

大数据与智能计算在物理电子领域的融合发展 及理论研究综述

邹儒

广东技术师范大学, 广东 广州 510665

DOI: 10.61369/TACS.2026040030

摘 要 : 随着大数据和智能计算发展得越来越快, 物理电子研究也在从传统的解析建模, 慢慢转向数据驱动和智能驱动的新模式。这篇文章梳理了二者融合的理论基础、技术路径和最新进展, 重点聚焦多物理场耦合计算、微纳结构多尺度建模, 以及数据驱动规律挖掘这几个方向的研究现状。从目前来看, 物理信息神经网络、代理模型还有自适应离散化方法, 已经成了提升复杂物理系统求解效率与精度的关键技术。不过, 现在的研究也还面临不少难题: 微观到宏观的跨尺度关联, 缺一套自治的理论框架; 多场耦合模型在强非线性条件下的泛化能力还不够; 另外, 计算效率与物理保真度怎么平衡, 也还没有一个统一的标准。

关 键 词 : 智能计算; 大数据; 物理电子; 多物理场耦合; 多尺度建模; 物理信息神经网络

A Review of the Integrated Development and Theoretical Research of Big Data and Intelligent Computing in the Field of Physical Electronics

Zou Ru

Guangdong Polytechnic Normal University, Guangzhou, Guangdong 510665

Abstract : With the rapid development of big data and intelligent computing, physical electronics research is gradually shifting from traditional analytical modeling to data-driven and intelligence-driven paradigms. This review summarizes the theoretical foundations, technical pathways, and recent advances in integrating these two approaches, with a focus on the current state of research in multiphysics coupling computation, multiscale modeling of micro/nanostructures, and data-driven discovery of physical laws. To date, key technologies such as physics-informed neural networks, surrogate models, and adaptive discretization methods have become essential for improving the efficiency and accuracy of solving complex physical systems. However, several challenges remain: the lack of a self-consistent theoretical framework for cross-scale correlations from micro to macro scales, insufficient generalization capability of multiphysics coupling models under strong nonlinear conditions, and the absence of a unified standard for balancing computational efficiency and physical fidelity.

Keywords : intelligent computing; big data; physical electronics; multi-physics coupling; multiscale modeling; physics-informed neural network

一、大数据与智能计算在物理电子领域的应用概述

(一) 物理电子领域的研究内涵与现实特征

物理电子以微观粒子动力学行为、电磁场分布与传输特性、低维结构中的输运效应、场与物质耦合作用为主要研究内容, 是连接凝聚态物理、电磁场理论与现代电子工程的重要桥梁。其研究对象普遍具有尺度微小、结构复杂、多场耦合强烈和非线性行为显著等特点。随着器件尺寸进入纳米量级, 量子效应、界面效应、尺度效应逐渐占据主导, 系统行为不再遵循经典宏观物理规律。

以往的研究, 理论分析主要靠手推公式和搭建理想模型, 为求到闭合解, 往往需要简化边界、忽略弱耦合甚至假设介质均

匀, 但这只适用于结构简单、耦合不强的理想状况下。一旦深入到微纳结构、强场环境或超快过程这些复杂场景, 传统解析方法就很难完整描述系统的演化全貌。与此同时, 数值仿真和理论推演产生了海量数据, 光靠人工去挖有效信息是有限的, 这也正好给大数据和智能计算的深度介入提供了现实需求与应用土壤。

(二) 计算机技术赋能物理电子研究的必要性与价值

物理电子研究难在哪? 主要难在于强耦合、非线性, 还附带有多个尺度的物理过程, 这些过程既要算得准, 还得算得快。数值计算和建模仿真就派上用场了, 它们能把抽象的物理规律变成能计算、能迭代的数学模型, 粒子怎么运动、场怎么分布、能量怎么传递、载流子怎么输运, 都能描述得清清楚楚, 正好补上了传统解析方法适用面窄的短板。

人工智能和大数据技术一出来,进一步推动科研模式推向了从模型驱动慢慢转向数据驱动,再往智能驱动演进。通过对多源、多维度的物理信息进行学习、拟合和关联挖掘,能发现传统理论方法发现不了的隐含规律,这样一来模型构建更准,理论推演也更快。智能计算和物理电子深度的融合,不光把物理电子研究的维度和深度都拉宽了,还给计算机算法和数据处理技术提供了用武之地,形成了基础理论和工程技术互相促进、一起发展的新局面,对新型电子器件设计、功能材料理论预测、光电系统性能分析这些领域,都有很重要的意义。

