

Chinese Journal of Computational Physics

ISSN 1001-246X,CN 11-2011/O4

《计算物理》网络首发论文

题目: 面向深度学习方法的间断系数微分方程变域积分弱解理论

作者: 刘东,廖真,刘洋

网络首发日期: 2025-09-12

引用格式: 刘东,廖真,刘洋.面向深度学习方法的间断系数微分方程变域积分弱解理

论[J/OL]. 计算物理. https://link.cnki.net/urlid/11.2011.O4.20250912.1112.002





网络首发: 在编辑部工作流程中,稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定,且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式(包括网络呈现版式)排版后的稿件,可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定;学术研究成果具有创新性、科学性和先进性,符合编辑部对刊文的录用要求,不存在学术不端行为及其他侵权行为;稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准,正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性,录用定稿一经发布,不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容,只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认:纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊(光盘版)》电子杂志社有限公司签约,在《中国学术期刊(网络版)》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版,以单篇或整期出版形式,在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊(网络版)》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物(ISSN 2096-4188, CN 11-6037/Z),所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

面向深度学习方法的间断系数微分方程变域积分弱解理论

刘东 1,2,∞, 廖真 1, 刘洋 3

(1.中国核动力研究设计院先进核能技术全国重点实验室,四川成都 610213;

2.中国核工业集团有限公司科技委, 北京 100045;

3.四川大学计算机学院(软件学院、智能科学与技术学院),四川成都 610064)

摘要 微分方程的弱解理论是解决间断系数问题的经典理论框架,在科学研究和实际工程中已得到了广泛应用。近年来,深度学习方法求解微分方程的技术取得了长足的进步,但该方法利用传统弱解理论求解间断系数方程却遇到了严重挑战。为此,论文提出了面向深度学习方法的变域积分弱解理论:不同于传统弱解理论构造固定限积分的分部积分方法,本文针对深度学习计算方法需要全域空间样本的特点,构建了方程变域积分弱解形式,并给出了针对典型微分方程通用形式及多种具体形式的推导方法,阐述了基于这种弱解形式方程的深度学习求解流程。多个典型算例表明,本文提出的理论具有良好的精度与适用性,从而为间断系数微分方程数值求解方法探索出了新的技术途径。

关键词 间断系数; 微分方程; 弱解形式; 变域积分; 深度学习

中图分类号 TL329 文献标志码 A

Variable-domain Integral Weak Solution Theory for Deep Learning Methods Solving Differential Equations with Discontinuous Coefficients

LIU Dong^{1,2,⊠}, LIAO Zhen¹, LIU Yang³

- $(1.\ \textit{Nuclear Power Institute of China, State Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Technology, Chengdu \ \ , \ \ Sichuan \ 610213, \ China;}$
- $2.\ Science\ and\ Technology\ Committee\ of\ China\ National\ Nuclear\ Corporation,\ Beijing\ 100045,\ China\ ;$

3. College of Computer Science (School of Software and School of Artificial Intelligence), Sichuan University, Chengdu, Sichuan 610064, China)

Abstract The weak solution theory of differential equations has been widely adopted as a classical framework for solving discontinuous coefficient problems in both scientific research and practical engineering applications. While deep learning methods have recently demonstrated remarkable progress in solving differential equations, significant challenges remain when applying conventional weak solution theory to discontinuous coefficient equations within these methods due to the singularities of the equations at discontinuities. This paper presents a novel Variable-domain Integral Weak Solution theory (VIWS) specifically designed for deep learning approaches. Departing from traditional fixed-limit integration by parts methods, the proposed theory establishes a variable-domain integral weak formulation that accommodates the global sampling characteristics essential for deep learning computations. We provide complete derivations for both general and specific forms of representative differential equations, along with a comprehensive deep learning solution framework based on this formulation. Through multiple typical numerical examples, we demonstrate that the proposed theory achieves high accuracy and applicability, thereby establishing a new technical pathway for numerically solving differential equations with discontinuous coefficients.

Key words discontinuous coefficients; differential equations; weak solution form; variable-domain integral; deep learning

0 引言

间断系数微分方程的求解在工程科学与工业应用中具有至关重要的意义,广泛存在于传热与粒子扩散、反应堆中子输运、高速流体动力学、复合材料力学、电磁场耦合仿真等关键领域^{[1][2][3]}。其系

基金项目:国家自然科学基金面上项目(12575189)、国家基础性科研院所基础科研稳定支持专项(WDZC-2023-05-03-05)、四川省揭榜挂帅行业共性技术攻关项目(2023YFG0373)、

作者简介: 刘东, 男, 博士 , 正高, 博导, 国家级科技创新领军人才, 研究方向为先进数值计算方法、核能工业软件、人工智能技术等 E-mail:493159139@qq.com

网络首发时间: 2025-09-12 14:12:38 网络首发地址: https://link.cnki.net/urlid/11.2011.O4.20250912.1112.002

数的不连续性源于材料界面突变、相变边界或控制参数的阶跃变化,导致解在间断处呈现强非线性或奇异特性。传统数值方法(如有限元法、有限差分法)往往因局部奇异特性而失效,需依赖浸入界面法、间断伽辽金法等特殊技术处理界面问题,计算复杂度高,其收敛性、稳定性面临一定挑战[4][5][6]。因此,发展高精度间断系数微分方程求解方法既是工业设计的迫切需求,也是计算数学领域的长期难点与研究热点。

近年来,物理信息神经网络 PINNs(Physics-informed Neural Networks)等基于深度学习的微分方程求解方法展现出求解非线性系统的巨大潜力,已在众多的复杂问题数值计算上取得了显著的成果[7][8]。然而,面对间断系数问题,现有方法遭遇根本性挑战,主要原因是系数突变导致数值解的光滑性假设失效,而神经网络对高频信号的逼近能力有限,难以捕捉界面处解的导数跳跃与高频特性。面对这些问题,学术界进行了大量探索,文献[9]提出了多个区域分别用不同神经网络表述,间断界面加入约束的方法,在区域不多的情况下取得了良好效果,但这种方法对于具有大量间断区域的工程应用,在计算精度与效率上存在一定的局限性。文献[10]通过构建特殊的神经网络层参数,在网络中"吸收"间断边界条件,在规则几何上取得了良好效果,但这种方法处理复杂非线性间断边界问题上仍具有一定困难。目前,探索间断系数微分方程的高精度、高效率深度学习求解方法已成为智能计算的关键攻坚领域[11]。

