中的应用优势在于其直接处

理不规则网格信息的能力和在数据合成/生成方面的潜力.通过将物质点状态表示为图中的节点,基于GNN的物质点模拟^[108]可以表征流体、刚体和可变形材料相互作用的复杂流变行为. GAE网络^[109]将分子拓扑结构作为图编码,结合拓扑描述符变分编码器方法,探索了高分子尺寸控制的条件下拓扑结构对高分子溶液黏度的影响.基于物理信息嵌入的图网络(physics-informed graph network, PIGN)方法^[110],将多模态和多保真数据与物理模型集成,通过图外微积分计算在图结构上模拟连续空间中微积分.采用ConvGNN处理具有非结构化网格的不规则域,配合有限维多项式基函数Galerkin公式输出节点解重建全域预测,并通过数据同化实现由稀疏观测数据推断未知参数^[111]. GNN还可以和神经算子进行结合,利用多尺度图核神经网络和V-cycle算法,学习到与网格无关的PDEs解算子,实现线性时间复杂度下的长距离相互作用捕捉,能够在不同网格分辨率下保持一致的性能,在Darcy流和Burgers方程上展现出优越的泛化能力^[112].针对多尺度建模, GNN能通过保留本构材料模型,预测全场微观应变并计算应力;通过在多种微观结构上训练,模型能够泛化到未见网格,并在复杂载荷路径下准确预测宏观应力-应变曲线^[113].

3.5 强化学习

强化学习(reinforcement learning, RL)通过试错学习最优策略,解决自然科学和工程中的决策问题.在每个时间步骤中,代理接收环境状态、选择动作、环境反馈奖励,并最大化长期累计奖励的期望值^[114],还可以结合深度学习自动提取复杂数据表示的能力,解决强化学习中的高维输入问题^[115].

将物理信息引入强化学习框架作为指导,结合奖励设计或对现有奖励函数增加物理信息的奖励或惩罚^[116],可有效减少因数据不足或噪声引起的误差.还可以通过LSTM-Autoencoder转换模型将Kuramoto-Sivashinsky(KS)方程嵌入模型增强学习(MBRL)框架,采用演员-评论家(AC)优化算法,解决混沌/湍流状态复杂动态系统非线性时空建模问题^[117].此外,将PINN作为深度强化学习(DRL)代理模型,可以基于近端策略优化(proximal policy optimization, PPO)算法,在流场探针数量条件下预测整个流场状态^[118].也可以

使用 DRL 算法与模型的交互学习最优控制策略, 实现对数据收集受限的非线性系统的处理, 在存在测量噪声和随机动态时展现出良好的性能^[119]. 针对多尺度建模, 变分多尺度强化学习通过强化学习自动发现非线性时空传输系统的降阶闭包模型, 无需依赖高保真数据即可实现稳健的闭包建模, 在黏性 Burgers 方程的模拟中展现出高精度和鲁棒性^[120]. 在流变行为的数字孪生中, DRL 也有应用场景, 如在微流控毛细管流聚焦装置中, 采用人工神经网络, 将感应信号映射到控制动作, 通过 PPO 算法解决两相流系统中液滴尺寸的闭环控制问题^[121].

4 未来展望

在 高 分 子 流 变 学 领 域 中, PIDL 已 经 在 高 分 子 流 动 行 为 预 测、本 构 模 型 建 模、多 尺 度 优 化 等 方 向 得 到 广 泛 的 应 用, 这 些 应 用 为 解 决 相 关 问 题 带 来 显 著 的 进 展, 但 是 该 技 术 仍 旧 面 临 一 些 局 限 性 和 挑 战. 流 变 学 数 据 获 取 成 本 较 高 且 可 能 存 在 噪 声, 从 而 限 制 模 型 的 训 练 和 预 测 精 度; 在 面 对 冲 击 等 极 端 条 件 时, 现 有 PIDL 模 型 难 以 提 供 合

理 的 近 似 解^[122]. 此 外, PIDL 模 型 通 常 为 黑 盒 模 型, 可 解 释 性 较 弱, 且 针 对 高 分 子 流 变 学 深 度 学 习 模 型 的 综 合 评 价 缺 乏 基 准. 在 处 理 多 尺 度 和 多 物 理 场 问 题 时, 深 度 学 习 模 型 对 本 构 模 型 的 模 拟 精 确 性 存 在 不 足^[123]; 即 使 回 归 模 型 与 物 理 知 识 一 致, 模 型 的 鲁 棒 性 仍 需 进 一 步 提 高. 最 后, 如 何 使 深 度 学 习 模 型 适 应 流 变 学 中 开 放 和 动 态 的 环 境, 是 一 个 亟 待 解 决 的 问 题.