（三）交叉研究范畴

智能计算、大数据与物理电子的交叉研究,以物理基本规律为内核,以计算方法与数据技术为工具,围绕物理问题数学模型化、连续场离散化处理、数值算法设计、多尺度模型构建、数据驱动规律挖掘等内容展开。研究过程既强调计算方法对物理系统的表征能力,也注重物理守恒律与基本原理对计算模型的约束作用,不在单纯偏向算法实现或实验验证。

二、智能计算与物理电子融合的理论体系及实现路径

（一）物理问题的数学抽象与计算模型构建

把物理问题转化成规范可算的数学模型,是智能计算与物理电子融合的基础环节。实际研究中,常见的做法是把粒子运动、场演化、载流子输运、能量耗散这些物理行为,用微分方程、积分关系、状态方程这类数学形式定量表达出来。在此基础上,再结合计算机的运算逻辑,把模型变量、边界条件、参数区间和优化目标一一明确,让建立的数学体系既符合物理原理,也能适配数值计算和智能算法的运行要求。物理问题的数学抽象,不光是简单的形式转换,而是在保留核心物理机制的前提下,对冗余变量和弱耦合关系做合理简化,保证后续计算在物理上严谨、在算法上可行,这是实现理论与计算深度融合的关键一步。

（二）连续物理场的离散化处理与数值表征

物理电子领域里,电磁场、静电场、温度场还有载流子浓度场,本身是连续分布的,但计算机只能处理离散的数据结构,所以离散化就成了连接物理理论与数值计算的关键一环。常用的办法是通过空间网格划分、节点采样、时间步长分解这些手段,把连续的空间和演化过程转成离散的单元。特别是针对物理电子系统中场分布不均、耦合程度各有差异的情况,研究人员广泛采用了自适应网格、非结构化网格等策略,在保证物理信息完整的同时,兼顾计算效率和稳定性。

（三）数值算法与智能计算的协同优化机制

引入智能算法,能很好地改善传统数值方法在高维、强非线性、多场耦合系统里收敛慢、容易陷入局部最优、鲁棒性差这些老问题。像神经网络拟合、代理模型构建、智能迭代策略、自适应参数调整这些手段,都能有效加快方程收敛、优化求解路径,还能把复杂模型的泛化能力提上去。在实际融合体系里,传统数值算法负责把物理问题求解的严谨性和一致性把好关,智能计算则用来提升求解效率、处理复杂约束和不确定性,两边一互补,

就能搭起一个既高效又稳定的混合计算框架,给复杂物理电子系统的理论分析和特性预测提供可靠的支撑。

（四）大数据驱动下的物理规律挖掘与理论验证

大数据技术为物理电子研究提供了从海量多源信息中自动提取规律、验证理论的能力。在不同结构、不同工况、不同参数下得到的仿真数据、理论推导结果、模型参数集合,经过数据精确分析提取后,可构建高质量标准化数据集。利用机器学习、统计学习、关联规则挖掘等手段,能够发现物理量之间的隐含关联、识别系统演化趋势、检验理论模型的适用范围与合理性。

数据驱动方法不用事先做太多假设,能在一定程度上弥补传统理论模型因简化假设带来的那块偏差,让理论更贴近真实的物理过程,把物理电子研究从定性描述往前推到精准定量分析。同时,用大数据来做理论验证这种思路,也为新型结构预测和未知规律探索提供了高效又可行的研究手段。

三、融合领域研究进展与关键理论问题

（一）多物理场耦合计算与数值模拟研究进展

多物理场耦合在物理电子系统里很常见,电磁场、热场、载流子输运场、应力场这些场互相影响、互相调制,一起决定了器件与系统的宏观性能。这几年靠着计算机技术的进步,多场耦合建模与数值模拟发展得挺快。耦合方程的数值求解框架一直在完善,像分步求解、交替迭代、区域分解、紧耦合迭代这些方法,都有效提升了复杂耦合系统的计算稳定性和收敛性。

另外,智能优化算法发展出来的自适应耦合模型,也在慢慢推进,它能根据场分布的特点,动态调整耦合关系和求解顺序,计算精度和适用场景也就跟着不断拓展了。现在,多物理场耦合模拟已经是微纳电子器件、光电集成系统、微波器件理论分析里离不开的工具了,在揭示多场协同作用机制、改进理论模型、指导器件结构设计这些方面,都起着很重要的作用。

