

FANG Hanmin, HUANG Wenlong, WANG Zihan. Long-time Simulation of Stiff Chemical Kinetics Using Conservation-constrained Physics-informed Neural Network (in Chinese). *Chinese Journal of Space Science*, 2025, 45(2): 277–287. CSTR:32142.14.cjss.2024–0149. DOI:10.11728/cjss2025.02.2024–0149

基于守恒约束物理信息神经网络的 刚性化学动力学长时模拟*

方涵敏 黄文龙 王子寒

(安徽工业大学计算机科学与技术学院 马鞍山 243002)

摘要 刚性化学动力学方程在空间科学、大气科学等领域具有重要意义。近年来, 物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Network, PINN) 作为一种融合物理定律与深度学习的框架, 被广泛应用于求解各种偏微分方程。然而, 在求解刚性化学动力学方程时, PINN 将出现优化失败, 难以有效求解。为解决该问题, 本文提出一种新的守恒约束 PINN 方法。该方法利用共享-分支网络有效处理耦合问题, 通过引入物质守恒约束显著提升刚性化学动力学方程的求解性能。同时, 分段采样策略进一步增强长时模拟的精度和稳定性。实验结果表明, 该方法能够在多时间尺度的复杂系统中实现长时稳定模拟, 为解决空间科学中的问题 (例如无碰撞等离子体波动和星际物质化学反应) 提供了一种新的方法。

关键词 刚性化学动力学, 物理信息神经网络, 守恒约束, 分段采样, 长时模拟

中图分类号 TP183

Long-time Simulation of Stiff Chemical Kinetics Using Conservation-constrained Physics-informed Neural Network

FANG Hanmin HUANG Wenlong WANG Zihan

(School of Computer Science and Technology, Anhui University of Technology, Ma'anshan 243002)

Abstract Long-term simulation of Partial Differential Equations (PDEs) holds significant applications across various fields, including space physics and atmospheric science. Conventional numerical techniques, such as the finite difference, finite element, and finite volume methods have been extensively employed to solve PDEs across various disciplines. However, these methods often struggle with dimensional curse and complex geometry. In recent years, Physics-Informed Neural Network (PINN), which integrates physical laws within deep learning frameworks, has emerged as a powerful alternative for solving PDEs. Since PINN and its variants are mesh-free, they can avoid dimensional curse to a certain degree.

* 国家自然科学基金项目 (12205005) 和安徽省自然科学基金项目 (2108085QA34) 共同资助

2024-10-31 收到原稿, 2025-02-05 收到修定稿

Nonetheless, deep learning related approaches frequently encounter optimization challenges, particularly when applied to multi-time scale issues such as stiff chemical kinetics equations, which involve multiple reactions with different rates, leading to both fast and slow dynamics coexisting. To address these issues, this study introduces a novel Conservation-Constrained Physics-Informed Neural Network (CC-PINN) approach. This method combines shared-branch networks with a segmented sampling strategy. First, the shared-branch networks can effectively deal with coupling equations and reduce the difficulties during the optimization of neural networks. On the other hand, the conservation constraint is embedded into the loss function, ensuring the conservation of physical laws and the accuracy of the simulation results, which significantly improves the performance of PINN. At the same time, according to the dynamics of chemical kinetics in different time intervals, the segmented sampling strategy is adopted, which further improves the accuracy and stability of long-term simulation. In addition, the influence of different expressions of conservation constraints has also been discussed. Experimental results clearly show that, by combining the shared-branch networks and segmented sampling strategy, the new proposed CC-PINN can accurately integrate the stiff chemical kinetics equations in a long-time scale. In summary, this research contributes a new tool for solving problems, such as collisionless plasma fluctuations and interstellar matter chemical reaction, in space science.

Key words Stiff chemical kinetics, Physics-informed neural network, Conservation constraint, Segmented sampling, Long-time simulation

0 引言

偏微分方程 (Partial Differential Equations, PDEs) 在空间科学、大气科学等众多领域中占据重要地位. 传统数值方法, 例如有限差分法和有限元法等, 已广泛用于 PDEs 的求解. PDE 的长时模拟对于理解空间科学和气候科学中的长期演化过程尤为关键. 例如 Drozdov 等^[1]通过长时模拟, 预测了辐射带中超相对论电子的变化; Qian 等^[2]基于中国 20 年的区域气候模拟, 评估了水文气候变化的多方面表现. 尽管传统方法在这些领域取得了显著成果, 但是在处理多尺度、强非线性和复杂边界等问题时, 仍然面临着诸多挑战.

化学动力学问题在空间科学、大气化学及环境工程等领域具有广泛应用^[3,4], 其控制方程通常表现为一组耦合的多尺度强非线性常微分方程 (Ordinary Differential Equations, ODEs)^[5]. 在求解具有刚性特性的化学动力学问题时, 传统数值方法依然面临多重挑战. 例如常用的刚性 ODEs 求解器^[6,7], 虽然能够有效应对刚性问题, 但其需要大量的线性运算, 计算开销较大.

近年来, 物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Network, PINN)^[8]作为一种新型数值求解方

法受到广泛关注. 目前, PINN 已经被应用于求解不同领域的 ODEs 和 PDEs^[9]. 这一方法避免了复杂的网格划分^[10], 展现了其在空间科学等学科中模拟复杂物理系统的潜力^[11]. 例如, PINN 已被用于计算日冕中的平衡和动态结构^[12]、重构电离层等离子体参数^[13]、实现系外行星大气的辐射传输建模^[14]、重建木星内部磁场结构^[15]等研究.

尽管如此, 在求解刚性化学动力学问题时, PINN 仍存在显著的局限性. 例如, Wang 等^[16]证明, 当动力学系统复杂度较高 (如刚性问题) 时, PINN 的求解精度不足, 甚至可能无法有效求解. 为此, Ji 等^[17]开发了 stiff-PINN, 通过引入准稳态假设 (Quasi-Steady-State-Assumptions, QSSA), 降低了刚性 ODEs 的刚度, 从而实现了刚性化学方程的有效求解. 类似地, Weng 等^[18]提出的多尺度 PINN (MPINN) 方法, 显著提升了刚性问题的求解精度. 然而, 这些方法在长时模拟方面的表现尚未进行深入研究. 另外, Wang 等^[19]基于 DeepONet 框架, 实现了对刚性化学动力学问题的长时积分. 尽管这些方法取得了重要进展, 但基于 PINN 实现刚性化学动力学的长时模拟问题仍未完全得到解决.