为 应 对 上 述 挑 战, 高 分 子 流 变 学 中 PIDL 的 发 展 可 从 以 下 5 个 方 面 进 行 展 望: 首 先, 利 用 多 保 真 技 术, 确 保 模 型 在 面 对 新 的、未 见 过 的 数 据 时 仍 能 保 持 稳 定 和 可 靠 的 性 能. 其 次, 通 过 物 理 信 息 增 强 数 据, 提 高 模 型 在 现 实 世 界 数 据 条 件 下 的 适 用 性. 再 次, 优 化 算 法, 选 用 合 适 的 激 活 函 数 和 损 失 函 数, 设 计 轻 量 级 网 络 结 构, 以 提 升 模 型 性 能 并 降 低 成 本. 此 外, 可 以 利 用 数 字 孪 生 技 术 实 现 对 流 变 行 为 的 实 时 监 测 和 准 确 预 测, 通 过 学 习 成 果 优 化 性 能 产 品. 深 度 学 习 模 型 可 用 于 推 断 因 果 关 系, 为 决 策 提 供 支 持. 最 后, 利 用 元 学 习 等 方 法 增 强 模 型 泛 化 能 力, 并 进 一 步 应 用 可 解 释 性 人 工 智 能(XAI)技 术 提 高 模 型 的 可 解 释 性.



作者简介: 沙金,男,1982年生.华东理工大学副教授、硕士生导师.2004年在华东理工大学获得高分子材料科学与工程学士学位,2009年获得化工过程机械硕士学位,2011~2013年在美国威斯康辛麦迪逊大学访学,2014年在华东理工大学获得工学博士学位.获得上海市科技进步奖二等奖.主要研究方向为高性能材料成型制造及智能装备,及其在多元组分、功能化界面微图案及生物芯片系统中的应用.于*Lab on Chip*、*Biomacromolecules*、*Biomaterials*、*Composite Part A*等国际知名刊物上发表论文二十余篇.

REFERENCES

- 1 Wilson, D. I. What is rheology? *Eye*, **2018**, 32(2), 179–183.
- 2 Deshpande, A. P.; Krishnan, J. M.; Sunil Kumar, P. B., ed. *Rheology of complex fluids*. New York: Springer, **2010**, 171–191.
- 3 Polychronopoulos, N. D.; Vlachopoulos, J. Polymer processing and rheology. *Functional Polymers*. Cham: Springer International Publishing, **2019**, 133–180.
- 4 Mahesh, B. Machine learning algorithms—a review. *Int. J. Sci. Res.*, **2020**, 9(1), 381–386.
- 5 Bertolini, M.; Mezzogori, D.; Neroni, M.; Zammori, F. Machine Learning for industrial applications: a comprehensive literature review. *Expert Syst. Appl.*, **2021**, 175, 114820.
- 6 Meng, C. Z.; Griesemer, S.; Cao, D. F.; Seo, S.; Liu, Y. When physics meets machine learning: a survey of physics-informed machine learning. *Mach. Learn. Comput. Sci. Eng.*, **2025**, 1(1), 20.
- 7 Hao, Z. K.; Liu, S. M.; Zhang, Y. C.; Ying, C. Y.; Feng, Y.; Su, H.; Zhu, J. Physics-informed machine learning: a survey on problems, methods and applications. *arXiv E Prints*, **2022**, arXiv, 2211.08064.
- 8 Karniadakis, G. E.; Kevrekidis, I. G.; Lu, L.; Perdikaris, P.; Wang, S. F.; Yang, L. Physics-informed machine learning. *Nat. Rev. Phys.*, **2021**, 3(6), 422–440.

