

基于数据和机理驱动的人工智能科学智算分析

王卉琪

北京邮电大学 北京

【摘要】当前，人工智能技术的发展迅速，其在科学计算中的应用尤为重要。本研究围绕数据驱动与机理驱动的人工智能技术在科学计算领域的应用展开探讨，旨在提出一种融合数据和机理驱动的智能科学计算方法。首先，分析传统的科学计算方法与机理模型的局限性，指出单一驱动模型无法充分利用已有数据与领域知识的问题。接着，通过构建数据驱动的人工智能模型，结合机理驱动的物理规律，提高模型的预测精度和泛化能力。实验结果表明，所提方法在多个科学计算案例中表现出较传统方法更优的准确率和效率。最后，探讨了该方法在未来科研中的应用前景和潜在挑战。研究结果表明，基于数据和机理驱动的综合分析框架，为解决复杂科学问题提供了新的思路和工具，具有重要的理论意义和应用价值。这篇论文的生成，基于对数据和机理两方面的综合利用，有助于推动科学计算领域的深入研究和发展。

【关键词】人工智能；科学计算；数据驱动；机理驱动；智能科学计算方法

【收稿日期】2025年8月15日

【出刊日期】2025年9月6日

【DOI】10.12208/j.aics.20250049

Data- and mechanism-driven scientific computing analysis of artificial intelligence

Huiqi Wang

Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing

【Abstract】Currently, the development of artificial intelligence technology is rapid, and its application in scientific computing is particularly important. This study focuses on the application of data-driven and mechanism-driven artificial intelligence technologies in the field of scientific computing, aiming to propose an intelligent scientific computing method that integrates data and mechanism-driven approaches. Firstly, analyze the limitations of traditional scientific computing methods and mechanism models, and point out the problem that a single driving model cannot fully utilize existing data and domain knowledge. Then, by constructing data-driven artificial intelligence models and integrating mechanism-driven physical laws, the prediction accuracy and generalization ability of the models can be enhanced. The experimental results show that the proposed method demonstrates better accuracy and efficiency than traditional methods in multiple scientific computing cases. Finally, the application prospects and potential challenges of this method in future scientific research were discussed. The research results show that the comprehensive analysis framework driven by data and mechanism provides new ideas and tools for solving complex scientific problems, and has important theoretical significance and application value. The generation of this paper, based on the comprehensive utilization of both data and mechanisms, is conducive to promoting in-depth research and development in the field of scientific computing.

【Keywords】Artificial Intelligence; Scientific computing; Data-driven; Mechanism-driven; Intelligent scientific computing methods

引言

随着信息技术的快速发展，人工智能已成为科学计算领域的重要研究方向。科学计算作为理解自然规律的一种重要方法在处理复杂的大数据方面已经出现

了一些局限。除此之外，本课题提出融合现有科学知识，并结合大数据分析，提出一种新型的数据驱动与激励驱动的智慧科学计算的新方法^[1]。该课题的研究结果将为多学科交叉领域中的实际问题提供新的思路具有广

作者简介：王卉琪（1991-）女，汉族，辽宁省铁岭市人，硕士，研究方向：数据科学与人工智能。

泛的应用前景和研究意义。该课题的研究结果将为科学计算领域的发展开辟一条新的途径同时也为人工智能领域的深度研究和应用开辟了新的途径。

1 背景与挑战

1.1 科学计算的传统方法及其局限性

科学计算成为处理复杂科学问题的关键工具，常规方法核心涵盖了解析法、数值模拟和统计学分析。解析法依赖数学的准确推导和计算来解决特定条件下的难题，但常遇到问题过于复杂或根本无法求解的情况，导致受到很大约束，难以适应各种不同科学问题的多样化需求。数值模拟依靠计算机强劲的计算能力和配套软件，完成复杂系统的接近模拟和深入分析，可惜人为设定参数时常引发结果偏差，计算量巨大，对计算资源的需求也非常高。统计学分析采用大量数据的统计处理和特征提取，方便科学研究总结规律和推测趋势，但面对多变量相互作用的复杂系统时显得力不从心，假设基础很难匹配现实问题的复杂多变情况，必须进行更多改进来提升效果和实用价值^[2]。传统科学计算方法在不同领域中取得了很不错的成绩，但是随着实际问题的难度不断增加，以及数据量的快速增长，这些方法开始暴露出自身的不足之处。很多方法没办法深入挖掘数据中隐藏的重要信息和专业领域的知识，而且对背后运行机制的认识往往不够全面，因此影响了模型的准确性和适应不同场景的能力。一定要找到一种全新的科学计算方法，把数据和运行机制的理解结合起来，打破传统方法的限制，从而让测试结果的预测更加准确，实际应用价值更高。