为此, 本文提出一种通过结合共享-分支网络^[20]和分段采样策略的守恒约束 PINN 方法, 用于实现刚

性化学动力学的长时模拟. 其中, 共享-分支网络结构有助于同时处理多个耦合方程. 物质守恒约束确保 PINN 在守恒的系统中遵循相应的物理规律^[21]. 实验结果表明, 守恒约束显著提高了 PINN 在 $T=1$ 时 (T 为时间) 刚性化学方程求解的准确性和稳定性. 此外, 相较于随机采样策略, 分段采样策略通过合理配置采样点, 使得守恒约束 PINN 在 $T=500$ 时刚性变量的相对误差由 99.99% 降低到 10.72%, 从而显著改善了长时模拟的计算精度与稳定性.

因此, 本文提出的结合共享-分支网络和分段采样策略的守恒约束 PINN 方法, 有效提升了刚性化学动力学在长时间范围内的预测精度和稳定性. 这一方法不仅为求解空间科学中多尺度、强非线性 PDEs 提供了新思路, 还拓展了其在复杂动力学系统中的应用潜力, 具有重要的理论与实际意义.

1 PINN

1.1 PINN 结构

PINN 是一种结合深度学习和物理约束的神经网络模型, 通过在损失函数中加入物理约束 (通常由 PDEs 及其对应的初始条件和边界条件组成), 最小化该损失函数, 从而得到 PDE 的解.

通常情况下, 线性和非线性 PDEs 可以表示为以下形式:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + N[u(x, t)] = 0, \quad (1)$$

$$u(0, x) = g(x), \quad (2)$$

$$B[u] = 0. \quad (3)$$

其中, $x \in \Omega$, $t \in [0, T]$, Ω 为 R^D 的子集, $u(x, t)$ 表示 PDEs 的解, $N[\cdot]$ 表示线性或非线性微分算子, $B[\cdot]$ 为边界条件算子. 本文采用的损失函数由 Song 等^[22] 提出. 为便于阐述, 这里对其具体形式稍加改动, 但主要内容保持不变. 损失函数的表达式如下:

$$L = \lambda_{ic} L_{ic} + \lambda_{bc} L_{bc} + \lambda_f L_f, \quad (4)$$

$$L_{ic} = \frac{1}{N_{ic}} \sum_{i=1}^{N_{ic}} |u_\theta(x_{ic}^i, 0) - g(x_{ic}^i)|^2, \quad (5)$$

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

$$L_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \left| \frac{\partial u_\theta}{\partial t}(x_f^i, t_f^i) + N[u_\theta(x_f^i, t_f^i)] \right|^2. \quad (7)$$

其中, L 为总损失函数, 由初始条件、边界条件、方程三部分对应的损失项 L_{ic} , L_{bc} , L_f 加权构成; N_{ic} , N_{bc} , N_f 分别表示初始条件、边界条件、方程的采样点数目; θ 为网络优化参数; $u(x, t)$ 为 PINN 预测解; $\{x_{ic}^i, 0\}_{i=1}^{N_{ic}}$, $\{x_{bc}^i, t_{bc}^i\}_{i=1}^{N_{bc}}$, $\{x_f^i, t_f^i\}_{i=1}^{N_f}$ 分别是待求解方程的初始条件、边界条件和方程自身残差的训练点, $g(x_{ic}^i)$ 表示初始条件的真实值; λ_{ic} , λ_{bc} , λ_f 为对应各自损失的权重系数. 值得注意的是, 这里实验中 PINN 未使用数据集, 而是通过优化损失函数式 (4) 实现对刚性化学动力学问题的求解.

1.2 PINN 的共享-分支网络结构

在处理多输出或者耦合问题等复杂问题时, 标准 PINN 网络难以有效捕捉各个子系统或多输出变量之间的依赖关系, 从而导致 PINN 优化困难. 为解决这一问题, 这里采用“根-枝”网络^[23]的思想, 同时结合 Wei 等^[20]提出的多输出神经网络, 构造一种适用于本文的共享-分支网络, 求解耦合的刚性化学动力学问题. 该网络能够增强对变量间耦合关系的表达能力, 提高复杂问题的优化效果.

传统的全连接神经网络通常由输入层、多个隐藏层和单一输出层组成. 共享-分支网络结构中, 全连接网络将原有的一个输出层分为多个并行输出层, 使网络的输出层数与方程数量相匹配, 如图 1 所示. 值得注意的是, 这里采用的共享网络和分支网络的隐藏层均由全连接结构构成. 未来可考虑引用更先进的网络架构 (如长短期记忆网络^[24]、残差网络^[25]和图神经网络^[26]), 以进一步提升 PINN 的性能.

2 守恒约束 PINN 与分段采样策略

2.1 守恒约束 PINN

在标准 PINN 中, PDEs 的解可通过最小化损失函数得到. 对于守恒系统, 为保证其物理性质, 需要在损失函数中额外增加相应的守恒约束项^[27]. 相比于标准 PINN, 守恒约束 PINN 是在其基础上引入物理守恒定律, 使得演化过程中尽可能保持守恒量的不变性^[28], 从而提升对满足守恒定律的 PDEs 的求解能力.