- 9 Sharma, P.; Chung, W. T.; Akoush, B.; Ihme, M. A review of physics-informed machine learning in fluid mechanics. *Energies*, **2023**, 16(5), 2343.
- 10 Yao, L. J.; Wang, J. X.; Chuai, M. Y.; Lomov, S. V.; Carvelli, V. Physics-informed machine learning for loading history dependent fatigue delamination of composite laminates. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, **2024**, 187, 108474.
- 11 Latrach, A.; Malki, M. L.; Morales, M.; Mehana, M.; Rabiei, M. A critical review of physics-informed machine learning applications in subsurface energy systems. *Geoenergy Sci. Eng.*, **2024**, 239, 212938.
- 12 Rao, C. P.; Sun, H.; Liu, Y. Physics-informed deep learning for incompressible laminar flows. *Theor. Appl. Mech. Lett.*, **2020**, 10(3), 207–212.
- 13 Xu, G. J.; Ji, C. J.; Xu, Y.; Yu, E. B.; Cao, Z. Y.; Wu, Q. H.; Lin, P. Z.; Wang, J. S. Machine learning in coastal bridge hydrodynamics: a state-of-the-art review. *Appl. Ocean. Res.*, **2023**, 134, 103511.
- 14 Zhao, F.; Zhang, Z. Y.; Yang, J. J.; Yu, J. X.; Feng, J. Y.; Zhou, H. X.; Shi, C. J.; Meng, F. N. Advanced nonlinear rheology magnetorheological finishing: a review. *Chin. J. Aeronaut.*, **2024**, 37(4), 54–92.
- 15 Alkalbani, A. M.; Chala, G. T. A comprehensive review of nanotechnology applications in oil and gas well drilling operations. *Energies*, **2024**, 17(4), 798.
- 16 Pipintakos, G.; Sreeram, A.; Mirwald, J.; Bhasin, A. Engineering bitumen for future asphalt pavements: a review of chemistry, structure and rheology. *Mater. Des.*, **2024**, 244, 113157.
- 17 Raihan, M. K.; Jagdale, P. P.; Wu, S.; Shao, X. C.; Bostwick, J. B.; Pan, X. X.; Xuan, X. C. Flow of non-Newtonian fluids in a single-cavity microchannel. *Micromachines*, **2021**, 12(7), 836.
- 18 Moradpour, N.; Yang, J. Y.; Tsai, P. A. Liquid foam: fundamentals, rheology, and applications of foam displacement in porous structures. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, **2024**, 74, 101845.
- 19 Ahuja, A.; Lee, R.; Joshi, Y. M. Advances and challenges in the high-pressure rheology of complex fluids. *Adv. Colloid Interface Sci.*, **2021**, 294, 102472.
- 20 Taira, K.; Hemati, M. S.; Brunton, S. L.; Sun, Y. Y.; Duraisamy, K.; Bagheri, S.; Dawson, S. T. M.; Yeh, C. A. Modal analysis of fluid flows: applications and outlook. *AIAA J.*, **2019**, 58(3), 998–1022.
- 21 Wu, S. L.; Chen, Q. Advances and new opportunities in the rheology of physically and chemically reversible polymers. *Macromolecules*, **2022**, 55(3), 697–714.
- 22 Huang, Q. When polymer chains are highly aligned: a perspective on extensional rheology. *Macromolecules*, **2022**, 55(3), 715–727.
- 23 Münstedt, H. Rheological measurements and structural analysis of polymeric materials. *Polymers*, **2021**, 13(7), 1123.
- 24 Romberg, S. K.; Kotula, A. P. Simultaneous rheology and cure kinetics dictate thermal post-curing of thermoset composite resins for material extrusion. *Addit. Manuf.*, **2023**, 71, 103589.
- 25 Ackermann, A. C.; Carosella, S.; Rettenmayr, M.; Fox, B. L.; Middendorf, P. Rheology, dispersion, and cure kinetics of epoxy filled with amine- and non-functionalized reduced graphene oxide for composite manufacturing. *J. Appl. Polym. Sci.*, **2022**, 139(8), 51664.
- 26 Song, H. W.; Li, X. L. An overview on the rheology, mechanical properties, durability, 3D printing, and microstructural performance of nanomaterials in cementitious composites. *Materials*, **2021**, 14(11), 2950.
- 27 Gonzalez-Saiz, E.; Garcia-Gonzalez, D. Model-driven identification framework for optimal constitutive modeling from kinematics and rheological arrangement. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2023**, 415, 116211.
- 28 Larson, R. G.; Desai, P. S. Modeling the rheology of polymer melts and solutions. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **2015**, 47, 47–65.
- 29 Sato, T.; Yoshimoto, K. Recent developments on multiscale simulations for rheology and complex flow of polymers. *Korea Aust. Rheol. J.*, **2024**, 36(4), 253–269.
- 30 Liu, N. P.; Zhang, D.; Gao, H.; Hu, Y. L.; Duan, L. C. Real-time measurement of drilling fluid rheological properties: a review. *Sensors*, **2021**, 21(11), 3592.
- 31 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.
- 32 Lai, Z. L.; Mylonas, C.; Nagarajaiah, S.; Chatzi, E. Structural identification with physics-informed neural ordinary differential equations. *J. Sound Vib.*, **2021**, 508, 116196.
- 33 Janiesch, C.; Zschech, P.; Heinrich, K. Machine learning and deep learning. *Electron. Mark.*, **2021**, 31(3), 685–695.
- 34 Dong, S.; Wang, P.; Abbas, K. A survey on deep learning and its applications. *Comput. Sci. Rev.*, **2021**, 40, 100379.
- 35 Das, S.; Tesfamariam, S. State-of-the-art review of design of experiments for physics-informed deep learning. **2022**, arXiv: 2202.06416.