与此同时,在微分方程传统数值方法领域,通过构造弱解形式求解间断系数微分方程具有坚实的理论基础,并已实现多个领域的成功应用^[12]。其技术途径是设定特定的测试函数,将其与强解形式的微分方程各项相乘,然后在定义域内进行积分,进而通过间断有限元等特殊的处理方法进行数值求解。值得注意的是,在传统的弱解理论中,其变分过程是在定义域上通过固定上下限积分形式实现的,固定积分上下限通常定义在离散网格间的边界上。此后,通过网格边界点之间的数理关系获得方程的数值解^{[12][13]}。求解传统弱解形式方程得到的数值解是各离散网格的平均值,同一个网格内数值解是相同的。弱解理论允许解在间断处存在跳跃,支撑了间断有限元(DG)、扩展有限元(XFEM)等传统间断微分方程数值方法的成功应用^{[14][15][16]}。

然而,直接将传统弱解理论应用到深度学习方法却存在明显的技术瓶颈,其根本原因表现在:深度学习方法的特点是获得方程全域连续数值解,需要全域上机器学习数据样本及与之相关的控制方程损失函数,这种需求是传统固定限分部积分弱解形式所不能满足的。尽管文献[17]采用传统固定上下限积分方法,通过增加多种测试函数共同构成损失函数取得了一定的计算效果,但因其多个测试函数的引入,很大程度上增加了计算的复杂性。

为此,本文提出适用于深度学习方法的"变域积分"弱解理论(VIWS),针对通用的微分方程形式及典型方程示例,基于间断系数微分方程变限分部积分方法,构建全求解域样本损失函数的方程弱解形式,进而实现利用深度学习方法求解该弱解形式的积分方程。

1 微分方程变域积分弱解一般形式

下面以具有广泛代表性的二维二阶线性广义间断系数微分方程为对象,进行变域积分弱解一般形式详细推导,同时,采用变上限积分表述变域积分的具体形式,其他类型微分方程弱解与变下限形式可以据此类推。

1.1 间断系数微分方程变域积分弱解初始形式

广义的二维二阶线性微分方程定义为:

$$-\sum_{i,j}^{2} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(a_{ij} \left(\mathbf{x} \right) \frac{\partial u}{\partial x_{i}} \right) - \sum_{i}^{2} b_{i} \left(\mathbf{x} \right) \frac{\partial u}{\partial x_{i}} + c \left(\mathbf{x} \right) u = f , \text{ in } \Omega, \ u = g \text{ on } \Gamma_{D}$$
 (1)

其中设定义域 Ω \subset \mathbb{R}^2 ,边界 $\partial\Omega$ = Γ_D ,其系数条件:

$$a_{ij}, b_i, c \in L^{\infty}(\Omega)$$
,矩阵 $A = \lceil a_{ij} \rceil$ 一致正定, $f \in L^2(\Omega)$ 。

设函数的解与测试函数空间为:

$$\begin{cases}
U_g = \left\{ u \in H^1(\Omega) \mid u \mid_{\Gamma_D} = g \right\} \\
V = H_0^1(\Omega) = \left\{ v \in H^1(\Omega) \mid v \mid_{\Gamma_D} = 0 \right\}
\end{cases}$$
(2)

设定(1)式变域积分区域 Ω_x ,对任意的向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \Omega$,定义向量 $\mathbf{x}' = (x_1', x_2')$,有 $\Omega_x = \{(x_1', x_2') \in \Omega | x_1' \le x_1, x_2' \le x_2\}$,为了简化推导,假设 Ω_x 仅存在 Dirichlet 边界项,并将边界分解为:

$$\partial \Omega_{x} = \Gamma_{D}^{x} \cup \Gamma_{I}^{x}, \begin{cases} \Gamma_{D}^{x} = \partial \Omega_{x} \cap \Gamma_{D} \\ \Gamma_{I}^{x} = \partial \Omega_{x} \setminus \Gamma_{D} \end{cases}$$

$$(3)$$

其他形式的边界条件可据此类推。

对任意 $i, j \in \{1,2\}$, 定义

$$\Phi_{ij}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_x} -\frac{\partial}{\partial x_i'} \left(a_{ij}(\mathbf{x}') \frac{\partial u(\mathbf{x}')}{\partial x_i'} \right) v(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$
(4)

参考传统弱解形式理论 $^{[12]}$,将 $^{(1)}$ 乘以测试函数 $^{\nu}$ 后进行积分,引入 $^{(2)}$ 及 $^{(3)}$ 的形式得到变上限积分表示的方程弱解初始形式:

$$\begin{cases}
\sum_{i,j}^{2} \Phi_{ij}(\mathbf{x}) + \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \left(\sum_{i}^{2} -b_{i} \frac{\partial u(\mathbf{x}')}{\partial x_{i}'} + cu(\mathbf{x}') \right) v(\mathbf{x}') dx' = Q(\mathbf{x}) \\
Q(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}') v(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'
\end{cases}$$
(5)

如果二维向量x用(x,y)表示,且 $\Omega = \{(x,y) | a \le x \le b, c \le y \le d\}$,为矩形区域,则(4)式的具体形式为:

$$\Phi(x,y) = \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} - \left(\frac{\partial u(x',y')}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial x'} \left(a_{12} \frac{\partial u(x',y')}{\partial y'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(a_{12} \frac{\partial u(x',y')}{\partial y'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(a_{21} \frac{\partial u(x',y')}{\partial x'} \right) + \frac{\partial}{\partial y'} \left(a_{22} \frac{\partial u(x',y')}{\partial y'} \right) \right) v(x',y') dx' dy'$$

则(5)式可表示为:

$$\begin{cases}
\Phi(x,y) + \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} \left(-b_{1} \frac{\partial u(x',y')}{\partial x'} - b_{2} \frac{\partial u(x',y')}{\partial y'} + cu(x',y') \right) v(x',y') dx' dy' = Q(x,y) \\
Q(x,y) = \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} f(x',y') v(x',y') dx' dy'
\end{cases} \tag{6}$$

1.2 变域积分弱解形式分部积分过程

利用具有方向性散度的定理[18][19],对任意 $u,v \in H^1(\Omega)$,方程(4)进行分部积分得:

$$\Phi_{ij}\left(\boldsymbol{x}\right) = \underbrace{\int_{\Omega_{\boldsymbol{x}}} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{x'}_{j}} d\boldsymbol{x'}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}} n_{j}\right) v d\boldsymbol{\gamma}}_{\text{fw}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\boldsymbol{x}}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x'}_{i}$$

其中 n_i 为边界 $\partial\Omega_x$ 的单位外法向量,定义总边界泛函:

$$A(\mathbf{x}) = \sum_{i,j}^{2} \left(\int_{\Gamma_{D}^{x}} + \int_{\Gamma_{I}^{x}} \right) \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} n_{j} \right) v d\gamma$$
 (8)

其中外部 Dirichlet 边界项由(2)、(3)式, $v|_{\Gamma_0} \equiv 0$,有

$$\int_{\Gamma_D^x} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} n_j \right) v d\gamma \equiv 0$$
 (9)

而内部边界项:

$$\int_{\Gamma_{i}^{x}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} n_{j} \right) v d\gamma \neq 0$$
(10)