常见的守恒约束有能量守恒、动量守恒和物质守恒等. 其中, 物质守恒是化学方程中必须遵循的一项

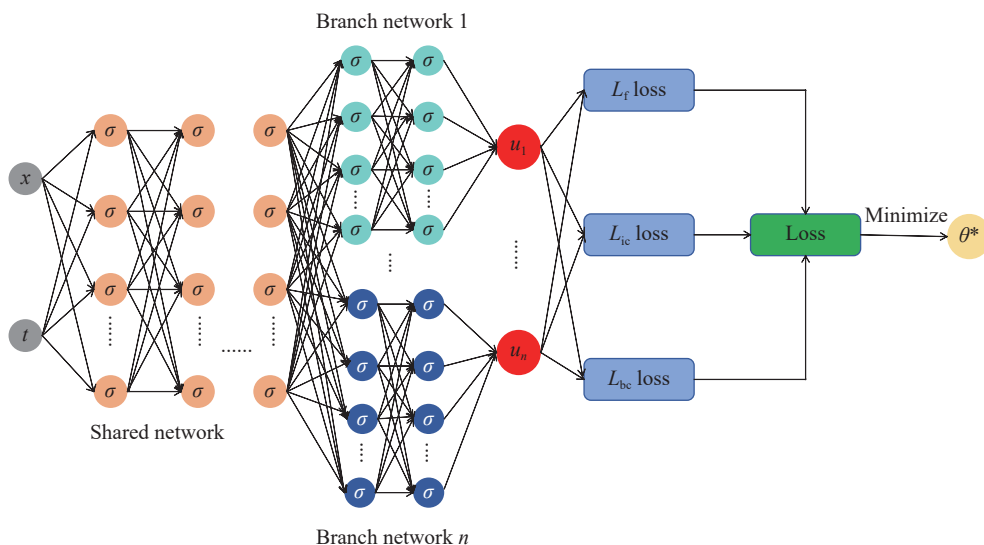


图 1 共享-分支网络结构

Fig. 1 Schematic of the shared-branch networks

基本原则, 确保封闭系统中反应物和生成物的总量保持不变. 由于化学反应过程的复杂性和反应物浓度的快速变化, 施加物质守恒约束能够有效增强刚性化学动力学求解的稳定性和准确性. 因此, 本文采用物质守恒约束求解具有刚性特性的化学反应动力学方程.

2.2 分段采样策略

采样方式的不同会导致求解精度的不同. 常见的采样方式有均匀采样、随机采样和分段采样等. 其中, 均匀采样在时间和空间域上等距离地选取点作为训练数据, 方法实现简单且覆盖范围广, 但是当 PDEs 的解具有奇异性或呈现多尺度特性时, 均匀采样无法有效捕捉这些复杂特征, 导致预测结果不准确或不稳定^[29]. 因此, 均匀采样通常用于特征变化相对均匀的情况. 随机采样策略则是根据一定的概率分布随机选取采样点, 灵活地适应数据特征, 尤其适用于处理不规则变化, 能够提高细节捕捉能力, 然而可能在某些区域采样不足, 导致数据不均衡.

分段采样策略是将整个时间域或空间域划分为若干个子区域, 根据每个区域的特征采用不同的采样方法, 以更好地捕捉不同时间段内的变化特征. 因此, 分段采样通常应用于刚性问题、长时间模拟问题^[30]、多尺度问题^[31]等.

3 数值实验

Robertson 方程^[32]是一个经典的刚性化学动力

学模型, 可用于描述化学反应动力学中的自催化反应过程以及大气化学中的臭氧生成和分解等复杂过程. 该模型由 3 个耦合的 ODEs 组成, 分别描述了各物质浓度随时间的变化过程.

Robertson 方程组式如下:

$$\frac{ds_1}{dt} = -k_1 s_1 + k_3 s_2 s_3, \quad (8)$$

$$\frac{ds_2}{dt} = k_1 s_1 - k_2 s_2^2 - k_3 s_2 s_3, \quad (9)$$

$$\frac{ds_3}{dt} = k_2 s_2^2. \quad (10)$$

为不失一般性, 将式 (8)~(10) 对应的初始条件设定为

$$s_1(0) = 1, s_2(0) = 0, s_3(0) = 0. \quad (11)$$

其中, $t \in [0, T]$, s_1, s_2, s_3 分别表示三种化学物质的浓度, k_1, k_2, k_3 均为反应速率常数. 值得注意的是, t, β, k_1, k_2, k_3 和 s_1, s_2, s_3 均为无量纲物理量. 本文中, 上述参数选取为 $k_1 = 4 \times 10^{-2}$, $k_2 = 3 \times 10^7$, $k_3 = 1 \times 10^4$.

显然, 将式 (8)~(10) 求和后, 其左侧之和恒为零, 这表明系统在发生化学反应时物质是守恒的. 通过对初始条件式 (11) 进一步求和可知, $E = s_1(t) + s_2(t) + s_3(t) = s_1(0) + s_2(0) + s_3(0) = 1$.

由于式 (8)~(10) 中反应速率常数在数值上存在数量级差异, 尤其是 k_2 和 k_3 远大于 k_1 , 导致系统的反应过程在时间尺度上表现出明显的不均衡. 其中变量

s_2 在某些区间内变化非常迅速, 而其他变量的变化则相对较缓慢, 从而引发了系统的刚性问题, 使得数值求解更加困难. 为缓解这一刚性问题, 对式 (8) ~ (10) 中的 s_2 , k_2 , k_3 进行预处理, 具体为: $\tilde{s}_2 = \beta^{-1}s_2$, $\tilde{k}_2 = \beta^2k_2$, $\tilde{k}_3 = \beta k_3$, 其中 $\beta = 10^{-4}$.

预处理后得到的待求解方程如下:

$$\frac{ds_1}{dt} = -k_1s_1 + \tilde{k}_3\tilde{s}_2s_3, \quad (12)$$

$$\beta \frac{d\tilde{s}_2}{dt} = k_1s_1 - \tilde{k}_2\tilde{s}_2^2 - \tilde{k}_3\tilde{s}_2s_3, \quad (13)$$

$$\frac{ds_3}{dt} = \tilde{k}_2\tilde{s}_2^2. \quad (14)$$

式 (12)~(14) 相应的初始条件变为

$$s_1(0) = 1, s_2(0) = \tilde{s}_2(0) = 0, s_3(0) = 0. \quad (15)$$

此时, 系统的总量依旧保持守恒, 对应的物质守恒关系为

$$E = s_1(t) + \beta\tilde{s}_2(t) + s_3(t) = 1. \quad (16)$$

引入守恒约束即式 (16) 后, 需要在损失函数中进行相应的修改, 确保基于 PINN 优化得到的解不仅能够拟合原方程, 还应满足物质守恒约束. 因此, 对标准 PINN 的损失函数进行调整, 具体表达式如下:

$$L = \lambda_f L_f + \lambda_{ic} L_{ic} + \lambda_{con} L_{con}; \quad (17)$$

$$L_{f_1} = \frac{1}{N_{f_1}} \sum_{i=1}^{N_{f_1}} \left| \left[\frac{ds_1(t)}{dt} + k_1s_1(t) - \tilde{k}_3\tilde{s}_2(t)s_3(t) \right] \right|^2, \quad (18)$$

$$L_{f_2} = \frac{1}{N_{f_2}} \sum_{i=1}^{N_{f_2}} \left| \left[\beta \frac{d\tilde{s}_2(t)}{dt} - k_1s_1(t) + \tilde{k}_2\tilde{s}_2(t)^2 + \tilde{k}_3\tilde{s}_2(t)s_3(t) \right] \right|^2, \quad (19)$$

$$L_{f_3} = \frac{1}{N_{f_3}} \sum_{i=1}^{N_{f_3}} \left| \left[\frac{ds_3(t)}{dt} - \tilde{k}_2\tilde{s}_2(t)^2 \right] \right|^2, \quad (20)$$

$$L_f = L_{f_1} + L_{f_2} + L_{f_3}; \quad (21)$$

$$L_{ic1} = \frac{1}{N_{ic1}} \sum_{i=1}^{N_{ic1}} |[s_1(0) - 1]|^2,$$

$$L_{ic2} = \frac{1}{N_{ic2}} \sum_{i=1}^{N_{ic2}} |[\tilde{s}_2(0) - 0]|^2,$$

$$L_{ic3} = \frac{1}{N_{ic3}} \sum_{i=1}^{N_{ic3}} |[s_3(0) - 0]|^2,$$

$$L_{ic} = L_{ic1} + L_{ic2} + L_{ic3}; \quad (22)$$

$$L_{con} = \frac{1}{N_{con}} \sum_{i=1}^{N_{con}} |[s_1(t) + \beta\tilde{s}_2(t) + s_3(t) - 1]|^2. \quad (23)$$

此外, 为衡量预测解的准确性, 采用相对误差公式, 利用 L_2 范数^[33] 衡量预测解与真实解之间的误差 e_r , 有

$$e_r = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_t} |u(t_i) - u_{pred}(t_i)|^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_t} |u(t_i)|^2}}. \quad (24)$$

4 结果与分析

在具体实验中, 所有计算均在 PyTorch 框架下执行, 激活函数选取 tanh. 网络结构由共享隐藏层和分支隐藏层组成, 其中共享隐藏层为 6 层, 3 个分支隐藏层均为 4 层, 每层神经元数量均设为 100, 优化器采用 Adam 和 L-BFGS 两种优化器的组合^[34]. 该策略使得在训练初期 Adam 优化器^[35] 能够获得待求解问题的近似解, L-BFGS 优化器^[36] 通过对近似解进行精细调整, 进一步提高了 PINN 的求解精度. 设 Adam 和 L-BFGS 优化器的学习率分别为 10^{-3} 和 1.

首先测试 $T=1$ 无守恒约束时的情况, 随机采样 1000 个点. 优化过程中, Adam 迭代 5000 步, 随后使用 L-BFGS 迭代 2000 步. 从图 2 中可以观察到 L-BFGS 优化器出现梯度爆炸, 导致求解失败. 这表明标准 PINN 对于刚性化学方程的求解存在困难.

针对图 2 中出现的梯度爆炸情况, 对优化器的迭代步数进行调整, 其中 Adam 的迭代步数增加至 6000, L-BFGS 的迭代步数仍为 2000. 从图 3 (b) 可以观察到, 尽管损失函数没有出现梯度爆炸, 但图 3 (a) 显示 s_2 的预测解与数值解之间依然存在显著偏差.

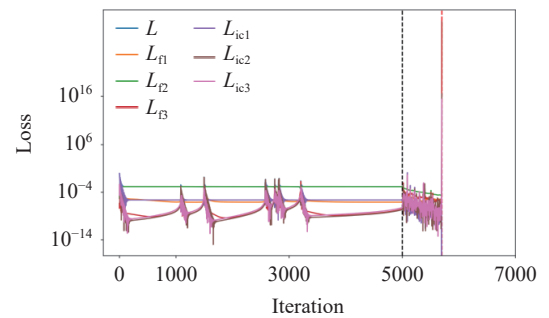


图 2 无守恒约束的损失函数

Fig. 2 Loss function without conservation constraint

虽然多次调整优化器迭代步数,但是始终未能准确拟合数值解.这一结果也进一步表明,在缺乏守恒约束的情况下,PINN的求解精度受限,难以捕捉到系统的动态特征.

针对上述问题,加入物质守恒约束式(16),并通过数值实验验证了其在方程求解中的关键作用.在此实验中,Adam迭代5000步,L-BFGS迭代2000步.图4(a)展示了加入守恒约束后,三种物质各自的预测解与数值解的对比结果.从图中可见,预测解与数值解几乎完全重合,表明守恒约束PINN(相比标准PINN)的预测精度得到显著提高.此外,图4(b)显示了相应的损失函数变化情况.观察该图可知,加入守恒约束后,损失函数快速下降,证明守恒约束可以有效改善PINN求解的准确性和稳定性.

对比图4(a)中各物理量的预测解与数值解可以发现,引入守恒约束后,PINN的求解性能显著提升.为进一步验证守恒约束的有效性,图5(a)(b)分别展示了有无守恒约束条件下,守恒量 E 随时间的变化情况.

从图5(a)可见,未引入守恒约束时,标准PINN预测的 E 值与理论值存在明显的偏离.当 t 持续增大时,二者的偏离逐渐显现.因此,标准PINN难以有效保持物质的守恒性质.另外,图5(b)显示了引入守恒约束后 E 随时间的演化.可以观察到,守恒约束PINN预测的 E 值在理论值附近有轻微的波动,波动范围为 $\pm 8 \times 10^{-5}$.总体而言,加入守恒约束后,PINN能够较好地保持物质守恒,相关性进一步说明了守恒约束的重要性和有效性.

通过在 $T=1$ 时加入守恒约束,PINN能够捕捉到式(10)~(12)的动态变化.为进一步验证守恒约束在较长时间中模拟的适用性,逐步扩大计算的时间域,分别测试守恒约束PINN在 $T=10$ 和 $T=50$ 时的性能,如图6(a)(b)所示,结果表明守恒约束PINN在 $T=10$ 和 $T=50$ 时内均可以达到很好的预测结果.

为进一步探讨守恒约束PINN在长时间尺度下的预测性能,将计算时间域拓展至 $T=500$.在本次实

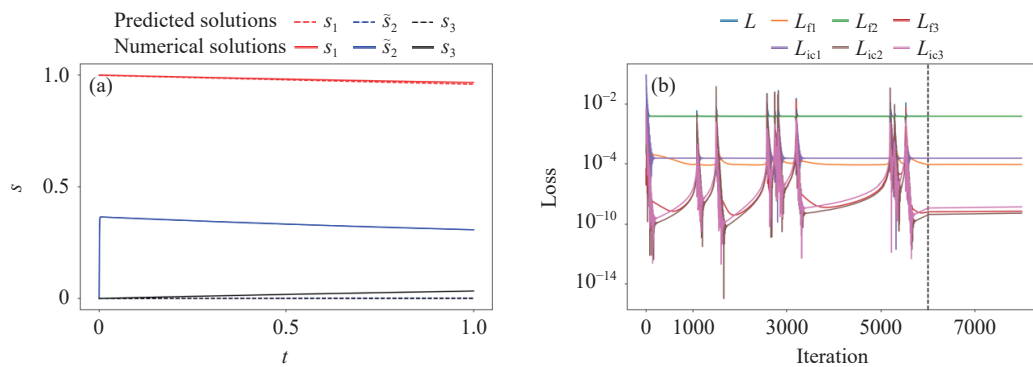


图3 无守恒约束条件下的预测结果(a)与损失函数(b)

Fig. 3 Predicted result (a) and loss function (b) without conservation constraint

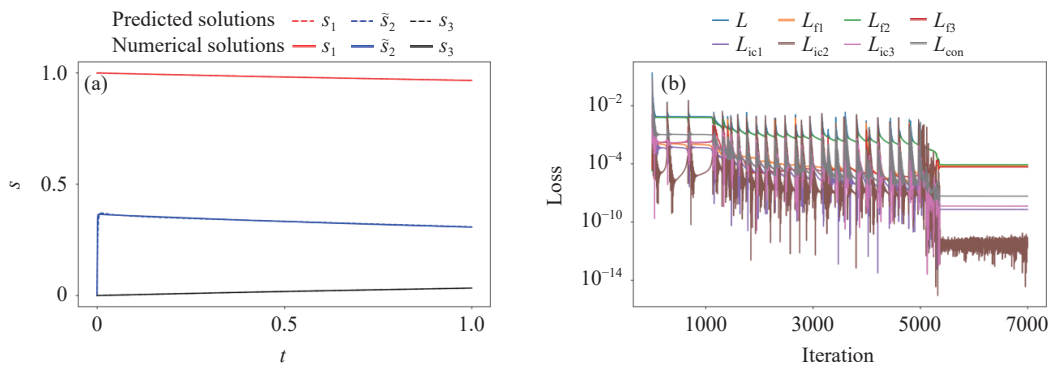


图4 加入守恒约束后的预测结果(a)和损失函数(b)

Fig. 4 Predicted result (a) and loss function (b) with conservation constraint

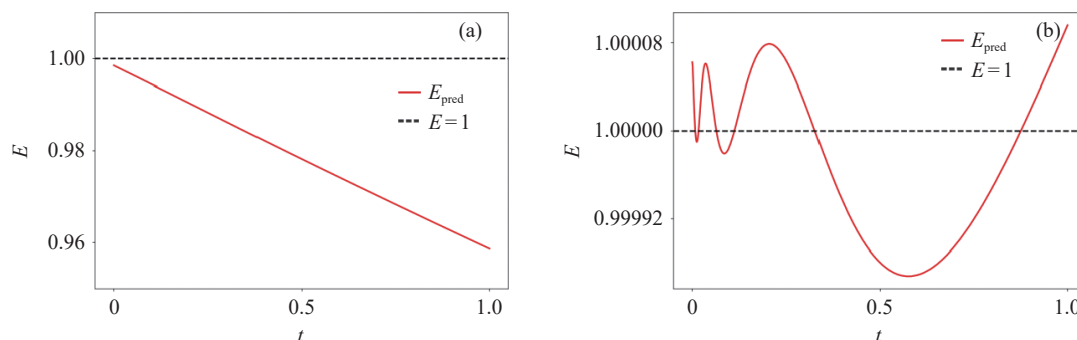
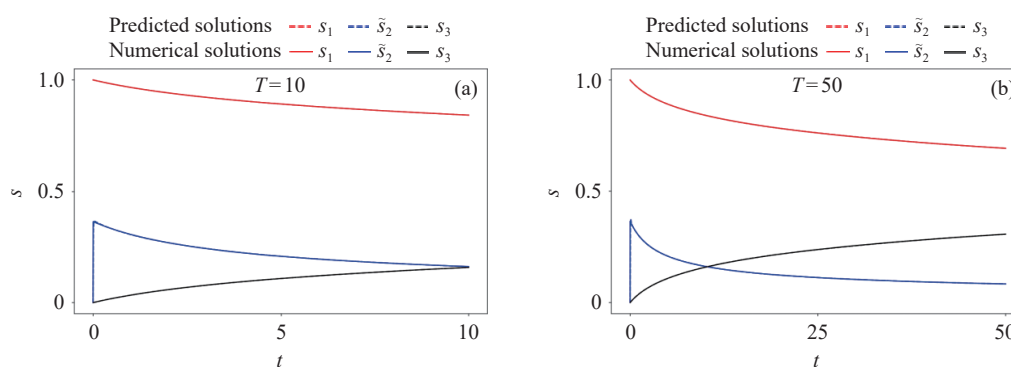
图 5 无物质守恒约束 (a) 和有物质守恒约束 (b) 守恒量 E 的预测值和理论值Fig. 5 Predicted solution and theoretical one of conservation quantity E without (a) and with (b) conservation constraint

图 6 守恒约束 PINN 的预测结果

Fig. 6 Predicted result with conservation constraint of PINN

验的优化过程中, Adam 迭代 30000 步, L-BFGS 迭代 5000 步. 采样点数量为 1000 时, 结果如图 7 (a)(b) 所示, 虽然损失函数表现出较好的收敛性, 但图 7 (a) 的预测解和数值解之间仍存在明显偏差, 这可能与 PINN 的时间域过长有关. 在优化过程中, 增加 Adam 的迭代步数至 35000, L-BFGS 的迭代步数保持不变, 并将采样点数量增加至 20000, 结果如图 7 (c)(d) 所示. 从图 7 (c) 中可以看出, 相比图 7 (a), 预测解的拟合程度有显著提升, 但仍未完全拟合. 说明在 $T=500$ 的长时间模拟下, 仍需进一步优化.