- 36 Wang, S. F.; Sankaran, S.; Wang, H. W.; Perdikaris, P. An expert's guide to training physics-informed neural networks. **2023**, arXiv: 2308.08468.
- 37 Bilodeau, C.; Kazakov, A.; Mukhopadhyay, S.; Emerson, J.; Kalantar, T.; Muzny, C.; Jensen, K. Machine learning for predicting the viscosity of binary liquid mixtures. *Chem. Eng. J.*, **2023**, 464, 142454.
- 38 Nazar, S.; Yang, J.; Thomas, B. S.; Azim, I.; Ur Rehman, S. K. Rheological properties of cementitious composites with and without nano-materials: a comprehensive review. *J. Clean. Prod.*, **2020**, 272, 122701.
- 39 Khan, W. A.; Farooq, S.; Kadry, S.; Hanif, M.; Iftikhar, F. J.; Abbas, S. Z. Variable characteristics of viscosity and thermal conductivity in peristalsis of magneto-Carreau nanoliquid with heat transfer irreversibilities. *Comput. Meth. Programs Biomed.*, **2020**, 190, 105355.
- 40 Jin, X. W.; Cai, S. Z.; Li, H.; Karniadakis, G. E. NSFnets (Navier-Stokes flow nets): physics-informed neural networks for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 426, 109951.
- 41 Kimondo, J. J.; Said, R. R.; Wu, J.; Tian, C.; Wu, Z. Mechanical rheological model on the assessment of elasticity and viscosity in tissue inflammation: a systematic review. *PLoS One*, **2024**, 19(7), e0307113.
- 42 Ling, S. B.; Wu, Z.; Mei, J. Comparison and review of classical and machine learning-based constitutive models for polymers used in aeronautical thermoplastic composites. *Rev. Adv. Mater. Sci.*, **2023**, 62, 20230107.
- 43 Abueidda, D. W.; Koric, S.; Abu Al-Rub, R.; Parrott, C. M.; James, K. A.; Sobh, N. A. A deep learning energy method for hyperelasticity and viscoelasticity. *Eur. J. Mech. A/solids*, **2022**, 95, 104639.
- 44 Chen, X. X.; Zhang, P.; Yu, H. S.; Yin, Z. Y.; Sheil, B. Parsimonious universal function approximator for elastic and elastoplastic cavity expansion problems. *J. Geotech. Geoenviron. Eng.*, **2025**, 151(9), 04025093.
- 45 Tian, Y. J.; Zhang, Y. Q. A comprehensive survey on regularization strategies in machine learning. *Inf. Fusion*, **2022**, 80, 146–166.
- 46 Wang, M. H.; Wang, Q.; Chanussot, J.; Hong, D. F. L₀-l₁ hybrid total variation regularization and its applications on hyperspectral image mixed noise removal and compressed sensing. *IEEE Trans. Geosci. Remote. Sens.*, **2021**, 59(9), 7695–7710.
- 47 Florez, W. F.; Popov, V.; Gaviria-Cardona, J. P.; Bustamante, C. A.; Martínez-Tejada, H. V.; Garcia-Tamayo, E. A local collocation method with radial basis functions for an electrospinning problem. *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **2022**, 134, 398–411.
- 48 Rüttgers, A.; Griebel, M. Multiscale simulation of polymeric fluids using the sparse grid combination technique. *Appl. Math. Comput.*, **2018**, 319, 425–443.
- 49 Wang, B. Y.; Deng, L.; Qu, Z.; Li, S. C.; Zhang, Z.; Xie, Y. Efficient processing of sparse tensor decomposition via unified abstraction and PE-interactive architecture. *IEEE Trans. Comput.*, **2022**, 71(2), 266–281.
- 50 Messenger, D. A.; Bortz, D. M. Weak SINDy for partial differential equations. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 443, 110525.
- 51 Bai, J. S.; Rabczuk, T.; Gupta, A.; Alzubaidi, L.; Gu, Y. T. A physics-informed neural network technique based on a modified loss function for computational 2D and 3D solid mechanics. *Comput. Mech.*, **2022**, 71(3), 543–562.
- 52 Thakur, S.; Mitra, H.; Ardekani, A. M. Physics-informed neural network-based inverse framework for time-fractional differential equations for rheology. *Biology*, **2025**, 14(7), 779.
- 53 Wang, X. L.; Jin, Y. C.; Schmitt, S.; Olhofer, M. Recent advances in Bayesian optimization. *ACM Comput. Surv.*, **2023**, 55(13s), 1–36.
- 54 Khatamsaz, D.; Neuberger, R.; Roy, A. M.; Zadeh, S. H.; Otis, R.; Arróyave, R. A physics informed Bayesian optimization approach for material design: application to NiTi shape memory alloys. *NPJ Comput. Mater.*, **2023**, 9, 221.
- 55 Zhao, X. G.; Shirvan, K.; Salko, R. K.; Guo, F. D. On the prediction of critical heat flux using a physics-informed machine learning-aided framework. *Appl. Therm. Eng.*, **2020**, 164, 114540.
- 56 Kapoor, T.; Chandra, A.; Tartakovsky, D. M.; Wang, H. R.; Nunez, A.; Dollevoet, R. Neural oscillators for generalization of physics-informed machine learning. *Proc. AAAI Conf. Artif. Intell.*, **2024**, 38(12), 13059–13067.
- 57 Ahn, K. H.; Jamali, S. Data-driven methods in rheology. *Rheol. Acta*, **2023**, 62(10), 473–475.
- 58 Shirangi, M. G.; Aragall, R.; Osgouei, R. E.; May, R.; Furlong, E.; Dahl, T. G.; Thompson, C. A. Development of digital twins for drilling fluids: local velocities for hole cleaning and rheology monitoring. *J. Energy Resour. Technol.*, **2022**, 144(12), 123003.
- 59 Butt, J.; Mohaghegh, V. Combining digital twin and machine learning for the fused filament fabrication process. *Metals*, **2023**, 13(1), 24.