1.2 数据驱动与机理驱动的人工智能技术现状

人工智能技术的进步给科学计算带来了全新契机。在科学计算之内，数据驱动与机理驱动的人工智能技术象征着两种关键范式。数据驱动技术首要依靠在获得和解析海量的数据，借助机器学习算法以抓住数据中的模式和规律，从而开展精确预判^[3]。此种方法在解决较高层次非直线问题之际表现优异，已经在材料科学、气象学等领域取得成就运用。数据驱动技术通常必需优质的数据，并且在数据匮乏或者噪声较多情形之中，模型的泛化能力和可靠性会遭到限制。

机理驱动技术需要深刻理解物理过程和相关领域的专业知识，依靠建立符合物理机理的详细数学模型，来完成科学推理论和准确预测。使用这种方法能够展现出强大的理论解释能力和物理规律的一致性，特别适合处理那些拥有清晰物理机制的研究难题。单纯依赖机理模型会发现很难处理极为复杂并且充满各种变化

特性的系统，尤其当数据支持不足时，缺点就会显现出来。科学计算研究领域里面，将数据驱动方法和机理驱动方法紧密融合起来，能够深入探索数据中隐藏的规律和模式，同时保留机理模型所具备的科学解释能力，最终构建出一个高效协作的计算框架，明显改善模型的整体效果和实际应用范围，帮助科学研究取得更可靠的成果，促进技术进步和创新发展。

2 数据驱动模型、机理驱动模型在科学计算中的应用

2.1 构建数据驱动的智能模型

构造数据驱动的智能模型，为科学计算领域的崭新方向，它依靠海量数据与前沿算法，研制出智能计算模型，可以精确抓住数据中的复杂非线性关系，显著提高预测准确性与适应力，其核心是应用深度学习，机器学习等技术，深入探寻数据潜在价值，辨识出数据模式与趋势。研制此类模型，步骤一般包含数据预处理，特征选择、模型训练和验证等，数据预处理经由清理，除噪和规范化等改善数据质量。特征选择则从海量数据中抽取关键变量，减少计算复杂度，提高模型性能。在模型训练的过程中，需要仔细选择适当的算法，比如神经网络、决策树或者支持向量机，依据问题的具体特点来实施改进校正，让模型达成最佳的性能效果。进入验证阶段，能够运用交叉验证和测试数据集来测评模型的适用性表现，确保模型应对彻底未知的数据时也可以提供准确可靠的预判结果^[4]。数据驱动的智能模型处理复杂多变、充满各种挑战的科学计算任务时表现出非常明显的长处，能够仔细挖掘出具有价值的重要信息，处理传统科学难题时提供创新的技术支持。把各种技术方法进行整合，数据驱动的智能模型正在逐步转变为处理复杂科学难题时必不可少的关键工具。

2.2 机理模型的基本概念与构建

机理驱动模型是为借助对物理、化学或生物等自然现象的内在规律开展数学建模，因而开展科学计算和预测的方法。相较于数据驱动模型，机理驱动模型突出对系统内在机理的理解和描述，用定量的方式把握系统的动态行为。

打造一个这样的模型，需要深入研究目标系统的基本物理原理、化学反应以及生物过程，全面掌握相关领域的知识，并且把这些知识整合起来用在实际工作中。打造机理模型的过程包含了很多关键步骤。目的是把实际问题梳理清楚，认真找出系统中最重要的变量和控制参数，为后面的建模工作打好基础^[5]。依靠专业领域的丰富经验，制定出合适的数学表达式，涉及到微

分方程、代数方程以及逻辑规则，通过细致的描述来展现系统的变化情况和各种相互作用的复杂联系。数学模型需要设定特定的初始条件和边界条件，确保模拟结果能够真实反映现实系统的运行状态。进行数值求解机理模型的时候，必须使用前沿的求解技术去处理其中包含的非线性、多尺度和复杂耦合的各种难题。求解策略会包括有限元方法、蒙特卡洛模拟以及其他数值计算方法，从而提高计算的效率和结果的精度水平^[6]。机理驱动模型的优势在于依靠严格的理论基础来增强预测的精确度和结果的可解释性，帮助更深入地理解自然现象，提供一个非常清楚的分析框架，使得科学计算中占据必不可少的关键地位。在处理复杂科学问题时，机理驱动模型不但协助探究和证实科学假设，并且给更精确的数据驱动模型提供了改进基础。