通过观察图 7 中的预测结果, 推测误差可能源于方程在 $T=50$ 时的刚性特性. 因此, 在变化剧烈的 $T=50$ 时增加采样点密度, 而在后续平缓的 $t \in [50, 500]$ 范围内减少采样点密度, 以实现采样点的合理分配. 具体而言, 在 $T=50$ 时增加采样点数量至 12000, 确保 PINN 能够有效捕捉到方程的剧烈变化; 在 $t \in [50, 500]$ 范围内减少采样点数量至 8000, 降低计

算负担的同时保持守恒约束 PINN 的求解精度. 在优化过程中, Adam 和 L-BFGS 迭代步数保持不变. 图 8 给出了采样过程, 可以更直观地反映本文采样策略.

从图 9 (b) 可以看出, 采用分段采样策略后, 损失函数显著降低. 与此同时, 图 9 (a) 显示预测解与数值解几乎完全吻合, 进一步验证了采用分段采样策略的守恒约束 PINN 能够实现刚性化学方程的长时模拟. 另外, 该策略显著提升了 PINN 的求解精度和稳定性. 为更清晰地展示随机采样和分段采样在长时模拟中的精度差异, 表 1 列出了两种采样策略的详细对比.

综上所述, 为实现刚性化学动力学的长时模拟, 采取两种关键策略. 首先, 加入守恒约束. 该方法可以使得原本难以计算的式 (12)~(14) 得以有效求解. 事实上, 守恒约束有效增强了预测解的合理性, 提高了 PINN 的求解精度. 在此基础上, 采用分段采样策略. 该策略在长时模拟中有显著优势, 有效解决了

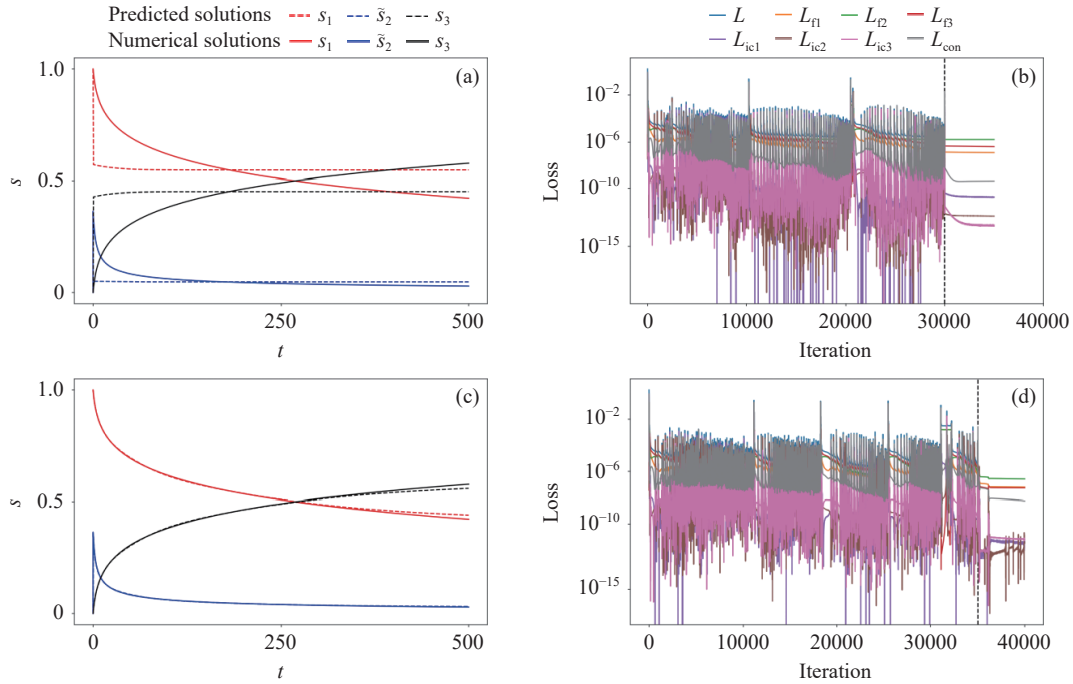


图 7 守恒约束 PINN 在随机采样策略下的预测结果 (a)(c) 和损失函数 (b)(d).

(a) (b) 采样点数为 1000, (c) (d) 采样点数为 20000

Fig. 7 Predicted results (a)(c) and loss functions (b)(d) with conservation constraint of PINN under random sampling strategy. The number of sampling points in panels (a) and (b) is 1000, while in panels (c) and (d) is 20000

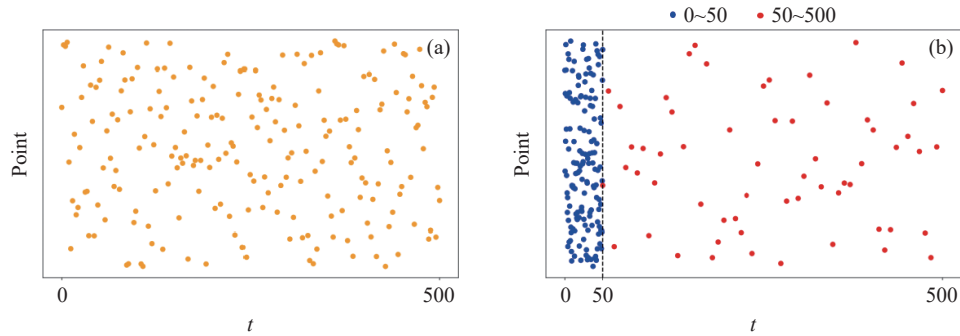


图 8 随机采样策略 (a) 和分段采样策略 (b)

Fig. 8 Schematic of random sampling strategy (a) and segmented sampling strategy (b)

PINN 在长时任务中精度不高和稳定性不足的问题, 使得复杂系统的模拟变得更加可行和高效. 上述两种策略的结合显著提升了 PINN 的整体表现. 如表 1 所示, 当 $T=500$ 时, 分段采样策略使得 s_2 的相对误差从 99.99% 降低到 10.72%, 进一步验证了该方法的有效性.

在前述工作的基础上, 进一步讨论物质守恒约束的不同数学表示形式对计算结果的影响. 一般而言, 守恒约束可以表示为式 (16). 为讨论守恒约束的数学

形式对 PINN 性能的影响, 引入如下两种额外的守恒形式:

$$E^2 = 1, \quad (25)$$

$$\sqrt{E} = 1. \quad (26)$$

本次实验中, 在 Adam 优化器和 L-BFGS 优化器迭代步数保持不变的情况下, 分别测试了式 (16)、式 (25) 和式 (26) 这三种数学形式对应的预测结果. 表 2 展示了 $T=500$ 时这三种不同数学形式对结果的

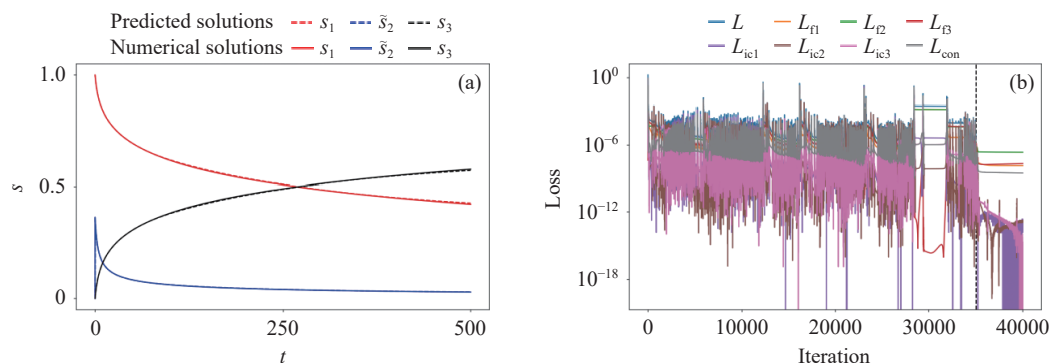


图 9 守恒约束 PINN 在分段采样策略下的预测结果 (a) 和损失函数 (b)

Fig. 9 Predicted results (a) and loss function (b) with conservation constraint of PINN under segmented sampling strategy

表 1 随机采样策略和分段采样策略的相对误差

Table 1 Relative error of the random sampling strategy and the segmented sampling strategy

采样策略	采样点数量	Adam	L-BFGS	s_1 相对误差/(%)	s_2 相对误差/(%)	s_3 相对误差/(%)
随机采样	20000, $t \in [0, 500]$	35000	5000	1.22	99.99	1.42
分段采样	12000, $t \in [0, 50]$; 8000, $t \in [50, 500]$	35000	5000	0.40	10.72	0.47

表 2 三种不同形式物质守恒约束对应的预测结果

Table 2 Predicted results for three different forms of material conservation constraint

守恒形式	Adam	L-BFGS	时间/min	s_1 相对误差/(%)	s_2 相对误差/(%)	s_3 相对误差/(%)
$E = 1$	35000	5000	13.58	0.40	10.72	0.46
$E^2 = 1$	35000	5000	12.26	85.38	99.99	99.71
$\sqrt{E} = 1$	35000	5000	13.59	0.52	99.99	0.64

影响.

从表 2 中可见, 物质守恒约束的不同数学形式对 PINN 的预测精度存在明显差异. 采用原始形式的式 (16), s_2 的相对误差明显小于其他两种形式. 相比之下, 式 (25) 对应的相对误差大幅上升. 其中, s_2 和 s_3 的相对误差均达到了 99.99% 和 99.71%. 另外, 尽管式 (26) 对应的 s_1 和 s_3 的相对误差在可接受的范围内, 但 s_2 相对误差依然较大. 此外, 三种守恒约束形式对应的计算时间差别不大. 因此, 方程 (16) 的数学形式所给出的预测性能最佳.

5 结论

本文通过使用共享-分支网络和分段采样策略的守恒约束 PINN, 成功实现了刚性化学方程的长时模

拟. 通过数值实验, 展示了守恒约束和分段采样策略在刚性化学动力学问题的长时模拟中的重要性.

守恒约束的引入解决了标准 PINN 难以准确求解刚性化学方程的问题. 加入物质守恒约束后, PINN 不仅能够精准模拟 $T=1$ 时的解, 甚至在计算域扩展至 $T=500$ 时, 仍能保持较好的性能. 然而由于方程的刚性特性, 单纯依赖随机采样策略难以保证 PINN 在长时积分任务中也给出足够好的稳定性和精度. 因此, 通过采取分段采样策略, 合理分配采样点, 可以使得守恒约束 PINN 在 $T=500$ 的计算域内也能够得到准确的物理结果. 结合上述两种策略, 实现了对刚性化学反应动力学方程的长时模拟. 此外, 还对不同数学形式的守恒约束对计算结果的影响进行了讨论. 计算结果表明, 虽然这些约束本质上是一致的, 但其计算精度存在显著差异.

守恒约束 PINN 在空间科学中的应用也值得进一步探索, 特别是无碰撞空间等离子体中波动问题的研究. 值得注意的是, 通过在损失函数中增加惩罚项来近似实现守恒约束. 在未来的研究中, 可进一步探索通过特定的网络设计保证守恒量的严格守恒, 从而进一步提高 PINN 的性能.

本文研究结果为 PINN 在多尺度强非线性化学反应动力学问题的长时模拟提供了一种新的思路, 也为空间科学中高维 PDEs 的求解奠定了基础. 未来可进一步改进现有的 PINN 框架, 并结合传统方法, 推动其在空间科学等领域中的应用.

参考文献

- [1] DROZDOV A Y, SHPRITS Y Y, USANOVA M E, *et al.* EMIC wave parameterization in the long-term VERB code simulation[J]. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 2017, **122**(8): 8488-8501
- [2] QIAN Y, LEUNG L R. A long-term regional simulation and observations of the hydroclimate in China[J]. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2007, **112**(D14): D14104
- [3] DE FLORIO M, SCHIASSI E, FURFARO R. Physics-informed neural networks and functional interpolation for stiff chemical kinetics[J]. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 2022, **32**(6): 063107
- [4] HUANG Y L, SEINFELD J H. A neural network-assisted Euler integrator for stiff kinetics in atmospheric chemistry[J]. *Environmental Science & Technology*, 2022, **56**(7): 4676-4685
- [5] WU Z Y, LI M J, HE C, *et al.* Physics-informed learning of chemical reactor systems using decoupling-coupling training framework[J]. *AIChE Journal*, 2024, **70**(7): e18436
- [6] CHEN W B, WANG X M, YAN Y, *et al.* A second order BDF numerical scheme with variable steps for the Cahn-Hilliard equation[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2019, **57**(1): 495-525
- [7] CHEN Lirong, LIU Degui. Parallel rosenbrock methods for stiff ordinary differential equations[J]. *Mathematica Numerica Sinica*, 1998, **20**(3): 251-260 (陈丽容, 刘德贵. 求解刚性常微分方程的并行 Rosenbrock 方法 [J]. 计算数学, 1998, **20**(3): 251-260)
- [8] 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]. *Journal of Computational Physics*, 2019, **378**: 686-707
- [9] LU L, MENG X H, MAO Z P, *et al.* DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations[J]. *SIAM Review*, 2021, **63**(1): 208-228
- [10] LIU G R, GU Y T. An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming[M]. Dordrecht: Springer, 2005
- [11] ZHONG L L, WU B Y, WANG Y F. Low-temperature plasma simulation based on physics-informed neural networks: frameworks and preliminary applications[J]. *Physics of Fluids*, 2022, **34**(8): 087116
- [12] BATY H, VIGON V. Modelling solar coronal magnetic fields with physics-informed neural networks[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2024, **527**(2): 2575-2584
- [13] MA J Y, FU H Y, HUBA J D, *et al.* A novel ionospheric inversion model: PINN-SAMI3 (physics informed neural network based on SAMI3)[J]. *Space Weather*, 2024, **22**(4): e2023SW003823
- [14] DAHLBÜDDING D, MOLAVERDIKHANI K, ERCOLANO B, *et al.* Approximating Rayleigh scattering in exoplanetary atmospheres using physics-informed neural networks[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2024, **533**(3): 3475-3483
- [15] LIVERMORE P W, WU L Y, CHEN L W, *et al.* Reconstructions of Jupiter's magnetic field using physics-informed neural networks[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2024, **533**(4): 4058-4067
- [16] WANG S F, TENG Y J, PERDIKARIS P. Understanding and mitigating gradient flow pathologies in physics-informed neural networks[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2021, **43**(5): A3055-A3081
- [17] JI W Q, QIU W L, SHI Z Y, *et al.* Stiff-PINN: physics-informed neural network for stiff chemical kinetics[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2021, **125**(36): 8098-8106
- [18] WENG Y T, ZHOU D Z. Multiscale physics-informed neural networks for stiff chemical kinetics[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2022, **126**(45): 8534-8543
- [19] WANG S F, PERDIKARIS P. Long-time integration of parametric evolution equations with physics-informed deepnets[J]. *Journal of Computational Physics*, 2023, **475**: 111855
- [20] WEI Chang, FAN Yuchen, ZHOU Yongqing, *et al.* Multi-output physics-informed neural networks model based on the Runge-Kutta method[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, **55**(10): 2405-2416 (韦昌, 樊昱晨, 周永清, 等. 基于龙格库塔法的多输出物理信息神经网络模型 [J]. 力学学报, 2023, **55**(10): 2405-2416)
- [21] HUANG Q M, MA J X, XU Z. Mass-preserving Spatio-temporal adaptive PINN for Cahn-Hilliard equations with strong nonlinearity and singularity[OL]. arXiv preprint arXiv: 2404.18054, 2024
- [22] SONG Jiahao, CAO Wenbo, ZHANG Weiwei. FD-PINN: frequency domain physics-informed neural network[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, **55**(5): 1195-1205 (宋家豪, 曹文博, 张伟伟. FD-PINN: 频域物理信息神经网络 [J]. 力学学报, 2023, **55**(5): 1195-1205)

- [23] CHEN Z, LIU Y, SUN H. Physics-informed learning of governing equations from scarce data[J]. *Nature Communications*, 2021, **12**(1): 6136
- [24] SIVAMOCHAN S, SRIDHAR S S, KRISHNAVENI S. An effective recurrent neural network (RNN) based intrusion detection via bi-directional long short-term memory[C]//Proceedings of 2021 International Conference on Intelligent Technologies (CONIT). Hubli: IEEE, 2021: 1-5
- [25] WU K L, XIU D. Data-driven deep learning of partial differential equations in modal space[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, **408**: 109307
- [26] BRANDSTETTER J, WORRALL D E, WELLING M. Message passing neural PDE solvers[C]//Proceedings of the Tenth International Conference on Learning Representations. ICLR, 2022
- [27] 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[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, **365**: 113028
- [28] LIN S N, CHEN Y. A two-stage physics-informed neural network method based on conserved quantities and applications in localized wave solutions[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, **457**: 111053
- [29] LI Daolun, SHEN Luhang, ZHA Wenshu, *et al.* New progress in intelligent solution of neural operators and physics-informed-based methods[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, **56**(4): 875-889 (李道伦, 沈路航, 查文舒, 等. 基于神经算子与类物理信息神经网络智能求解新进展 [J]. 力学学报, 2024, **56**(4): 875-889)
- [30] MENG X H, LI Z, ZHANG D K, *et al.* PPINN: parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, **370**: 113250
- [31] ISHIGURO S, USAMI S, HORIUCHI R, *et al.* Multi-scale simulation for plasma science[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, **257**(1): 012026
- [32] AKINSOLA V O, OKE E O, AMAO F A, *et al.* Numerical solutions of robertson chemical kinetic equation using a modified semi implicit extrapolation method and Runge-Kutta method of order four[J]. *Adeleke University Journal of Science*, 2023, **2**(1): 22-33
- [33] GUO J W, YAO Y Z, WANG H, *et al.* Pre-training strategy for solving evolution equations based on physics-informed neural networks[J]. *Journal of Computational Physics*, 2023, **489**: 112258
- [34] PAN Xiaoguo, WANG Kai, DENG Weixin. Accelerating convergence algorithm for physics-informed neural networks based on NTK theory and modified causality[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, **56**(7): 1943-1958 (潘小果, 王凯, 邓维鑫. 基于 NTK 理论和改进时间因果的物理信息神经网络加速收敛算法 [J]. 力学学报, 2024, **56**(7): 1943-1958)
- [35] KINGMA D P, BA J. Adam: a method for stochastic optimization[OL]. arXiv preprint arXiv: 1412.6980, 2014
- [36] BYRD R H, LU P H, NOCEDAL J, *et al.* A limited memory algorithm for bound constrained optimization[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1995, **16**(5): 1190-1208

作者简介



方涵敏 女, 1998 年 12 月出生于安徽省合肥市, 现为安徽工业大学计算机科学与技术学院硕士研究生, 主要研究方向为 AI for Science 和智能科学计算。
E-mail: fanghanmin@ahut.edu.cn



黄文龙 (通信作者) 男, 1988 年 8 月出生于安徽省铜陵市, 现为安徽工业大学计算机科学与技术学院副教授, 硕士生导师, 主要研究方向为 AI for Science、空间等离子体物理、聚变等离子体物理等。
E-mail: whuang@ahut.edu.cn