- 60 Mahmoudabadbozchelou, M.; Kamani, K. M.; Rogers, S. A.; Jamali, S. Digital rheometer twins: learning the hidden rheology of complex fluids through rheology-informed graph neural networks. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2022**, 119(20), e2202234119.
- 61 Abadi, M.; Barham, P.; Chen, J.; Chen, Z.; Davis, A.; Dean, J.; Devin, M.; Ghemawat, S.; Irving, G.; Isard, M.; Kudlur, M.; Levenberg, J.; Monga, R.; Moore, S.; Murray, D. G.; Steiner, B.; Tucker, P.; Vasudevan, V.; Warden, P.; Wicke, M.; Yu, Y.; Zheng, X. TensorFlow: A System for Large-Scale Machine Learning. in: *12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16)*. **2016**: 265–283.
- 62 Paszke, A.; Gross, S.; Massa, F.; Lerer, A.; Bradbury, J.; Chanan, G.; Killeen, T.; Lin, Z. M.; Gimelshein, N.; Antiga, L.; Desmaison, A.; Köpf, A.; Yang, E.; DeVito, Z.; Raison, M.; Tejani, A.; Chilamkurthy, S.; Steiner, B.; Fang, L.; Bai, J. J.; Chintala, S. PyTorch: an imperative style, high-performance deep learning library. **2019**, arXiv: 1912.01703.
- 63 Ketkar, N. Introduction to keras. *Deep Learning with Python*. Berkeley, CA: Apress, **2017**, 97–111.
- 64 Ma, Y.; Yu, D.; Wu, T.; Wang, H. PaddlePaddle: an open-source deep learning platform from industrial practice. *Front. Data Computing*, **2019**, 1(1), 105–115.
- 65 Lu, L.; Meng, X. H.; Mao, Z. P.; Karniadakis, G. E. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations. *SIAM Rev.*, **2021**, 63(1), 208–228.
- 66 Hennigh, O.; Narasimhan, S.; Nabian, M. A.; Subramaniam, A.; Tangsali, K.; Fang, Z. W.; Rietmann, M.; Byeon, W.; Choudhry, S. NVIDIA SimNet™: an AI-accelerated multi-physics simulation framework. *Computational Science—ICCS 2021*. Cham: Springer International Publishing, **2021**, 447–461.
- 67 Koryagin, A.; Khudorozkov, R.; Tsimfer, S. PyDEns: a Python framework for solving differential equations with neural networks. **2019**: arXiv: 1909.11544. <https://arxiv.org/abs/1909.11544>
- 68 Chen, F. Y.; Sondak, D.; Protopapas, P.; Mattheakis, M.; Liu, S. H.; Agarwal, D.; Di Giovanni, M. NeuroDiffEq: a Python package for solving differential equations with neural networks. *J. Open Source Softw.*, **2020**, 5(46), 1931.
- 69 Jospin, L. V.; Laga, H.; Boussaid, F.; Buntine, W.; Bennamoun, M. Hands-on Bayesian neural networks: a tutorial for deep learning users. *IEEE Comput. Intell. Mag.*, **2022**, 17(2), 29–48.
- 70 Yang, L.; Meng, X. H.; Karniadakis, G. E. B-PINNs: bayesian physics-informed neural networks for forward and inverse PDE problems with noisy data. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 425, 109913.
- 71 Linka, K.; Schäfer, A.; Meng, X. H.; Zou, Z. R.; Karniadakis, G. E.; Kuhl, E. Bayesian Physics Informed Neural Networks for real-world nonlinear dynamical systems. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2022**, 402, 115346.
- 72 Sun, L. N.; Wang, J. X. Physics-constrained Bayesian neural network for fluid flow reconstruction with sparse and noisy data. *Theor. Appl. Mech. Lett.*, **2020**, 10(3), 161–169.
- 73 Meng, X. H.; Babae, H.; Karniadakis, G. E. Multi-fidelity Bayesian neural networks: algorithms and applications. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 438, 110361.
- 74 Ji, B.; Sharma Bhattarai, S.; Na, I. H.; Kim, H. A Bayesian deep learning approach for rheological properties prediction of asphalt binders considering uncertainty of output. *Constr. Build. Mater.*, **2023**, 408, 133671.
- 75 Zhao, L. F.; Li, Z.; Wang, Z. C.; Caswell, B.; Ouyang, J.; Karniadakis, G. E. Active- and transfer-learning applied to microscale-macroscale coupling to simulate viscoelastic flows. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 427, 110069.
- 76 Hall, E. J.; Taverniers, S.; Katsoulakis, M. A.; Tartakovsky, D. M. GINNs: graph-informed neural networks for multiscale physics. *J. Comput. Phys.*, **2021**, 433, 110192.
- 77 Xing, Z. Y. A non-Markov chain model of heterogeneous polymer dynamics for exploring relaxation and creep behavior. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **2025**, 58(11), 115305.
- 78 Gm, H.; Gourisaria, M. K.; Pandey, M.; Rautaray, S. S. A comprehensive survey and analysis of generative models in machine learning. *Comput. Sci. Rev.*, **2020**, 38, 100285.
- 79 Ghojogh, B.; Ghodsi, A.; Karray, F.; Crowley, M. Factor analysis, probabilistic principal component analysis, variational inference, and variational autoencoder: tutorial and survey. **2021**, arXiv: 2101.00734.
- 80 Gundersen, K.; Oleynik, A.; Blaser, N.; Alendal, G. Semi-conditional variational auto-encoder for flow reconstruction and uncertainty quantification from limited observations. *Phys. Fluids*, **2021**, 33, 017119.
- 81 Akkari, N.; Casenave, F.; Hachem, E.; Ryckelynck, D. A Bayesian nonlinear reduced order modeling using variational AutoEncoders. *Fluids*, **2022**, 7(10), 334.
- 82 Simpson, T.; Vlachas, K.; Garland, A.; Dervilis, N.; Chatzi, E. VpROM: a novel variational autoencoder-boosted reduced order model for the treatment of parametric dependencies in nonlinear systems. *Sci. Rep.*, **2024**, 14, 6091.

- 83 Hora, G. S.; Gentine, P.; Momen, M.; Giometto, M. G. Physics-informed data-driven reconstruction of turbulent wall-bounded flows from planar measurements. *Phys. Fluids*, **2024**, 36(11), 115191.
- 84 Zhong, W. H.; Meidani, H. PI-VAE: Physics-Informed Variational Auto-Encoder for stochastic differential equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2023**, 403, 115664.
- 85 Shin, H.; Choi, M. Physics-informed variational inference for uncertainty quantification of stochastic differential equations. *J. Comput. Phys.*, **2023**, 487, 112183.
- 86 Goodfellow, I.; Pouget-Abadie, J.; Mirza, M.; Xu, B.; Warde-Farley, D.; Ozair, S.; Courville, A.; Bengio, Y. Generative adversarial networks. *Commun. ACM*, **2020**, 63(11), 139–144.
- 87 Guo, X.; Chen, Y. Q. Generative AI for synthetic data generation: Methods, challenges and the future. **2024**: arXiv: 2403.04190. <https://arxiv.org/abs/2403.04190>
- 88 Wang, Z. Z.; Jeong, H.; Gan, Y. X.; Pereira, J. M.; Gu, Y. T.; Sauret, E. Pore-scale modeling of multiphase flow in porous media using a conditional generative adversarial network (cGAN). *Phys. Fluids*, **2022**, 34(12), 123325.
- 89 Xie, P. X.; Li, R.; Chen, Y. R.; Song, B. Y.; Chen, W. L.; Zhou, D.; Cao, Y. A physics-informed deep learning model to reconstruct turbulent wake from random sparse data. *Phys. Fluids*, **2024**, 36(6), 065145.
- 90 Cheng, M.; Fang, F.; Pain, C. C.; Navon, I. M. An advanced hybrid deep adversarial autoencoder for parameterized nonlinear fluid flow modelling. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2020**, 372, 113375.
- 91 Niu, Z. J.; Yu, K.; Wu, X. F. LSTM-based VAE-GAN for time-series anomaly detection. *Sensors*, **2020**, 20(13), 3738.
- 92 Jiang, Y.; Liang, Y. F.; Yuan, X. F. Super-resolution reconstruction of turbulence for Newtonian and viscoelastic fluids with a physical constraint. *Phys. Fluids*, **2024**, 36(10), 103114.
- 93 Wang, Y. J.; Shan, L. Y.; Yan, J. M.; Pang, Y. Z. A data augmentation method for establishing a relationship model between composition and viscoelastic properties of asphalt binder. *IEEE Trans. Intell. Transp. Syst.*, **2025**, 26(8), 12446–12460.
- 94 Lu, L.; Jin, P. Z.; Pang, G. F.; Zhang, Z. Q.; Karniadakis, G. E. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nat. Mach. Intell.*, **2021**, 3(3), 218–229.
- 95 Wang, S. F.; Wang, H. W.; Perdikaris, P. Learning the solution operator of parametric partial differential equations with physics-informed DeepONets. *Sci. Adv.*, **2021**, 7(40), eabi8605.
- 96 Kovachki, N.; Li, Z. Y.; Liu, B.; Azizzadenesheli, K.; Bhattacharya, K.; Stuart, A.; Anandkumar, A. Neural operator: learning maps between function spaces with applications to PDEs. *J. Mach. Learn. Res.*, **2023**, 24(1), 4061–4157.
- 97 Li, Z. Y.; Kovachki, N.; Azizzadenesheli, K.; Liu, B.; Bhattacharya, K.; Stuart, A.; Anandkumar, A. Fourier neural operator for parametric partial differential equations. **2020**: arXiv: 2010.08895. <https://arxiv.org/abs/2010.08895>
- 98 Li, Z. Y.; Zheng, H. K.; Kovachki, N.; Jin, D.; Chen, H. X.; Liu, B.; Azizzadenesheli, K.; Anandkumar, A. Physics-informed neural operator for learning partial differential equations. *ACM / IMS J. Data Sci.*, **2024**, 1(3), 1–27.
- 99 Cao, Q. Y.; Goswami, S.; Karniadakis, G. E. Laplace neural operator for solving differential equations. *Nat. Mach. Intell.*, **2024**, 6(6), 631–640.
- 100 Lowery, M.; Turnage, J.; Morrow, Z.; Jakeman, J. D.; Narayan, A.; Zhe, S. D.; Shankar, V. Kernel neural operators (KNOs) for scalable, memory-efficient, geometrically-flexible operator learning. **2024**: arXiv: 2407.00809. <https://arxiv.org/abs/2407.00809>
- 101 Jeyaraj, D.; Eivazi, H.; Tröger, J. A.; Wittek, S.; Hartmann, S.; Rausch, A. A neural operator based hybrid microscale model for multiscale simulation of rate-dependent materials. **2025**: arXiv: 2506.16918. <https://arxiv.org/abs/2506.16918>
- 102 Mangal, D.; Saadat, M.; Jamali, S. Learning a family of rheological constitutive models using neural operators. *J. Rheol.*, **2025**, 69(2), 55–67.
- 103 Zhou, J.; Cui, G. Q.; Hu, S. D.; Zhang, Z. Y.; Yang, C.; Liu, Z. Y.; Wang, L. F.; Li, C. C.; Sun, M. S. Graph neural networks: a review of methods and applications. *AI Open*, **2020**, 1, 57–81.
- 104 Liu, S. C.; Li, T.; Ding, H. Y.; Tang, B. Z.; Wang, X. L.; Chen, Q. C.; Yan, J.; Zhou, Y. A hybrid method of recurrent neural network and graph neural network for next-period prescription prediction. *Int. J. Mach. Learn. Cybern.*, **2020**, 11(12), 2849–2856.
- 105 Atkinson, O.; Bhardwaj, A.; Englert, C.; Ngairangbam, V. S.; Spannowsky, M. Anomaly detection with convolutional graph neural networks. *J. High Energy Phys.*, **2021**, 2021(8), 80.
- 106 Du, X. S.; Yu, J.; Chu, Z.; Jin, L. N.; Chen, J. Y. Graph autoencoder-based unsupervised outlier detection. *Inf. Sci.*, **2022**, 608, 532–550.
- 107 Jin, G. Y.; Liang, Y. X.; Fang, Y. C.; Shao, Z. Z.; Huang, J. C.; Zhang, J. B.; Zheng, Y. Spatio-temporal graph neural networks for predictive learning in urban computing: a survey. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, **2024**, 36(10), 5388–5408.