（二）微纳结构与低维系统中的计算理论发展

微纳结构和低维材料体系,一个显著特点就是尺度效应、界面效应和量子效应特别明显,很多经典物理电子理论直接用不太合适。得益于计算机技术不断进步,多尺度计算理论也跟着发展起来了。它把第一性原理计算、分子动力学、蒙特卡洛方法还有宏观有限元仿真这些方法揉在一起,从微观电子行为到宏观器件性能都能跨尺度统一表征。智能算法在这里面起的作用不小,可以用来拟合尺度边界、做参数的自适应传递、修正模型误差,还能优化计算流程,让统一计算框架覆盖的尺度范围越来越大。现在,多尺度计算理论已经用在低维电子输运、量子点器件、二维材料光电特性这些方向上了,为新型微纳功能器件的理论设计和机理分析打下了基础。

（三）多尺度建模与跨尺度关联的核心理论难题

虽然多尺度计算这些年进步不小,但跨尺度关联和模型统一的问题,依然是目前理论难题的核心。微观粒子的行为本来就是量子的、统计随机的,而宏观器件的响应是确定性的,这两个层次的规律要衔接起来,到现在也没找到一个统一、自洽的理论体

系，让这两个层次的规律衔接起来。目前的处理方式中，不同尺度之间的物理量传递大多靠经验参数和近似假设，误差难免；再加上尺度过渡区域的边界约束、非均匀效应和动态演化过程，建模难度就更大了。怎么实现微观—介观—宏观的无缝衔接、参数自洽传递，以及物理规律的统一，目前还没形成成熟的办法，这在某种程度上也限制了计算模型还原真实物理电子系统的能力，也是未来理论研究需要重点突破的地方。

（四）模型近似、计算效率与理论真实性的平衡问题

构建计算模型的时候，模型简化程度、计算效率，还有理论真实性之间的矛盾，一直是绕不开的难题。为了提高计算效率，总得做一些合理近似和降阶处理，但如果简化过了头，一些关键的物理机制就会被忽略，模型也就失真了；反过来，要是太追求还原真实物理过程，方程的维数就会猛增，计算量也跟着指数级上涨，甚至超出硬件和算法能扛住的范围。虽然智能优化、模型降阶、自适应网格这些技术，在一定程度上缓解了这个问题，但目前还没有一个通用又严谨的平衡准则。在遵守物理守恒律和基本原理的前提下，怎么借助智能计算和数据驱动策略，做出“近似合理、精度可控、效率可行”的计算模型，这是理论研究和工程应用都绕不开的关键问题，也是衡量智能计算与物理电子融合技术成熟度的一个重要标尺。

四、融合发展趋势与全文总结

未来，人工智能和大数据技术会更深入地融入物理电子研究的全过程，慢慢形成一种智能感知、自动建模、自主优化、规律自发现的新研究范式。像物理信息神经网络、强化学习、进化算法这些方法，也会越来越多地用在偏微分方程求解、模型降阶、参数反演以及隐式规律挖掘上，推动物理电子基础理论实现新的突破。

与此同时，大数据和高性能计算正成为前沿研究离不开的基础设施。分布式计算、异构加速、云计算这些技术，能支撑起超大规模多物理场系统的仿真；多源数据融合、知识图谱、迁移学习等方法，则进一步打破理论、仿真、文献数据之间的壁垒，让学科交叉向材料科学、量子科学、先进制造等领域不断拓展，形成协同创新的格局。

总的来说，本文梳理了智能计算、大数据与物理电子融合发展的理论基础、技术路径、研究进展和核心科学问题。看得出来，计算机科学给传统物理电子研究提供了工具支撑，帮我们突破了解析方法和简化模型本身的局限。不过，目前领域里还面临着多尺度衔接难、多场耦合理论不统一、模型精度和效率不好兼顾这些理论挑战，未来还得靠智能算法、大数据和高性能计算来持续突破。。

参考文献

[1] 牛海洋. 人工智能赋能材料科学专刊前言 [J]. 金属学报, 2024, 60(10): 1297–1298.
[2] 张巍. 基于智能算法的电子电工与计算机技术应用 [J]. 电子技术, 2025, 54(02): 280–281.
[3] 吴剑, 傅文军, 蒋捷. 智能计算与具身智能的交叉融合创新 [J]. 中国仪器仪表, 2025, (10): 17–20.
[4] 刘城城, 魏海霞, 付奎源, 等. 机器学习在材料科学中的应用 [J]. 鞍钢技术, 2024, (06): 34–49.
[5] 邓祥文, 伍力源, 赵锐, 等. 机器学习在光电子能谱中的应用及展望 [J]. 物理学报, 2024, 73(21): 64–84.