将(7)、(9)、(10)式带代入(6)式:

$$\int_{\Omega_{x}} \sum_{i,j}^{2} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} \frac{\partial v}{\partial x_{j}} d\mathbf{x}' + \int_{\Omega_{x}} \left(\sum_{i}^{2} -b_{i} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} v + cuv \right) d\mathbf{x}' + \int_{\Gamma_{i}^{x}} \sum_{i,j}^{2} -a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} n_{j} v d\gamma = Q(\mathbf{x})$$
(11)

由此得到用变域积分表示的间断系数微分方程通用弱解形式框架,其左边项的具体形式可根据未知函数u的维度、边界条件 Ω_x 的不同形式进行确定。同时,方程的右边Q(x)为已知函数的积分,可以用解析形式或者数值积分方法计算得到。

需要说明的是,对于(11)式的 $\int_{\Omega_x} \left(\sum_{i}^2 -b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} v + cuv \right) dx$ '中包含的 $\int_{\Omega_x} -b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} v dx$ '项,也可进行分部积分,有:

$$B_{i}(\mathbf{x}) = \underbrace{\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} b_{i} u \frac{\partial v}{\partial x'_{i}} d\mathbf{x}' + \underbrace{\int_{\Gamma_{D}^{\mathbf{x}}} \left(-b_{i} u n_{j}\right) v d\mathbf{y}}_{\text{N#dyR}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{I}^{\mathbf{x}}} \left(-b_{i} u n_{j}\right) v d\mathbf{y}}_{\text{N#dyR}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{I}^{\mathbf{x}}} \left(-b_{i} u n_{j}\right) v d\mathbf{y}}_{\text{N#dyR}}$$

同理,有: $\int_{\Gamma_{0}^{x}} \left(-b_{i}un_{j}\right)vd\gamma \equiv 0$,带入(11)式得到:

$$\int_{\Omega_{x}} \sum_{i,j}^{2} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} \frac{\partial v}{\partial x_{j}} dx' + \int_{\Omega_{x}} \left(\sum_{i}^{2} b_{i} u \frac{\partial v}{\partial x_{i}} + c u v \right) dx' + \sum_{i,j}^{2} \int_{\Gamma_{i}^{x}} \left(-a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_{i}} n_{j} \right) v d\gamma + \int_{\Gamma_{i}^{x}} \left(-b_{i} u n_{j} \right) v d\gamma = Q(x)$$
(13)

(13)式为方程变域积分弱解的完全形式,实际计算中,不一定总是使用(13)式进行求解,可根据方程及间断系数的具体情况选择(11)或者(13)式进行后续求解。由于(11)式中 $a_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_i'}\frac{\partial v}{\partial x_j'}$ 与 $b_i\frac{\partial u}{\partial x_i'}v$ 中未知函数的u的微分阶数一致,考虑简化原则,后续针对(11)式进行讨论。

1.3 变域积分弱解形式分部积分示例

作为示例,我们给出方程(11)的三种具体形式,其他微分方程的具体形式可据此类推。

1.3.1 一维一阶微分方程弱解形式

设一维一阶微分方程的形式为:

$$\begin{cases}
-\frac{d}{dx}(au(x)) + bu(x) = f(x), & x \in (a,b) \\
u(a) = c
\end{cases}$$
(14)

选取适当的测试函数 v(x) , v(x) 在边界上取 0,即 v(a)=v(b)=0 。将控制方程乘以测试函数 v(x) 并在 $[a,x]\in\Omega_x$ 上做变上限积分,得到如下形式:

$$-\int_{a}^{x} \frac{d}{dx'} \left(a(x')u(x') \right) v(x') dx' + \int_{a}^{x} bu(x') dx' = \int_{a}^{x} f(x')v(x') dx'$$
 (15)

对方程左边第一项进行分部积分得

$$-\int_{a}^{x} \frac{d}{dx'} \left(a(x')u(x') \right) v(x') dx' = \int_{a}^{x} a(x')u(x') \frac{dv(x')}{dx'} dx' - a(x')u(x')v(x') \Big|_{a}^{x}$$
 (16)

由于在边界a上,v(a)=0,从而得到:

$$-\int_{a}^{x} \frac{d}{dx'} \left(a(x')u(x')\right)v(x')dx' = \int_{a}^{x} a(x')u(x')\frac{dv(x')}{dx'}dx' - a(x)u(x)v(x)$$

带入方程(15)有:

$$\int_{a}^{x} a(x')u(x')\frac{dv(x')}{dx'}dx' - a(x)u(x)v(x)$$

$$+\int_{a}^{x} bu(x')v(x')dx' = \int_{a}^{x} f(x')v(x')dx'$$
(17)

该式即为一维一阶微分方程的变域积分弱解形式。

1.3.2 二维二阶微分方程弱解形式

扩散方程在反应堆中子物理、热传递等领域广泛存在,其在矩形区域上二维二阶形式如下:

$$\begin{cases}
-\nabla \cdot (\kappa(x,y)\nabla u(x,y)) = F(x,y), (x,y) \in \Omega = (a,b) \times (c,d) \\
u(x,y) = c, (x,y) \in \partial\Omega
\end{cases}$$
(18)

变上限积分域定义为: 对任意 $x \in (a,b)$, $y \in (c,d)$, 其变上限子域 $\Omega_x = (a,x) \times (c,y)$ 。积分变量为 (x',y'),积分上限为参数 x,y。将方程 (18) 乘以测试函数 v(x',y'),且有 v(a,y) = v(b,y) = 0, v(x,c) = v(x,d) = 0,在 Ω_x 上的变域积分有:

$$-\int_{c}^{y} \int_{a}^{x} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) v \, dx' dy' = \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} F v \, dx' dy' \tag{19}$$

对左侧分部积分有:

$$-\int_{c}^{y} \int_{a}^{x} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) v \, dx' dy' = \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} \kappa \nabla u \cdot \nabla v \, dx' dy' - \int_{\partial \Omega} \kappa (\nabla u \cdot \boldsymbol{n}) v \, ds \tag{20}$$

其中矩形边界外法向曲线积分项为:

$$\int_{\partial\Omega} \kappa (\nabla u \cdot \boldsymbol{n}) v ds = \int_{c}^{y} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v \Big|_{x'=x} dy' + \int_{c}^{y} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} (-v) \Big|_{x'=a} dy' + \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \Big|_{y'=y} dx' + \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} (-v) \Big|_{y'=c} dx'$$

$$+ \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \Big|_{y'=y} dx' + \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} (-v) \Big|_{y'=c} dx'$$

$$+ \underbrace{\int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \Big|_{y'=y}}_{\text{EddR}} dx' + \underbrace{\int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} (-v) \Big|_{y'=c}}_{\text{EddR}} dx'$$

由于方程完整定义域 $(x,y) \in \Omega = (a,b) \times (c,d)$, 其变上限子域边界也为矩形边界,且左边界、下边界与外边界重合,按照前述定义,v(x',y')在左边界与下边界上均为 0。由此可得:

$$\underbrace{\int_{c}^{y} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} \left(-v\right)\Big|_{x'=a} dy'}_{\text{左边界}} = 0, \quad \underbrace{\int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} \left(-v\right)\Big|_{y'=c}}_{\text{下边界}} dx' = 0, \quad \text{因此化简得:}$$

$$\int_{\partial\Omega} \kappa \left(\nabla u \cdot \boldsymbol{n}\right) v \, ds = \int_{c}^{y} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v\Big|_{x=x} dy' + \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v\Big|_{y=y} dx'. \tag{22}$$

代入原方程(19)、(20),得到方程的弱解形式:

$$\int_{c}^{y} \int_{a}^{x} \kappa \nabla u \cdot \nabla v \, dx' dy' - \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \big|_{y'=y} \, dx' - \int_{c}^{y} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v \big|_{x'=x} \, dy' = \int_{c}^{y} \int_{a}^{x} F v \, dx' dy'$$
 (23)

1.3.3 部分维度间断系数扩散方程变域积分弱解形式

在实际应用中,经常出现微分方程系数在部分维度出现间断,而在其他维度上是连续的场景。此时,可以仅针对系数间断方向的维度进行分部积分,不必在所有维度进行变上限积分,从而简化微分方程的弱解形式,提升求解精度与效率,以下针对上节二维二阶扩散方程进行推导。

设方程(18)的系数 $\kappa(x,y)$ 仅在 x 方向是间断的,在 y 方向为高阶连续的。变限分部积分过程可仅在 x 方向上进行,(19)式变为:

$$-\int_{a}^{x} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) v \, dx' = \int_{a}^{x} F v \, dx' \tag{24}$$

方程左侧可展开为:

$$-\int_{a}^{x} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) v \, dx' = -\int_{a}^{x} \frac{\partial}{\partial x'} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x'} \right) v \, dx' - \int_{a}^{x} \frac{\partial}{\partial y'} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial y'} \right) v \, dx' \tag{25}$$

结合在边界上v(a)=0,对(25)右侧第一项进行分部积分可得:

$$-\int_{a}^{x} \nabla \cdot (\kappa \nabla u) v \, dx' = \int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} \frac{\partial v}{\partial x'} \, dx' - k \frac{\partial u}{\partial x} v - \int_{a}^{x} \frac{\partial}{\partial y'} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial y'} \right) v \, dx' \tag{26}$$

将(26)式代入(24)式有:

$$\int_{a}^{x} \kappa \frac{\partial u}{\partial x'} \frac{\partial v}{\partial x'} dx' - k \frac{\partial u}{\partial x} v - \int_{a}^{x} \frac{\partial}{\partial y'} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial y'} \right) v dx' = \int_{a}^{x} F v dx'$$
(27)

相对于(23)式,式(27)得到了简化。

需要特别说明的是,基于具有方向性散度的定理[18][19],本章提出的变域积分过程(7)式具有良好的普适性,其变分过程不仅适合(18)式所述的矩形边界区域,也可推广到由复杂几何构成的非张量积型求解域。

2 变域积分方程弱解的深度学习方法

如方程(11)(13)(17)(23)(27)描述,间断系数微分方程的弱解形式是典型的 Volterra 形积分方程^[20],目前已有多种深度学习方法进行 Volterra 积分方程的求解。总体思路是利用深度神经网络函数作为试函数,带入控制方程及边界条件构造相应的损失函数,通过各种机器学习方法不断迭代减小损失函数值,当损失函数趋于极小值,此时深度神经网络的输出就是方程的数值解。根据构造控制方程损失函数过程中对积分项的处理方式不同,现有深度学习方法主要包括以下两种技术路线。

2.1 采用数值积分方法进行积分项处理

在这种方法中,控制方程积分项的神经网络损失函数构造,采用数值积分方法将积分项转换为有限项和的方式^{[21][22][23]}。即:

$$\int_{A}^{X} K(T) dT = \sum_{j}^{N} w_{j} K(x_{j})$$
(28)

(28)式中, x_j 称为积分坐标点, w_j 是积分系数。不同的数值积分公式,其积分系数是不同的,其选取的方法会直接影响积分的精度与收敛性,常用的方法有梯形公式[20][24]、Gauss 求积公式[20][25]等。已有研究表明这种方式是可行的,其形式简单,编程实现方便,且对本文所述的弱解测试函数连续性没有特殊要求,但其精度受到一定影响,同时积分项的处理会消耗较大计算资源,计算时间较长[21][26]。造成这种情况的重要原因是通过积分项有限和代替积分项的方法带来了一定的系统误差,且由于相同积分值的被积函数缺乏唯一性,使得深度学习的收敛过程比较困难,适合形式相对简单的积分方程求解。

2.2 采用积分方程变阶形式进行积分项处理

另外一种深度学习方法技术路线是将积分方程转换为完全的微分方程组求解,其主要技术途径是利用牛顿莱布尼兹定理构造被积函数的原函数,从而将积分方程转换为完全的微分形式进行求解 $^{[27][28]}$ 。例如,针对式(28)的被积函数 K(T),设其在求解域上关于T是连续的,可以设定原函数 F(X)及其确定解条件的定义如下 $^{[28]}$:

$$\begin{cases}
F(X) = \int_{A}^{X} K(T)dT, & F(A) = 0 \\
\frac{dF(X)}{dX} = K(X)
\end{cases}$$
(29)

同理,可对(11)式中 $a_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_i}$, $\frac{\partial v}{\partial x_j}$, $b_i\frac{\partial u}{\partial x_i}v$ 、 $a_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_i}n_jv$ 等积分核函数进行相同的变换。

采用这种方法,可以有效减小因为积分项带来的计算复杂性,在一定程度上提高积分方程的求解精度与效率。但与此同时,这种方法对被积函数的连续性有明确性要求。据此,对于方程(11)式弱解形式进行求解,鉴于系数 a_{ii} , b_{i} ,c 可能是间断的,需要构造特别测试函数 v ,保持被积函数

$$a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_j}$$
, $b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} v$, cuv , $a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_i} n_j v$ 在间断处的连续性。

3 数值实验结果

本节利用上述变域积分弱解理论进行一维和二维的间断系数微分方程实例的求解,其中积分项处理采用 2.2 节中所述的变阶形式,并将其结果与使用传统 PINN^[7]方法以及守恒型物理信息神经网络cPINN(Conservative physics-informed neural networks)^[29]方法获得的结果进行比较。其中,传统 PINN方法将物理定律嵌入到神经网络的训练过程中,通过构建同一个神经网络,同时利用微分方程的残差作为损失函数的一部分,从而保证该网络的输出满足微分方程。而 cPINN 则针对间断系数微分方程,将方程从定义域上切分,并利用各个子域交界处所满足的特定条件,利用多个网络来分别拟合不同子域上的微分方程。本文提出的基于 VIWS 理论的方法和 PINN 方法使用单个神经网络表征全域数值解,而 cPINN 采用多个神经网络分别表示不同间断区域的数值解。

3.1 一维一阶微分方程验证

问题描述:对应 1.3.1 节的推导,考虑定义在区间 [-1,1]上的一阶微分方程:

$$\begin{cases} a(x)\frac{du}{dx} + b(x)u(x) = c(x), & x \in [-1,1], \\ u(1) = \frac{1}{3}. \end{cases}$$
 (30)

其中系数在界面x=0处间断:

$$a(x) = \begin{cases} 1, & -1 \le x \le 0, \\ 2, & 0 < x \le 1. \end{cases} b(x) = \begin{cases} -1, & -1 \le x \le 0, \\ 3, & 0 < x \le 1. \end{cases} c(x) = \begin{cases} x, & -1 \le x \le 0, \\ 1, & 0 < x \le 1. \end{cases}$$
(31)

解析解为分段函数:

$$u(x) = \begin{cases} \frac{4}{3}e^{x} - x - 1, & -1 \le x \le 0, \\ \frac{1}{3}, & 0 < x \le 1. \end{cases}$$
 (32)

参数设置:测试函数设为: $v=x^2(x+1)(x-1)$ 。此外,构建三个全连接神经网络 $\mathcal{N}_u(x;\theta_u)$ 和 $\mathcal{N}_{F_1}(x;\theta_{F_1})$, $\mathcal{N}_{F_2}(x;\theta_{F_2})$,各包含 5 个隐藏层,每层 20 个神经元,分别表征解 u(x)和原函数 $F_1(x)$, $F_2(x)$,这两个原函数分别对应(17)式左侧第一项和第三项的原函数,其确定解的约束条件 及损失函数的构造参考文献[26][28]。在区域内均匀采样 2000 个训练点,使用 Adam 优化器,初始学 习率设为 1×10^{-3} ,并随训练过程逐渐衰减,激活函数为 Tanh。网络的初始参数使用高斯分布初始 化,深度学习过程在损失函数值不再明显下降时停止。对比算例中,cPINN、PINN 与 VIWS 均采用 类似的全连接神经网络,除了 cPINN 在间断处有额外的采样点外,三者的采样点基本保持一致。

数值结果: 表 1 量化对比了三种方法的均方误差 MSE(Mean Squared Error)、最大绝对误差 MaxAE(Maximum Absolute Error)和平均绝对误差 MAE (Mean Absolute Error)。图 1 (a-c)展示了使用 VIWS 理论以及 cPINN 和 PINN 方法的数值解与解析解的对比。图 1 (d)为采用 VIWS 理论对应的原函数数值计算结果示意图,图 1 (e)为基于 VIWS 理论的机器学习损失函数训练曲线。结果表明,采用 VIWS 理论的精度相较传统 PINN 方法在均方误差指标上提升一个数量级,且仅使用单个网络就可以表征全域的数值解,并获得了与 cPINN 精度相当的计算结果。同时,从图 1 (a-c)中绝对误差的分布情况可以看出,由于 VIWS 和 PINN 均采用一个神经网络,其误差分布情况类似,最大值均在交界点处,而 cPINN 在交界处采用了额外的处理方法,其误差分布比较均匀。

表 1 一维一阶微分方程的数值求解结果 Table 1. Numerical solution results for one-dimensional first-order differential equations

方法	VIWS	cPINN	PINN
MSE 9	.8704E-11	9.2024E-11	4.0252E-10
MaxAE 2	.0981E-05	1.8259E-05	4.3392E-05
MAE 7	.0161E-06	8.3534E-06	1.3734E-05

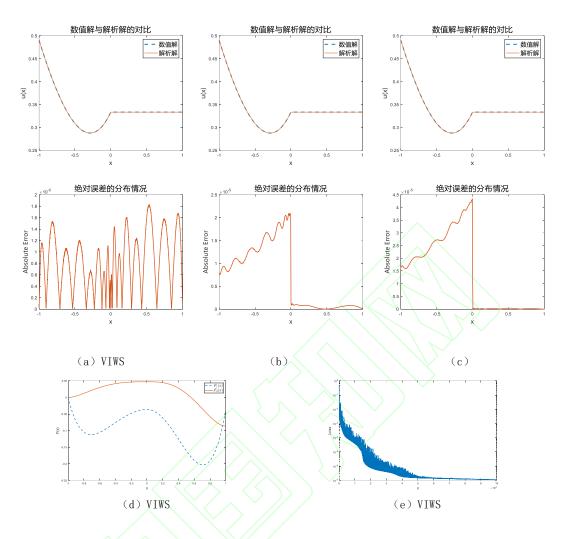


图 1 一维一阶微分方程的 (a) VIWS、 (b) cPINN 和 (c) PINN 方法的数值解与解析解对比及绝对误差分布; (d) VIWS 方法原函数示 意图; (e) VIWS 方法训练曲线

Fig.1 Comparison of numerical and analytical solutions and absolute error distributions for (a) VIWS, (b) cPINN, and (c) PINN methods applied to one-dimensional first-order differential equations; (d) Primitive function of the VIWS method; (e) Training curve of the VIWS method.

3.2 二维二阶微分方程验证

问题描述: 在反应堆中子扩散与热传导等实际应用中,一种材料被另一种材料完全包围是常见的,如控制棒被包壳和慢化剂围绕。对应 1.3.2 节的推导,本节的将验证基于 VIWS 理论的方法求解二维二阶外方内圆几何条件下的扩散方程,问题如下:

$$-\nabla \cdot \left(\kappa(x,y)\nabla u\right) = Q(x,y), (x,y) \in \Omega = \left(-2,2\right)^2 \tag{33}$$

边界条件满足非对称 Dirichlet 约束:

$$\begin{cases} u(x, \pm 2) = \sin\left(\frac{\pi}{4}(x^2 + 2)\right), x \in [-2, 2], \\ u(\pm 2, y) = \sin\left(\frac{\pi}{4}(y^2 + 2)\right), y \in [-2, 2]. \end{cases}$$
(34)

其外方内圆的材料边界由区域 $\Gamma = \{(x,y) | x^2 + y^2 = 2\}$ 设定:

$$\kappa(x,y) = \begin{cases} 1, & x^2 + y^2 < 2\\ 4, & x^2 + y^2 \ge 2 \end{cases}$$
 (35)

源项:

$$Q(x,y) = \begin{cases} -4\pi\cos\left(\pi\left(x^{2} + y^{2} - 2\right)\right) + 4\pi^{2}\left(x^{2} + y^{2}\right)\sin\left(\pi\left(x^{2} + y^{2} - 2\right)\right), & x^{2} + y^{2} < 2\\ -4\pi\cos\left(\frac{\pi}{4}\left(x^{2} + y^{2} - 2\right)\right) + \pi^{2}\left(x^{2} + y^{2}\right)\sin\left(\frac{\pi}{4}\left(x^{2} + y^{2} - 2\right)\right), & x^{2} + y^{2} \ge 2 \end{cases}$$
(36)

该问题的解析解为:

$$u(x,y) = \begin{cases} \sin(\pi(x^2 + y^2 - 2)), & x^2 + y^2 < 2\\ \sin(\frac{\pi}{4}(x^2 + y^2 - 2)), & x^2 + y^2 \ge 2 \end{cases}$$
(37)

参数设置:测试函数设为: v(x,y)=(x+2)(y+2),构建四个全连接神经网络 $\mathcal{N}_u(x,y;\theta_u)$ 和 $\mathcal{N}_{F_1}(x,y;\theta_{F_1})$, $\mathcal{N}_{F_2}(x,y;\theta_{F_2})$, $\mathcal{N}_{F_3}(x,y;\theta_{F_3})$,各包含 8 个隐藏层,每层 32 个神经元,分别表征解 u(x,y)、 $\kappa \nabla u \cdot \nabla v$ 的原函数 $F_1(x,y)$ 、 $\kappa \frac{\partial u}{\partial y^!} v|_{y=y}$ 的原函数 $F_2(x,y)$ 和 $\kappa \frac{\partial u}{\partial x^!} v|_{x=x}$ 的原函数 $F_3(x,y)$ 。在区域内均匀采样 10000 个训练点,其他参数均与 3.1 节相同。

数值结果:二维二阶微分方程数值求解结果的误差值如表 2 所示,三种方法数值解与解析解之间的对比如图 2 (a-c) 所示,图 2 (d-f) 为基于 VIWS 理论方法的原函数数值结果示意图,图 2 (g) 为基于 VIWS 理论的机器学习损失函数训练曲线。结果表明,对于复杂边界问题,PINN 方法无法得出有效解,而基于 VIWS 理论得出的计算结果精度与 cPINN 方法相当。

表 2 二维二阶微分方程的数值求解结果

Table 2. Numerical solution results for two-dimensional second-order differential equations

方法	VIWS	cPINN	PINN
MSE	5.8501E-05	4.7663E-05	7.3608E+00
MaxAE	5.4672E-02	5.0137E-02	3.9613E+00
MAE	4.1169E-03	4.4718E-03	2.3407E+00

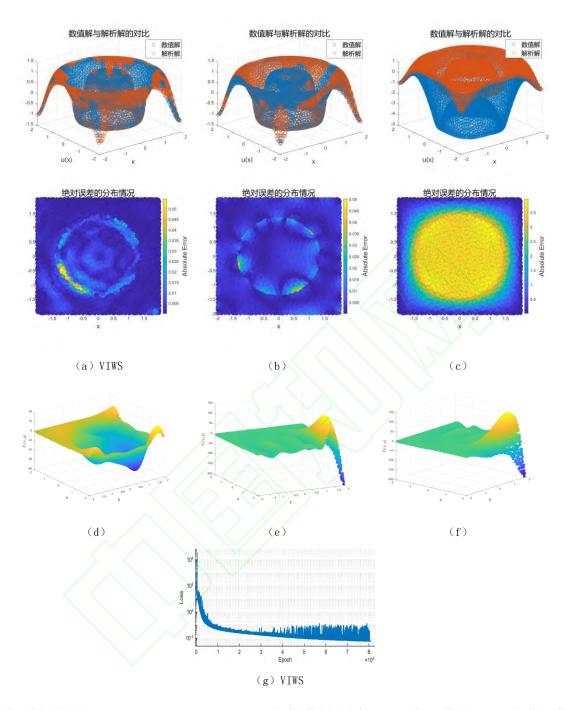


图 2 二维二阶微分方程的 (a) VIWS、 (b) cPINN 和 (c) PINN 方法的数值解与解析解对比及绝对误差分布; VIWS 方法原函数示意图 (d) $\kappa \nabla u \cdot \nabla v$; (e) $\kappa \frac{\partial u}{\partial v'} v \big|_{v'=y}$; (f) $\kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v \big|_{x'=x}$; (g) VIWS 方法训练曲线

Fig.2 Comparison of numerical and analytical solutions and absolute error distributions for (a) VIWS, (b)cPINN, (c)PINN methods applied to two-dimensional second-order differential equations; Primitive functions using VIWS method: (d) $\mathbf{K}\nabla u \cdot \nabla v$; (e) $\mathbf{K}\frac{\partial u}{\partial y'}v\big|_{y'=y}$; (f) $\mathbf{K}\frac{\partial u}{\partial x'}v\big|_{x'=x}$; (g) Training curve of the VIWS method. VIWS

3.3 部分维度间断系数扩散方程验证

问题描述:对应 1.3.3 节的推导,考虑定义在二维区间 $\Omega = [0,1]^2$ 内双材料扩散问题:

$$\begin{cases}
-\nabla \cdot (\kappa(x,y)\nabla u) = Q(x,y), & (x,y) \in [0,1]^2, \\
u|_{\partial\Omega} = 0.
\end{cases}$$
(38)

其中系数在界面 $x = \frac{2}{3}$ 处间断:

扩散系数:

$$k(x,y) = \begin{cases} 4, & 0 \le x \le \frac{2}{3}, 0 \le y \le 1\\ 1, & \frac{2}{3} < x \le 1, 0 \le y \le 1. \end{cases}$$
 (39)

源项:

$$Q(x,y) = \begin{cases} 20\pi^2 \sin(\pi x)\sin(2\pi y), & 0 \le x \le \frac{2}{3}, 0 \le y \le 1, \\ 20\pi^2 \sin(4\pi x)\sin(2\pi y), & \frac{2}{3} < x \le 1, 0 \le y \le 1. \end{cases}$$
(40)

解析解为分段线性函数:

$$u(x, y) = \begin{cases} \sin(\pi x)\sin(2\pi y), & 0 \le x \le \frac{2}{3}, 0 \le y \le 1, \\ \sin(4\pi x)\sin(2\pi y), & \frac{2}{3} < x \le 1, 0 \le y \le 1. \end{cases}$$
(41)

参数设置:测试函数设为: v(x,y)=xy, 其他参数同 3.2 节。

数值结果:表 3 量化对比了三种方法的数值求解精度,各数值解与解析解的对比如图 3 (a-c) 所示,图 3 (d-f) 为基于 VIWS 理论方法的原函数数值结果示意图,图 3 (g) 为基于 VIWS 理论的机器学习损失函数训练曲线。结果表明,PINN 在处理该类问题时精度较低,而基于 VIWS 理论得出的计算结果精度与 cPINN 方法相当。

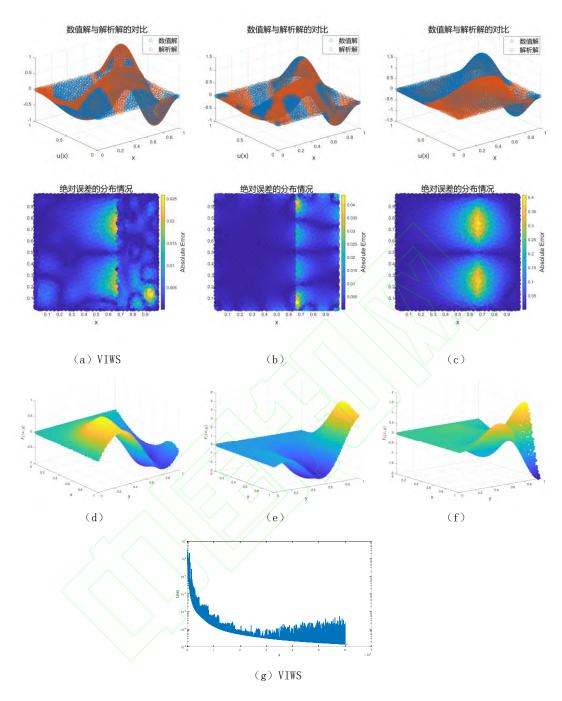


图 3 部分维度间断系数扩散方程的(a)VIWS、(b)cPINN 和(c)PINN 方法的数值解与解析解对比及绝对误差分布,VIWS 方法原函数 示意图(d) $\kappa \nabla u \cdot \nabla v$;(e) $\kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \big|_{y'=y}$;(f) $\kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v \big|_{x'=x}$;(g)VIWS 方法训练曲线

Fig.3 Comparison of numerical and analytical solutions and absolute error distributions for (a)VIWS, (b)cPINN, (c)PINN methods applied to diffusion equations with partially dimension-discontinuous coefficients; Primitive functions using VIWS method: (d) $\kappa \nabla u \cdot \nabla v$; (e)

$$\kappa \frac{\partial u}{\partial y'} v \big|_{y'=y}$$
; (f) $\kappa \frac{\partial u}{\partial x'} v \big|_{x'=x}$; (g) Training curve of the VIWS method. VIWS

表 3 部分维度间断系数扩散方程的数值求解结果

Table 3. Numerical solution results for diffusion equations with partially dimension-discontinuous coefficients

方法	VIWS	cPINN	PINN
MSE	3.0411E-05	3.0826E-05	1.1796E-02
MaxAE	2.5797E-02	4.3661E-02	4.0830E-01
MAE	3.6166E-03	3.1704E-03	6.8369E-02

3.4 固定源中子扩散方程验证

为验证论文提出的 VIWS 方法的扩展性,我们考虑定义在区间[-1,1]上的一维固定源中子扩散方程方程:

$$-\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d\phi}{dx}\right) + \Sigma_a(x)\phi(x) = Q(x), x \in (-1,1)$$
(42)

其中系数及源项在界面x=0处间断:

$$D(x) = \begin{cases} 4, & -1 \le x \le 0 \\ 1, & 0 < x \le 1 \end{cases},$$

$$\Sigma_{a}(x) = \begin{cases} 0.1, & -1 \le x \le 0 \\ 0.05, & 0 < x \le 1 \end{cases},$$

$$Q(x) = \begin{cases} 1, & -1 \le x \le 0 \\ 0, & 0 < x \le 1 \end{cases}.$$

$$(43)$$

此问题的参考解为:

$$\phi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa_1 x} + B_1 e^{-\kappa_1 x} + C_1, & -1 \le x \le 0 \\ A_2 e^{\kappa_2 x} + B_2 e^{-\kappa_2 x} + C_2, & 0 < x \le 1 \end{cases}$$
(44)

其中,

$$A_{1} = -5.269940640189298, \quad B_{1} = -3.841225025384746, \quad C_{1} = 10,$$

$$A_{2} = -1.576091832017836, \quad B_{2} = 2.464926166443790, \quad C_{2} = 0,$$

$$\kappa_{1} = 0.158113883008419, \quad \kappa_{2} = 0.223606797749979.$$
(45)

测试函数设为: $v = \ln(x^2 + 2)$ 。此外,构建三个全连接神经网络 $\mathcal{N}_{\phi}(x;\theta_{\phi})$ 和 $\mathcal{N}_{F_1}(x;\theta_{F_1})$, $\mathcal{N}_{F_2}(x;\theta_{F_2})$,各包含 4 个隐藏层,每层 64 个神经元,分别表征解 u(x) 和原函数 $F_1(x)$, $F_2(x)$, 两个原函数分别定义为 $F_1(x) = \int_{-1}^x D(x') \frac{d\phi}{dx'} \frac{dv}{dx'} dx'$, $F_2(x) = \int_{-1}^x \Sigma_a(x')\phi(x')v(x')dx'$,其确定解的约束条件参考文献[27][28]。在区域内均匀采样 1000 个训练点,使用 Adam 优化器运行 1000 次迭代,然后切换到 L-BFGS 优化器直到收敛,其余训练策略与 3.1 节保持一致。

表 4 量化展示 VIWS 方法的均方误差、最大绝对误差和平均绝对误差,图 4 (a)、(b)展示了使用 VIWS 得到的数值解与解析解的对比,图 4 (c)为采用 VIWS 理论对应的原函数数值计算结果示意图,图 4 (d)展示了基于 VIWS 理论的固定源中子扩散方程训练曲线,在红色虚线处从Adam 优化器切换为 L-BGFGS 优化器。这验证了本文所提的 VIWS 理论可以应用到反应堆物理中子扩散方程等实际问题的求解中,具有良好的扩展性。

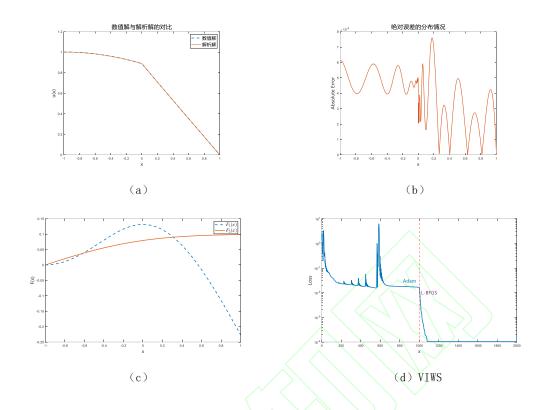


图 4 固定源中子扩散方程的 VIWS 数值计算结果: (a) 数值解与解析解对比; (b) 绝对误差分布; (c) 原函数 (d) 训练曲线 Fig.4 Numerical results of VIWS method for fixed-source neutron diffusion equation: (a) Comparison between numerical and analytical solutions; (b) Absolute error distribution; (c) Primitive function; (d) Training curve.

表 4 固定源中子扩散方程的误差

Table 4. Errors for fixed-source neutron diffusion equation

	MSE	MaxAE	MAE
VIWS	1.8007E-07	7.6014E-04	3.9132E-04

由以上数值算例可知,VIWS 理论可以基于同一个神经网络在全域上进行间断微分方程的求解,相比于传统的 PINN 方法,其计算精度提升明显。同时,与以不同神经网络分别表示多区域数值解的 cPINN 方法相比,其消耗的计算资源较少,当间断系数微分方程界面形状复杂,分区数量较多时,基于 VIWS 理论的方法具有潜在的优势。

4 结论

本文针对深度学习计算方法求解间断系数微分方程这一新的技术领域,提出了适合深度学习方法的间断系数微分方程变域积分弱解理论。该理论针对深度学习计算方法需要全域空间样本的特点,不同于传统弱解理论构造固定限积分的方法,采用动态变换积分区域变分,构建了方程变域积分弱解形式,在全定义域深度学习样本点集合上构造机器学习损失函数,充分刻画了连续空间上各间断系数区域的物理方程信息;给出了二维二阶间断系数微分方程通用形式的推导方法,以及一维一阶、二维二阶及部分维度间断系数微分方程和固定源中子扩散方程变域积分弱解形式的详细示例。在此基础上,阐述了基于有限积分和与变阶迭代理论求解变域积分弱形式方程的深度学习方法。多个典型算例表明,本文提出的理论具有良好的精度与扩展性,从而为间断系数微分方程数值求解方法探索出了新的技术途径。

未来的研究可关注实际工程问题,将变域积分弱解理论应用在各种高维及复杂内外边界条件间断 微分方程的求解,考察改变测试函数类型及多种测试函数组合条件下对计算精度与效率的影响,以及 采用新一代的神经网络结构及大规模并行计算机器学习框架,持续优化神经网络及机器学习的各种超

参数,进一步提升深度学习方法求解间断微分方程的精度与效率。

参考文献

[1] Gabbard J, Gillis T, Chatelain P, et al. An immersed interface method for the 2D vorticity-velocity Navier-Stokes equations with multiple bodies[J]. Journal of Computational Physics, 2022, 464: 111339.

- [2] 张欣, 赵国忠, 李宏. 局部间断 Petrov-Galerkin 方法在大气污染模型中的应用[J]. 计算物理, 2021, 38(2): 171-182.
- [3] 习心悦, 郭孝城, 王赤. 一种适用于磁流体力学切向间断的 HLLC 黎曼算子[J]. 计算物理, 2022, 39(3): 286-296.
- [4] Wang H, Zhang Q, Wang S, et al. Local discontinuous Galerkin methods with explicit-implicit-null time discretizations for solving nonlinear diffusion problems[J]. Science China Mathematics, 2020, 63: 183-204.
- [5] Peng H ,Zhai Q ,Zhang R , et al.A weak Galerkin-mixed finite element method for the Stokes-Darcy problem[J]. Science China(Mathematics),2021,64(10):2357-2380.
- [6] Zeng W ,Xu C .An accurate and efficient space-time Galerkin spectral method for the subdiffusion equation[J]. Science China(Mathematics),2024,67(10):2387-2408.
- [7] 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.
- [8] Cuomo S, Di Cola V S, Giampaolo F, et al. Scientific machine learning through physics—informed neural networks: Where we are and what's next[J]. Journal of Scientific Computing, 2022, 92(3): 88.
- [9] Yao Y, Guo J, Gu T. A deep learning method for multi-material diffusion problems based on physics-informed neural networks[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2023, 417: 116395.
- [10] Xie Y, Chi H, Wang Y, et al. Physics-specialized neural network with hard constraints for solving multi-material diffusion problems[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2024, 430: 117223.
- [11] Liu L, Liu S, Xie H, et al. Discontinuity computing using physics-informed neural networks[J]. Journal of Scientific Computing, 2024, 98(1): 22.1-22.38.
- [12] 陆金甫, 关治. 偏微分方程数值解法[M]. 3 版. 北京: 清华大学出版社, 2016: 155-181.
- [13] 卢培培,石钟慈,许学军. 自适应间断 Galerkin 有限元的多水平方法[J]. 中国科学:数学,2012,42(05):409-428.
- [14] Shayegan S H A ,Tajvar B R ,Ghanbari A , et al.Inverse source problem in a space fractional diffusion equation from the final overdetermination[J].Applications of Mathematics,2019,64(4):469-484.
- [15] 张荣培, 蔚喜军, 李明军. 扭曲网格上带有非光滑系数扩散方程的加权 DG 方法[J]. 中国科学: 数学, 2022, 52 (07): 809-822.
- [16] Wang T, Chen Y. Nitsche-XFEM for a time fractional diffusion interface problem[J]. Science China Mathematics, 2024, 67(3): 665-682.
- [17] Kharazmi E, Zhang Z, Karniadakis G E. hp-VPINNs: Variational physics-informed neural networks with domain decomposition[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021, 374: 113547.
- [18] Pfeffer W F. The Gauss-Green theorem[J]. Advances in Mathematics, 1991, 87(1): 93-147.
- [19] EVANS L C. Partial differential equations [M]. 2nd ed. Providence: American Mathematical Society, 2010:667-668
- [20] 李星. 积分方程[M]. 北京: 科学出版社, 2008: 3-105.
- [21] Guan Y, Fang T, Zhang D, et al. Solving Fredholm integral equations using deep learning[J]. International Journal of Applied and Computational Mathematics, 2022, 8(2): 87.
- [22] Guo R, Shan T, Song X, et al. Physics embedded deep neural network for solving volume integral equation: 2-D case[J]. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 2021, 70(8): 6135-6147.
- [23] Sun J, Liu Y, Wang Y, et al. BINN: A deep learning approach for computational mechanics problems based on boundary integral equations[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2023, 410: 116012.
- [24] Yeh S T. Using trapezoidal rule for the area under a curve calculation-SAS advanced tutorial [C]. Proceedings of the 27th Annual Conference of SAS User Group International. 2002: 14-17.
- [25] Golub G H, Welsch J H. Calculation of Gauss quadrature rules[J]. Mathematics of computation, 1969, 23(106): 221-230.
- [26] Liu D, Liu Y, Dang H, et al. The neutron transport equation in exact differential form[J]. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2025, 68(7): 270511.
- [27] 刘东,陈奇隆,王雪强.线性积分方程原函数变换深度学习求解方法[J]. 计算物理, 2024, 41 (05): 651-662.
- [28] 刘东,陈奇隆,庞志鑫,等. 多维连续积分方程累次原函数变换交替迭代深度学习求解算法[J/OL]. 中国科学: 数学, 1-20[2025-07-05]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/11. 5836. O1. 20240808. 1344. 003. html.
- [29] 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.