- 108 Li, Z. J.; Farimani, A. B. Graph neural network-accelerated Lagrangian fluid simulation. *Comput. Graph.*, **2022**, 103, 201–211.
- 109 Jiang, S. L.; Dieng, A. B.; Webb, M. A. Property-guided generation of complex polymer topologies using variational autoencoders. *NPJ Comput. Mater.*, **2024**, 10, 139.
- 110 Shukla, K.; Xu, M. J.; Trask, N.; Karniadakis, G. E. Scalable algorithms for physics-informed neural and graph networks. *Data Centric Eng.*, **2022**, 3, e24.
- 111 Gao, H.; Zahr, M. J.; Wang, J. X. Physics-informed graph neural Galerkin networks: a unified framework for solving PDE-governed forward and inverse problems. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2022**, 390, 114502.
- 112 Li, Z. Y.; Kovachki, N.; Azizzadenesheli, K.; Liu, B.; Bhattacharya, K.; Stuart, A.; Anandkumar, A. Multipole graph neural operator for parametric partial differential equations. **2020**: arXiv: 2006.09535. <https://arxiv.org/abs/2006.09535>
- 113 Storm, J.; Rocha, I. B. C. M.; van der Meer, F. P. A microstructure-based graph neural network for accelerating multiscale simulations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **2024**, 427, 117001.
- 114 Du, W.; Ding, S. F. A survey on multi-agent deep reinforcement learning: from the perspective of challenges and applications. *Artif. Intell. Rev.*, **2021**, 54(5), 3215–3238.
- 115 Garnier, P.; Viqerat, J.; Rabault, J.; Larcher, A.; Kuhnle, A.; Hachem, E. A review on deep reinforcement learning for fluid mechanics. *Comput. Fluids*, **2021**, 225, 104973.
- 116 Banerjee, C.; Nguyen, K.; Fookes, C.; Raissi, M. A survey on physics informed reinforcement learning: review and open problems. *Expert Syst. Appl.*, **2025**, 287, 128166.
- 117 Liu, X. Y.; Wang, J. X. Physics-informed Dyna-style model-based deep reinforcement learning for dynamic control. *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.*, **2021**, 477(2255), 1–24.
- 118 Hu, W. L.; Jiang, Z. Z.; Xu, M. Y.; Hu, H. Y. Efficient deep reinforcement learning strategies for active flow control based on physics-informed neural networks. *Phys. Fluids*, **2024**, 36(7), 074112.
- 119 Faria, R. R.; Capron, B. D. O.; Secchi, A. R.; De Souza, M. B. A data-driven tracking control framework using physics-informed neural networks and deep reinforcement learning for dynamical systems. *Eng. Appl. Artif. Intell.*, **2024**, 127, 107256.
- 120 San, O.; Pawar, S.; Rasheed, A. Variational multiscale reinforcement learning for discovering reduced order closure models of nonlinear spatiotemporal transport systems. *Sci. Rep.*, **2022**, 12, 17947.
- 121 Gyimah, N.; Scheler, O.; Rang, T.; Pardy, T. Deep reinforcement learning-based digital twin for droplet microfluidics control. *Phys. Fluids*, **2023**, 35(8), 082020.
- 122 Fuks, O.; Tchelepi, H. A. Limitations of physics informed machine learning for nonlinear two-phase transport in porous media. *J. Mach. Learn. Model. Comput.*, **2020**, 1(1), 19–37.
- 123 Miyamoto, S. Short review on machine learning-based multi-scale simulation in rheology. *J. Soc. Rheol., Jpn*, **2024**, 52(1), 15–19.

Review

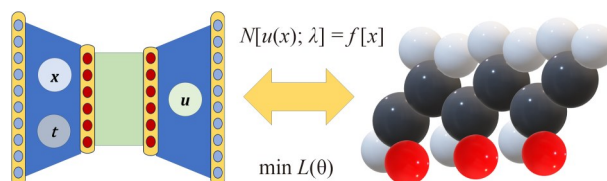
Physics-Informed Deep Learning for Polymer Rheology: Investigating Challenges, Methodologies, and Applications

Ji-hao Qi, Xin Chen, Zhi-wei Pang, Zeng Lin, Chao-yuan Wang, Hu Liu, Jin Sha*, Zhi-shan Bai
(School of Mechanical and Power Engineering, East China University of Science and Technology,
Shanghai 200237)

Abstract Polymer rheology aims to understand the multiscale flow and deformation of macromolecular materials, yet conventional constitutive approaches have long struggled with pronounced nonlinearities, cross-scale coupling and sparse, noisy data inversion. Physics-informed deep learning (PIDL) embeds rheological conservation laws and constitutive relations directly into deep neural networks, substantially reducing the demand for large labelled datasets while enhancing model generalization and physical interpretability. This review systematically outlines

*Corresponding author: Jin Sha, E-mail: sjin@ecust.edu.cn

the foundational principles of PIDL, covering network architectures, physics-informed loss functions such as MSE, MAE, sparse and residual variants, and optimization strategies including gradient descent and adaptive weighting. We further survey five PIDL paradigms—probabilistic models, generative models, neural operators, graph neural networks and reinforcement learning—and demonstrate their potential for parameter identification, rheological property prediction, inverse problem solving and digital-twin integration. Despite these advantages, PIDL still contends with high data acquisition costs, limited interpretability, insufficient accuracy across scales and uncertain robustness under extreme conditions. Future research should exploit multi-fidelity techniques, physics-augmented data generation, advanced optimization, causal inference and explainable AI to deliver trustworthy, industrially viable rheological models.



Keywords Physics-informed deep learning, Polymer rheology, Modeling and simulation, Intelligent prediction and optimization