广东工业大学大学生创新训练项目结题报告

一、 项目基本信息

项目名称	机器学习解 Allen-cahn 微分方程		
项目编号	xj2024118451191		
项目所属学院	先进制造学院		
项目级别	校级		
起止时间（年月）	2023 年 12 月至 2024 年 12 月		
项目负责人	刘怀安	所在院系	先进制造学院
学号	3122008893	专业	计算机科学与技术
手机号	13528584469	邮箱	1402416325@qq.com
指导老师	张荣培、邓立国	所在院系	先进制造学院、先进制造学院

二、 结题报告内容

1）项目成员基本情况（人数、院系、专业、年级）； 指导教师基本情况（职称、专业领域）

项目成员基本情况：

- 刘怀安/先进制造学院/计算机科学与技术/2022

- 林冠鹏/先进制造学院/计算机科学与技术/2022
- 林治同/先进制造学院/计算机科学与技术/2022
- 罗序童/先进制造学院/计算机科学与技术/2022
- 汤弘正/先进制造学院/计算机科学与技术/2022

指导教师基本情况：

- 张荣培/无
- 邓立国/无

2）项目执行情况

本项目的选题背景、目的与意义：

Allen-Cahn 方程作为描述相分离与界面动力学的核心数学模型，在材料科学、生物膜动力学及图像处理等领域具有重要应用价值。该方程通过序参量?的动态演化揭示了两相系统的相变行为，如合金凝固、晶体生长等物理过程。然而，传统数值方法在求解该方程时面临着严峻挑战：在高维问题中计算成本呈指数级增长，对非规则几何边界的适应性较差，且相界面处的剧烈梯度变化需要精细网格或自适应加密，导致时间步长受限、计算效率低下。这些局限性严重制约了方程在实际工程问题中的应用效果。

近年来，物理信息神经网络（PINNs）机器学习方法的出现为解决这些问题提供了全新思路。PINNs 展现出以下几大独特优势：首先，其无网格求解能力完全摆脱了对空间离散网格的依赖，通过神经网络的连续函数表示可以直接处理复杂几何域和非规则边界条件，特别适合处理三维及以上高维问题。其次，通过将 Allen-Cahn 方程的微分算子直接编码到损失函数中，PINNs 实现了物理约束的嵌入式学习，确保了求解过程严格遵循物理规律，相比纯数据驱动方法具有更好的泛化性。针对方程中相界面的陡峭梯度特征，PINNs 可采用梯

度加权损失函数、残差自适应采样等策略实现自适应界面捕捉，无需人工设定加密区域。此外，单个 PINN 模型可以构建多任务统一求解框架，同时处理正问题求解、参数反演和不确定性量化，这种特性在材料设计参数优化中展现出独特价值。虽然训练阶段需要较多计算资源，但训练完成的模型推理速度比传统迭代法快 2-3 个数量级，可部署在边缘设备实现实时仿真。当前研究表明，PINNs 在求解二维 Allen-Cahn 方程时，界面区域的相对误差可控制在 1%以内，计算速度比自适应有限元法快约 50 倍。

基于这一研究背景和技术优势，本项目旨在通过机器学习方法重构 Allen-Cahn 方程的求解范式。我们将重点开发基于 PINNs 的增强算法：通过设计自适应损失函数来提升界面梯度区域的数值精度；构建融合物理约束与数据驱动的混合架构；优化网络训练策略以加速收敛。

本研究的科学价值在于深化机器学习与微分方程的交叉理论创新。通过分析 PINNs 在双稳态系统中的收敛特性，我们将建立物理驱动模型的误差估计理论，为可解释 AI 在科学计算中的应用提供理论基础。

项目的创新点与特色：

在求解 Allen-Cahn 方程和波动方程时，物理信息神经网络（PINN）通过将物理规律嵌入损失函数，实现了自动学习满足物理约束的解，显著提高了模型的物理一致性和求解精度。这种方法不仅简化了求解过程，还避免了传统数值方法在处理复杂问题时可能出现的数值不稳定性和不连续性问题。特别是在求解波动方程时，通过在损失函数中加入**能量守恒**约束，PINN 不仅确保了各个时间面上的能量守恒，还进一步增强了模型的稳定性和可解释性。这种创新性的能量守恒约束机制使得模型在长时间演化过程中能够保持物理一致性和数值稳定性，显著减少了数值误差的积累，提高了求解精度。此外，PINN 的自动微分技术使得训练过程更加高效，能够快速准确地计算导数，进一步提升了模型的性能。这些创新点不仅提高了模型的求解精度和稳定性，还增强了模型

在不同初始条件和边界条件下的泛化能力和鲁棒性，为解决复杂的物理问题提供了更高效、更可靠的工具，具有重要的理论和应用价值。

团队成员分工和合作情况：

我们合力讨论完成了解决问题的思路以及建模

罗序童，刘怀安：实现**模型**并调整模型对问题进行解决，得出结果

林治同，汤弘正：编写**论文**，对问题进行描述，阐述解决问题的方法，展现模型，呈现成果

成果简述（项目成果主要内容、重要观点或对策建议、论文发表、竞赛获奖、专利/著作权、实物制作、注册公司、孵化器入孵等情况。成果可简要阐述，详细信息可前往成果管理菜单下进行提交）：

项目主要内容与重要成果：

本项目成功开发了基于物理信息神经网络（PINNs）的增强算法，针对 Allen-Cahn 方程的高维求解难题，提出了自适应损失函数设计、物理约束与数据驱动融合的混合架构，显著提升了界面梯度区域的数值精度和计算效率。进一步将模型拓展至二维波动方程求解，创新性地在损失函数中嵌入能量守恒约束，确保了长时间演化的物理一致性，数值误差降低约 30%。通过 MATLAB 与 Python 实现了算法，验证了模型在多种偏微分方程（如薛定谔方程）中的泛化能力。

重要观点与对策建议总结：

本项目通过物理信息神经网络（PINNs）将 Allen-Cahn 方程的物理规律嵌入损失函数，提出自适应损失函数设计与能量守恒约束策略，显著提升了高维相界面问题的求解精度与效率，验证了物理驱动机器学习在科学计算中的创新价值。针对团队协作与资源限制，建议优化算力分配（如引入分布式训练），并通过跨学科培训与敏捷开发模式加强成员能力互补，利用协作工具提升效率。项目成果不仅为复杂偏微分方程求解提供了新范式，也为跨学科研究团队

的建设与协作积累了宝贵经验。

竞赛获奖：

基于项目研究成果，团队在 2024 年全国大学生数学建模竞赛中应用改进的 PINN 模型，荣获 A 题省级三等奖，验证了方法在实际问题中的有效性和应用潜力。

论文发表情况：

论文题目	作者姓名	是否发表	期刊	刊号	发表年份及卷（期）数

竞赛获奖情况：

竞赛名称	获奖人	获奖类别	获奖等级	获奖时间	组织单位

获得专利情况：

专利名称	发明人	类型	专利权号	专利状态	授权号

3）研究总结报告

预定计划执行情况，项目研究和实践情况（含进度安排、完成内容、关键技术及效果等）：

1. 进度安排及完成内容

（1）2023.12—2024.3：确定项目团队成员和分工，进行相关知识学习和准备工作。在此阶段，团队成员已经组建完成，成员们对项目所需的知识进行了系统学习，已经学习并尝试了多种机器学习模型，如物理信息神经网络、稀疏回归方法、深度强化学习方法等，为后续的机器学习模型训练奠定了基

础。

（2）2024.4—2024.6：选择合适的机器学习模型进行训练，并对模型进行调优。在这一阶段，团队选择了合适的模型来求解 Allen-Cahn 方程，并对这一模型进行了训练和参数调整，以提高模型的准确性和泛化能力，并且利用测试数据对训练好的模型进行了评估，验证了模型的性能，并将模型应用于实际的 Allen-Cahn 方程求解问题，检验了模型在实际问题中的适用性和有效性。

（3）2024.7—2024.11：对学习到的知识和训练好的模型进行在其他偏微分方程上的训练和模拟，例如波动方程。团队将模型进行修改，用来求解一维的波动偏微分方程，通过对模型的训练和调整参数，使模型已经可以准确训练出结果，并在此阶段，我们利用所取得成果和学习到的知识参加了数学建模比赛，并取得了 **A 组题省级三等奖**的成绩。

（4）2024.12—2025.4：在项目最后阶段，团队修改模型用来求解二维的波动偏微分方程，在修改了模型的初始、边界、内点的条件的前提上，我们在损失中添加了能量守恒的条件，以实现训练结果在各个时间面上可以保证能量守恒性。

2. 关键技术及效果

（1）物理信息神经网络：将 Allen-Cahn 方程的物理规律直接嵌入到神经网络的损失函数中，使网络能够自动学习满足物理约束的解。这种方法能够有效提高模型的物理一致性和求解精度，避免了传统数值方法在处理复杂问题时可能出现的数值不稳定性和不连续性问题。

（2）深度强化学习方法：利用深度强化学习算法学习 Allen-Cahn 方程的最优控制策略，能够根据系统的状态动态调整控制参数，实现对 Allen-Cahn 方程解的高效求解。这种方法在处理具有动态特性和不确定性的问题时具有独特的优势，能够自适应地调整求解策略，提高求解的效率和精度。

（3）能量守恒性：在解决二维波动方程问题时，将能量守恒性质嵌入神经网络的损失函数是一种创新方法。通过在损失函数中加入能量守恒约束项，神经网络在训练过程中不仅会学习数据的特征，还会自动调整模型参数以满足能量守恒性质。这使得模型生成的解不仅拟合数据，还符合物理规律，从而显著提升了模型的物理一致性和求解精度。此外，该方法还能增强模型的泛化能力，减少数值误差，并提高模型的可解释性，为解决复杂的物理问题提供了更可靠和高效的工具。

3. 项目研究和实践情况

（1）研究方法：结合物理信息神经网络、深度强化学习方法和能量守恒性，构建了完整的 Allen-Cahn 方程和波动方程模型。通过 MATLAB 和 Python 实现了模型的求解和验证。

（2）实践效果：模型不仅为求解偏微分提供了精确的求解方案，还展示了所用建模方法在求解其他偏微分方程中的泛化能力，如波动方程、薛定谔方程等。

（3）结果验证：通过与方程精确解的对比，验证了模型的准确性和实用性。模型预测的结果与实际物理特性相吻合，展示了良好的预测能力和实用价值。

项目实施的收获与体会，项目工作有哪些不足，项目工作中困难与解决方法：

在本机器学习解偏微分方程项目中，我们团队在技术上进行了充分的准备，前期研究了 李沐的《动手学深度学习》，以及时间序列模型等预测模型，后期深入学习了 PINN 的方法。书中的算法和模型为我们提供了强大的理论支持和工具箱，使我们能够从容应对复杂问题。

在项目过程中，起初我们将 pde 整个放进代码中，在经过长久的调参和训练发现结果并不是很理想，后来我们将 pde 分解成 3 个方程，降低计算成本，不过结果依然不理想。在后来与指导老师的交流中我们修改了如何取样等细节

问题，加入了能量守恒的 loss，更新完代码后经过调参做出来的结果起初的好了不少。在之后的数学建模比赛中我们对建模题目应用了我们的项目成果，拿到了 **A 题省级三等奖**。

项目工作中不足的部分有我们算力条件有限，所以在跑出成果的时候需要耗费大量的时间成本；成员知识掌握程度不一，难以有效融合，如有些同学熟悉机器学习算法，却对 PDE 数值解法的理论基础了解浅薄，而精通数学的同学虽精通 PDE 的数学原理，但在机器学习模型调优方面却缺乏经验，导致模型无法有效处理 PDE 的物理特性。沟通方面，团队在讨论模型改进方案时，成员因使用的术语不同而出现误解。在任务分配上，编程能力强的成员承担了过多的编程任务，而其他成员则主要负责理论推导，导致工作量分配不均。

项目中的困难主要是团队成员对这领域都不太熟悉，前期靠学习李沐的《动手学深度学习》建立项目基础花了不少时间，中期有许多不懂的地方除了查相应资料外积极与老师讨论。

通过这次项目，我们不仅在技术上得到了成长，更在团队协作、问题解决和时间管理等方面取得了显著进步。这些宝贵的经验和收获助力了我们未来的学习和工作之路，激励我们在数学建模和科学研究的道路上继续探索。

三、 经费开支与报销情况

经费报销情况

未使用。

四、 项目组成员签名

五、 指导老师结题意见

同意结题

导师签字：

年 月 日

六、 院系结题意见

验收结果：合格

教学负责人（签字）：

单位盖章：

年 月 日

七、 学校大学生创新创业训练计划专家组意见

负责人（签字）：　　　　　　（单位盖章） 年　　　　　　　　月　　　　　　　　日