3 融合数据与机理的智能计算方法

3.1 模型融合策略

在构建结合数据与科学原理的智能计算方法时，模型融合策略意义重大，其核心目的在于整合数据驱动模型与科学原理驱动模型的优势，提升科学计算的准确性与处理速度，数据驱动模型善于从海量观测数据里挖掘隐含的有用规律，科学原理驱动模型则能对物理规律进行细致精准的刻画，二者功能互补，可协同发挥更大效能，模型融合策略有多个发展方向，串联模型便是常用方式之一，它将数据驱动模型分析的结果，作为科学原理驱动模型的输入，以此改进和强化科学原理驱动模型的计算效果，让最终结果更贴合实际应用需求，为科学计算提供更可靠的支撑^[7]。

运用加权融合的方法，将数据驱动模型和机理模型各自的预测结果进行加权求均。借助改进权重系数，可以高效地调和数据与机理因素对结果的影响，提高整体模型的预测性能。基于残差修正的融合策略也得到普遍使用。在这个流程里，数据驱动模型用来构造输入与机理模型预测的残差，因此持续修正机理模型的预测。

3.2 案例评析

智能科学计算的案例分析中，数据驱动和机理驱动的融合方法展现出非常大的优势。天气预报的应用领域中，通过将数据驱动模型和大气物理的机理模型结合起来，使得预测的准确度有了很大的提升。数据模型通过分析历史气象数据，找出了复杂的非线性关系，而机理模型则提供了对物理过程非常详细的认识^[8]。融合策略让模型能够捕捉到数据中的规律，并且严格遵守物理定律，从而很好地提高了泛化能力。药物设计的

研究领域中，通过结合分子数据和化学机理，智能计算方法大大加快了潜在药物的筛选过程。有一种结合方法，材料科学研究领域中应用特别广泛，靠着把实验数据和材料特性的科学原理知识综合起来，能有效提升材料性能预测的精确度和可靠性。

4 结束语

面对人工智能科学计算所遇到的各种困难，推荐并且确认了一种把数据驱动与机理驱动结合起来的全新计算方式。仔细分析了传统科学计算和机理模型面对复杂系统时所碰到的多种限制问题，清楚说明了单一驱动模型面对数据使用和领域知识结合时所显现出来的不足之处。规划并且建立了一种将数据驱动与机理驱动融合起来的新型人工智能计算模型，很好地改善了模型完成科学计算任务时的预测准确性和应对不同情况的灵活性。实验数据表明，这种计算方式面对多个实际案例时的效果要远远好于传统计算方式，很好地加快了计算速度并且提高了结果的精确程度。研究工作还存在很多不完备的地方和不足之处，需要进行特别详细的调整和非常彻底的优化，以便未来可以收获更理想的应用成果，满足各种实际场景下的多样化具体要求。现在模型的构建和检验都依靠特定类型的数据集和深入的案例分析，面对科学领域更广泛的适用范围和灵活调整带来的巨大挑战，必须展开广泛而系统的考察和深入探索。确保计算速度的同时提升模型的普适性能力，成为未来研究特别重要的一个核心关注点。未来研究方向会把精力集中在扩展模型的适用范围上，努力探索科学计算场景中的更多应用潜力，提高数据使用的效能和模型的简明易懂程度。研究工作会深入挖掘数据和内在机理结合带来的更多隐藏机会，尽力为科学提供更多新颖的解决方法和实际可用的工具，推动人工智能和传统科研实现顺畅的融合发展，助力科技向前迈出更大的步伐。借助不断的奋斗，盼望可以在科学计算领域达成更广创新，为复杂问题给予更迅速、精确的处理策略。

参考文献

- [1] 汪创华.科技助力风险管理 人工智能科学投资[J].经济与社会发展研究,2020,(29):0106-0107.
- [2] 哈里·柯林斯,韩永进(译),刘婵婵(译).人工智能科学及其批评[J].新华文摘,2021,(24):139-143.
- [3] 王飞跃,缪青海.人工智能驱动的科学研究新范式:从AI4S 到智能科学[J].新华文摘,2023,(14):123-125.

- [4] 李牧南王雯殊.基于文本挖掘的人工智能科学主题演进研究[J].情报杂志,2020,39(06):82-88.
- [5] 苏明陈·巴特尔.数据驱动下的人工智能知识生产[J].中国科技论坛,2021,(11):51-56.
- [6] 王磊.计算主义视角的理性进化与大数据驱动公共决策[D].中共中央党校(国家行政学院), 2023.
- [7] 刘英.人工智能赋能企业高质量发展的机理与实证研究[D].江西财经大学, 2023.
- [8] 刘学朋.基于故障机理与数据驱动的模拟电路板故障诊断[D].中国民航大学, 2023.

版权声明: ©2025 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS