

物理信息神经网络驱动下考虑相界厚度变化的 Allen-Cahn 方程高效求解



李欣雨, 王梦涵, 司雨欣, 朱作权*

郑州师范学院数学与统计学院, 河南郑州 450044

摘要: 本研究聚焦于物理信息神经网络 (PINN) 求解不同相界厚度变化的 Allen-Cahn (AC) 方程。传统数值方法在处理复杂相边界条件时, 其计算效率与精确度常随问题复杂度而下降; PINN 为解决此类问题提供了新途径。本研究首先详细推导了 AC 方程, 进而构建了基于 PINN 的求解模型, 包括设计特定的神经网络架构、构建由偏微分方程残差项、边界条件残差项和初始条件残差项所组成的损失函数, 并进行模型训练。计算结果表明, 所建立的 PINN 模型能有效求解不同相界厚度变化的 AC 方程, 准确揭示序参数在不同相界厚度下的分布规律, 且能通过改变迭代次数适应相界厚度变化带来的挑战, 实现稳定高效的数值求解。此外, 将 PINN 计算结果与有限差分法进行了对比。本研究为深入理解 AC 方程物理内涵、优化数值计算方法提供支持, 也为 PINN 在材料科学、凝聚态物理等领域解决类似复杂问题奠定基础。未来可进一步拓展 PINN 在高维相场模型、多物理场耦合问题中的应用, 结合其他技术提高相场模拟精确度和效率, 并开展更多实际应用案例研究。

关键词: 物理信息神经网络; Allen-Cahn 方程; 相界厚度; 序参数分布; 有限差分法

DOI: [10.57237/j.se.2026.01.002](https://doi.org/10.57237/j.se.2026.01.002)

Efficient Solution of Allen-Cahn Equation Considering Phase Boundary Thickness Variation Driven by Physics-Informed Neural Networks

Xinyu Li, Menghan Wang, Yuxin Si, Zuoquan Zhu *

School of Mathematics and Statistics, Zhengzhou Normal University, Zhengzhou 450044, China

Abstract: This study focuses on solving the Allen-Cahn (AC) equation with consideration of varying phase boundary thickness using Physics-Informed Neural Networks (PINN). Traditional numerical methods often exhibit declining computational efficiency and accuracy as problem complexity increases when handling complex phase boundary conditions; PINNs offer a novel approach to addressing such challenges. The study first conducts a detailed derivation of the AC equation and constructs a PINN-based solution model, including three key steps: designing a specific neural network architecture; building a loss function composed of partial differential equation (PDE) residual terms, boundary condition residual terms, and initial condition residual terms; and performing model training. The computational results

基金项目: 河南省自然科学基金项目 (252300420935); 郑州师范学院大学生创新创业训练计划项目 (DCY2024011);
郑州师范学院青年骨干教师资助培养计划 (2026GGJS02); 郑州师范学院科研启动专项经费 (2021-702442).

*通信作者: 朱作权, zuoquanzhu@hotmail.com

收稿日期: 2025-10-14; 接受日期: 2026-01-26; 在线出版日期: 2026-02-06

<http://www.sciandeng.com>

demonstrate that the established PINN model can effectively solve the AC equation with varying phase boundary thicknesses, accurately revealing the distribution patterns of the order parameter under different phase boundary thicknesses, and adapt to the challenges brought by changes in phase boundary thickness by adjusting the number of iterations to achieve stable and efficient numerical solutions. The phase boundary thickness parameter has a significant impact on order parameter distribution, computational stability, and convergence. Additionally, a discussion is conducted between PINN and the finite difference method. This research provides support for in-depth understanding of the physical connotation of the AC equation and optimization of numerical calculation methods, and also lays a foundation for the application of PINN in solving similar complex problems in fields such as materials science and condensed matter physics. Future work can further expand the application of PINN in high-dimensional phase-field models and multi-physics coupling problems, combine other technologies to improve the accuracy and efficiency of phase-field simulations, and carry out more studies on practical application cases.

Keywords: Physics-Informed Neural Networks; Allen-Cahn Equation; Phase Boundary Thickness; Order Parameter Distribution; Finite Difference Method

1 引言

在相场模型研究中, 尽管在理论发展、数值算法优化[1]和应用拓展等方面取得诸多成果, 但在处理复杂相边界条件时仍面临着挑战。尤其在材料科学领域研究新型材料相变时, 复杂的相边界条件使传统相场模型模拟难以精准描述微观结构的变化, 从而影响对材料性能的预测与优化。因此, 发展新方法以提升模拟精确度与效率显得尤为迫切。

Allen-Cahn (AC) 方程作为相场模型的核心, 在材料相变、晶体生长、生物形态改变等领域有着广泛应用[2, 3]。该方程引入相场变量连续描述相界面, 从而避免了传统尖锐界面模型中的几何界面追踪难题。然而, 在处理复杂相边界条件时, 传统数值方法 (如有限差分法[4]、有限元法[5]等) 通常依赖于精细网格的划分与迭代求解, 其计算效率与精确度会随问题的复杂度增加而急剧下降。特别是在模拟多组分材料复杂相变的过程时, 相边界条件复杂、传统方法计算量剧增且精确度难以保证, 限制了对相关物理机制的深入研究。

近年来, 机器学习为偏微分方程求解开辟了新途径[6]。物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) 通过将物理规律融入到神经网络训练中, 并借助损失函数的约束使解满足方程与边界条件, 已经在流体力学[7-9]、传热学[10, 11]等领域得到成功应用。然而, PINNs 在相场模型领域中的应用尚处于探索阶段, 尤其在动态相边界条件下的适应性研究较少, 存在广阔的探索空间。值得注意的是, 相关探索已在诸如三维细胞外基质中细胞迁移与增殖的相场建模

等问题中初步展开[12]。

本研究采用 PINN 求解相场方程, 通过改变相宽度厚度参数寻找最优相边界条件, 旨在提升相场模型的模拟精度与计算效率, 从而为多个领域中的相边界研究提供创新方法与思路。与一般数值方法相比, 物理信息神经网络 (PINN) 为优化相边界带来了新方法, 它具有独特优势, 如下所示:

对复杂几何和边界条件的适应性强: PINN 可以根据所给定的物理方程和边界条件自动调整网络参数, 准确捕捉相边界变化。

数据的需求低且可融合物理知识: PINN 在训练中融入物理方程, 即使数据有限也能借助物理规律来优化相边界。例如, 在研究新型材料相转变的过程中, 面对实验数据稀缺的情况, PINN 可依据相场模型的物理原理, 在少量数据的基础上实现了对相边界的有效优化。

计算效率高且灵活: PINN 训练完成后, 预测阶段向前传播, 计算速度快。当相场模型的参数或边界条件发生改变时, PINN 不用重新进行复杂计算, 仅需调整输入及相应损失函数, 就能快速的给出新的相边界优化结果, 特别是在处理动态变化的相边界问题时具有明显优势。

复杂非线性关系的学习和预测能力: PINN 具有强大的非线性拟合能力, 能够学习相边界演化中的复杂模式。例如, 在研究相分离过程中相边界的粗化现象时, PINN 可以在训练中精准捕捉相边界在不同阶段的变

化, 为深入理解和预测相边界演化提供了有力支持。

2 Allen-Cahn 方程推导

2.1 双阱势自由能密度与体系总自由能

Allen-Cahn 方程基于相场[13]理论构建, 其核心思想是将相界面视为具有一定宽度的过渡区域, 并通过连续的相场变量 u (取值范围[0,1]) 描述体系的相态。其中, $u=0$ 和 $u=1$ 分别代表两个纯相, 而 $0<u<1$ 表示相界面区域。

体系的自由能由体自由能和界面自由能两部分组成。体自由能密度通常采用双阱势函数描述, 其常见形式为:

$$g(u) = \frac{1}{4\varepsilon^2} (1-u^2)^2 \quad (1)$$

其中, ε 为相宽度参数, 控制相界面的扩散程度。双阱势的两个极小值点 ($u=\pm 1$) 对应两相的稳定状态, 而势垒则反映相变的能量障碍。

界面自由能密度反映了相场变量的空间变化, 其值与相场变量梯度的平方成正比, 通常表达为:

$$g_{\text{int}}(u) = \frac{k}{2} (\nabla u)^2 \quad (2)$$

其中, k 为界面能系数, 用于表征界面处的能量强度。因此, 体系的总自由能泛函 G 可表示为:

$$G = \int_{\Omega} \left[g(u) + \frac{k}{2} (\nabla u)^2 \right] d\Omega \quad (3)$$

其中, Ω 为计算区域, $d\Omega$ 为体积微元。

2.2 自由能最小化与欧拉-拉格朗日方程

为推导 Allen-Cahn 方程, 需满足自由能最小化条件, 即自由能泛函的一阶变分为零 $\frac{\delta G}{\delta u} = 0$, 其中 $\frac{\delta}{\delta u}$ 为泛函变分。根据欧拉-拉格朗日方程:

$$\frac{\partial g}{\partial u} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial g_{\text{int}}}{\partial (\nabla u)} \right) = 0 \quad (4)$$

(1) 计算体自由能项

对 $g(u)$ 求偏导:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial u} &= \frac{1}{4\varepsilon^2} * 2(1-u^2) * (-2u) \\ &= -\frac{1}{\varepsilon^2} (u-u^3) \end{aligned} \quad (5)$$

(2) 计算界面自由能项

对 $g_{\text{int}}(u)$ 求关于 Δu 的偏导, 并取散度:

$$\frac{\partial g_{\text{int}}}{\partial (\nabla u)} = k \nabla u \Rightarrow \nabla \cdot \left(\frac{\partial g_{\text{int}}}{\partial (\nabla u)} \right) = k \nabla^2 u \quad (6)$$

将上述结果代入欧拉-拉格朗日方程, 得到稳态下的相场方程:

$$-\frac{1}{\varepsilon^2} (u-u^3) - k \nabla^2 u = 0 \quad (7)$$

2.3 引入动力学方程 (非守恒序参量)

在非守恒序参量的动力学过程中 (如快速相变), 相场变量 u 的时间演化遵循梯度流方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -M \frac{\delta G}{\delta u} \quad (8)$$

上式中 M 为迁移率常数。将自由能变分结果代入得到 Allen-Cahn 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = M \left(\frac{1}{\varepsilon^2} (u-u^3) + k \nabla^2 u \right) \quad (9)$$

为简化形式, 通常令 $M=1$ 且 $k=1$, 得到一维 AC 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u - \frac{1}{\varepsilon^2} (u^3 - u) \quad (10)$$

该方程描述了相场变量 u 随时间 t 和空间 x 的动态演化: 扩散项 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 驱动相界面平滑化; 双阱势项

$-\frac{1}{\varepsilon^2} (u^3 - u)$ 促使趋向稳态值 ($u=\pm 1$)。调整相宽度参数 ε , 可以去控制相界面的陡峭程度: ε 越小相界面越明显; 反之, ε 越大相界面越平滑。

3 PINN 模型构建和求解

3.1 神经网络架构设计

物理信息神经网络是一种融合物理规律的神经网络

络[14, 15]。其核心思想是将物理问题的控制方程（如偏微分方程）作为约束条件融入到神经网络的训练过程中，从而使神经网络在学习数据的特征的同时能够遵循物理规律，提高模型的泛化能力和物理可解释性。该方法通常采用多层感知机等常见的神经网络架构[16]，输入一般为物理问题中的自变量（如空间坐标和时间），输出则为相关物理量的预测结果。在训练过程中，通过随机梯度下降等优化算法来调整神经网络的参数，使损失函数达到最小值。PINN 将物理信息融入神经网络，为复杂物理问题的求解提供了有力的理论支持与实践工具，目前已广泛应用于流体力学、电磁学[17]等。

在构建 PINN 模型时，一般采用全连接神经网络结构。输入层接收 $[x, t]$ 二维向量；中间层设置了若干个隐藏层，以增强模型的非线性拟合能力。本研究一共采用

三层隐藏层，每层设置 100 个节点，并选用双曲正切函数（ $\tanh$ ）作为激活函数。该函数梯度稳定且易计算，能将输出值限定在 $[-1, 1]$ 区间，符合相场变量的物理特性。输出层输出相场变量 u 的预测值。具体的网络结构可以用下方公式表示：

$$\hat{u} = N(x; \theta) = W_4^T \tanh(W_3^T \tanh(W_2^T \tanh(W_1^T x + b_1) + b_2) + b_3) + b_4 \quad (11)$$

其中， $X=[x, t]$, $\theta=\{W_i, b_i\}$, $i=1, 2, 3, 4$ 表示网络的所有参数、 W_i 为权重矩阵、 b_i 为偏置向量。这种架构设计能够充分学习输入时空坐标与相场变量之间的复杂的非线性关系，通过隐藏层的多层变换，逐步提取和抽象特征最终在输出层得到相场变量的预测值。

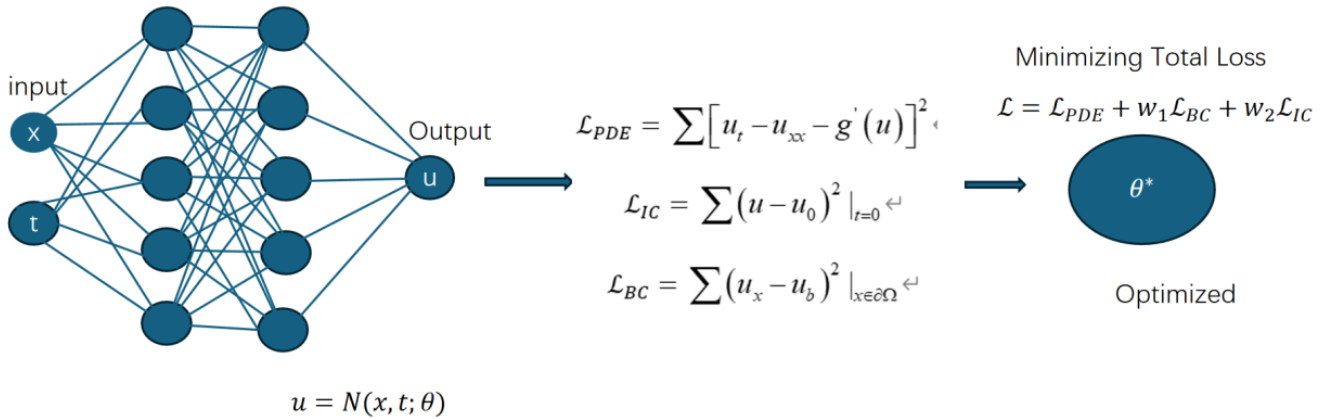


图 1 PINN 求解 PDE 示意图

Figure 1 Schematic diagram of solving PDE with PINN

3.2 损失函数构建

损失函数 $\mathcal{L}$ 由三部分组成：

(1) 偏微分方程残差项 $\mathcal{L}_{PDE}$ ：

$$L_{PDE} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} (\hat{u}_t^i - \hat{u}_{xx}^i + \frac{1}{\varepsilon^2} (\hat{u}^i - (\hat{u}^i)^3))^2 \quad (12)$$

N_p 是计算该项的取样点数量， $\hat{u}_t^i$ 、 $\hat{u}_{xx}^i$ 分别是预测值 $\hat{u}^i$ 关于时间和空间的导数。该项用于衡量预测结果对 AC 方程的匹配程度。通过最小化 L_{PDE} 可以促使神经网络的预测结果来满足 AC 方程所描述的物理规律以此确保模型在物理层面的正确性。

边界条件残差项 L_{BC} ：

以具体相边界条件来构建，如果边界条件为 $u(x_b, t) = u_b$ （ x_b 为边界点， u_b 为边界值）则：

$$L_{BC} = \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} (\hat{u}^i - u_b)^2 \quad (13)$$

N_B 是边界点取样数量。这个残差项保证了神经网络的预测结果在相边界上与所给的边界条件保持一致，使模型能够准确表达相边界对相场演化的约束作用。

初始条件残差项 L_{IC} ：

假设初始条件为 $u(x, t=0) = u_0(x)$ 则：

$$L_{IC} = \frac{1}{N_I} \sum_{i=1}^{N_I} (\hat{u}^i - u_0^i)^2 \quad (14)$$

N_i 为初始条件取样数量。它保证了模型在初始时刻的预测值与实际所给的初始条件相一致, 为相场随时间的改变提供了正确的起始状态。

最终损失函数为

$$L = L_{PDE} + w_1 L_{BC} + w_2 L_{IC} \quad (15)$$

w_1 、 w_2 为了权重用于平衡各项贡献; 可依实际情况调整。通过合理调整这些权重, 可以使得模型在满足不同约束条件时达到最优的平衡状态且提高模型的整体性能。

3.3 模型训练

(1) 训练数据集的准备

为评估偏微分方程 (PDE)、初始条件 (IC) 和边界条件 (BC) 对应的损失项, 需要分别构建相应的训练数据集。具体步骤如下:

首先, 定义三个数据生成函数。边界条件数据: 通过 `BC_data(Nt)` 生成。该函数从区间 $[-1, 1]$ 中随机选取 Nt 个空间坐标 x , 并对应生成 Nt 个在 $[0, 0.04]$ 内均匀分布的时间坐标 t , 组合为二维数组 X , 最后将其转换为 TensorFlow [18, 19] 中 `float32` 类型的常量并返回; 初始条件数据: 由函数 `IC_data(Nx)` 生成。该函数在 $[-1, 1]$ 内均匀采样 Nx 个空间坐标 x , 并将时间 t 全部设为 0, 同样组合为二维数组并转换为 `float32` 常量; 偏微分方程数据: 通过函数 `PDE_data(Np)` 生成。该函数在空间范围 $[-1, 1]$ 和时间范围 $[0, 0.04]$ 内分别均匀采样 Np 个点, 组合后转换为 `float32` 常量。

其次, 确定各类训练数据的数量: 边界条件训练数据数量 N_b 设为 100; 初始条件训练数据数量 N_i 设为 200; 偏微分方程训练数据数量 N_p 设为 4000。基于这些数量分别调用上述函数生成边界条件训练数据 X_b 、初始条件训练数据 X_i 和偏微分方程训练数据 X_p 。对于偏微分方程训练数据 X_p , 进一步将其转换为 TensorFlow 的 `Dataset` 对象 X_p_DS 并对其进行打乱 (缓冲区大小为 Np) 和批处理 (批大小为 256) 操作, 用来优化训练过程中的数据使用效率。

(2) 模型训练过程详述

在完成训练数据集的准备工作后, 模型训练阶段正式开始。

第一步, 定义优化器。我们选用了 TensorFlow 中的 Nadam 优化器, 并将学习率设置成了 0.001。Nadam

优化器联结了 Nesterov 动量和自适应学习速率的优势, 能在训练过程中以一种有效的方式调整网络参数, 有助于加快模型收敛速度并提高训练稳定性。

第二步, 设定外层循环。定义训练轮数 `epochs` 为 2000, 在每一轮 (`epoch`) 训练中, 所有的数据批次会被重复训练 100 次。每一批次包含指定数量的数据点, 以这种方式逐步引导 PINN 模型学习数据中的特征和规律。

接下来, 进入内层循环。在每一轮 (`epoch`) 训练中集中对偏微分方程训练数据的数据集对象 X_p_DS 按顺序取出每个批次的数据 X_p_batch 。具体过程如下:

- 1) 在 TensorFlow 框架中, 自动求导机制通过梯度记录工具 (`tf.GradientTape()`) 实现, 其核心功能是在特定作用域内追踪所有涉及变量的运算过程, 为后续梯度计算提供必要的操作记录, 是实现自动微分的关键环节。
- 2) 在模型训练过程中, 首先需要计算总损失及各项分损失。其中, 总损失综合反映模型预测结果与物理系统规律的吻合程度, 而分损失则分别针对偏微分方程本身、初始条件和边界条件进行量化评估, 以此衡量模型在不同约束条件下的表现。
- 3) 基于上述损失值, 通过求导操作可计算总损失对模型所有可训练参数 (如权重、偏置等) 的梯度。这些梯度值精确刻画了当前参数状态下, 各参数对损失大小的影响程度, 为参数调整提供了数学依据。
- 4) 最后, 利用优化算法, 根据计算得到的梯度信息对模型参数进行更新。这一过程使得模型参数能够沿着降低损失的方向进行调整, 通过迭代优化逐步提升模型对物理系统规律的拟合能力。

为了监控训练过程, 在每轮的训练结束后, 我们会检查当前轮数是否为 100 的整数倍。如果是, 则打印当前轮数、总损失值以及各项损失值 (偏微分方程的损失、初始条件的损失、边界条件的损失)。通过定期输出这些信息可以直观地了解到模型在训练过程中的收敛情况和性能表现, 以便能及时发现问题并进行调整。

值得关注的是, 尽管优化器会主动调整参数得到最小化损失, 但在实际训练中依然需要密切关注训练动态变化; 根据具体情况, 可能还需要更深层次地优化训练策略比如调整学习率、对网络结构进行优化等, 以确保模型能够达到最好的训练效果。

4 数值结果与分析

4.1 误差分析

在利用物理信息神经网络求解不同相界厚度的 Allen-Cahn 方程时, 计算稳定性与收敛性是评估模型性能的重要因素。它需要综合多方面因素进行更加深入的分析, 其中损失函数的变化情况、损失值随着迭代次数的变化趋势, 以及不同相界厚度下的表现差异尤为重要。图 2~图 6 展示了边界条件(BC)的损失、偏微分方程(PDE)损失、初始条件(IC)损失和总损失(all)的稳定性和收敛性表现。以下是对结果进行的综合分析:

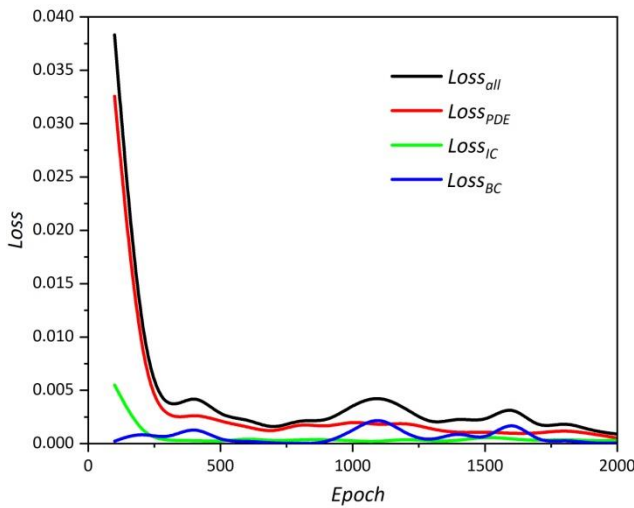


图 2 相界厚度为 0.1 的误差曲线

Figure 2 Error curve with interface thickness 0.1

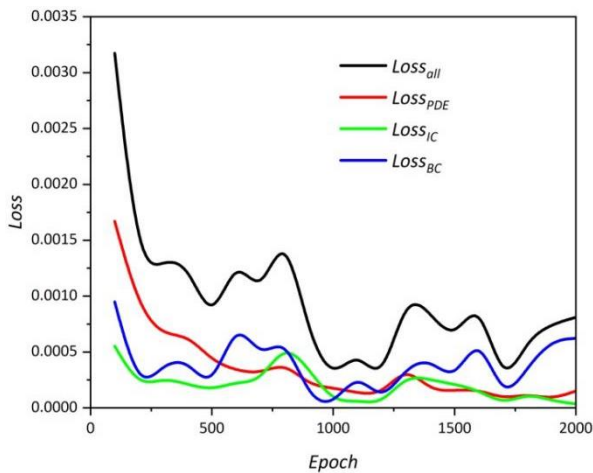


图 3 相界厚度为 0.2 的误差曲线

Figure 3 Error curve with interface thickness 0.2

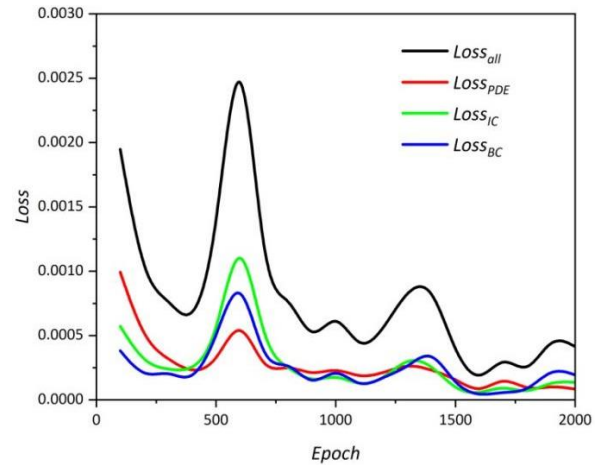


图 4 相界厚度为 0.3 的误差曲线

Figure 4 Error curve with interface thickness 0.3

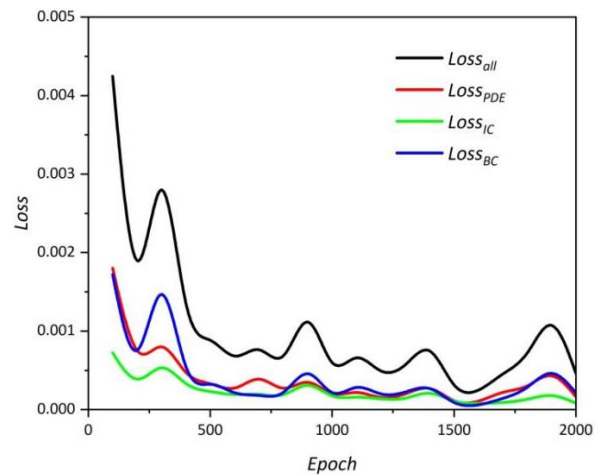


图 5 相界厚度为 0.4 的误差曲线

Figure 5 Error curve with interface thickness 0.4

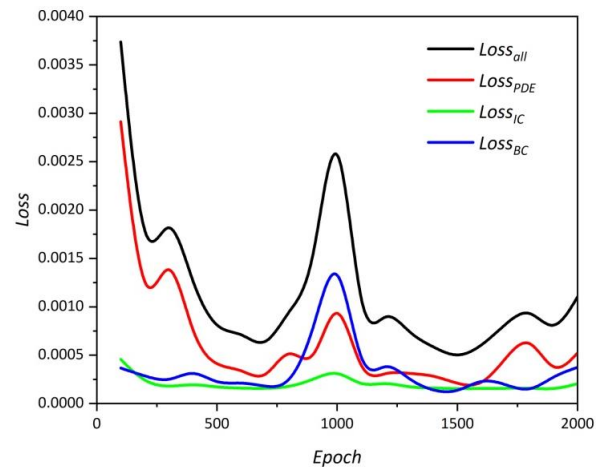


图 6 相界厚度为 0.5 的误差曲线

Figure 6 Error curve with interface thickness 0.5

(1) 计算稳定性: 计算稳定性反映了神经网络在训练过程中面对各种因素干扰时所保持稳定训练状态的能力。从相界厚度参数 $\varepsilon=0.1$ 的结果可以看出: 在迭代次数为 100~200 这一阶段, 损失函数值呈现出明显的波动特征。例如, 在 100 次迭代时, Loss 值在不同的训练批次中分别为有 0.038756、0.04182 等; 而到 200 次迭代时, 这些值变化为 0.023293、0.016331 等。与此同时, 损失函数的各个组成部分即偏微分方程约束损失 (Loss_PDE)、初始条件损失 (Loss_IC) 和边界条件损失 (Loss_BC) 也发生了较大的变化。这充分表明了在该阶段神经网络的训练过程受到了序参数变化的强烈影响。由于 Allen-Cahn 方程中序参数在相界处的变化较为剧烈, 神经网络在学习和拟合这些复杂变化时难以保持稳定, 从而引起损失函数出现了较大波动, 这直接反映出计算稳定性有待提升。

随着相界厚度参数 ε 增大, 以 $\varepsilon=0.5$ 为例, 损失函数的波动幅度明显下降。在多次迭代过程中, Loss, Loss_PDE、Loss_IC 和 Loss_BC 等各损失分量, 变化都相对平稳。这意味着较大相界厚度的条件下, 序参数变化比较平缓、神经网络更容易学习和捕捉它的变化规律, 从而在训练过程中保持了相对稳定的状态, 有效地提升了计算的稳定性。

(2) 收敛性分析: 收敛性用来衡量神经网络训练过程中, 损失值随迭代次数增加而逐渐接近最优解的速度和程度。如图 2 所示, 当 $\varepsilon=0.1$ 时观察损失值随迭代次数的变化趋势, 会发现从 100 次迭代时的较高损失值开始, 整体上呈现出逐渐下降的趋势, 但下降过程中存在着明显的波动。直到 2000 次迭代时, 损失值才降到 0.00089。这种缓慢波动的下降趋势表明, 较小的相界厚度使序参数在相界处的变化过于剧烈, 所以神经网络在训练过程中需要花费更多的精力去适应和学习这些变化, 这增加了训练的难度, 导致了收敛速度变缓慢。

与图 2 对比, 图 6 中 $\varepsilon=0.5$ 时, 损失值在训练前期就呈现出较快的下降趋势, 并且在整个训练过程中的整体波动较小。经历 2000 次迭代后, 损失值为 0.001104。这说明在较大相界厚度的情况下, 序参数分布更加地平滑, 神经网络能够更高效的学习和拟合数据, 减少了训练过程中的不确定性, 从而有利于模型更快地收敛到一个较优解。

(3) 综合分析: 综上所述, 相界厚度参数 ε 对计算稳定性与收敛性有较为显著的影响。较小的 ε 会使序参数在相界处的变化过于剧烈, 导致神经网络在训练过程中

损失函数的波动较大、计算稳定性下降, 还使训练的难度增加, 收敛速度变缓慢。相反, 较大的 ε 能使序参数分布更加平滑, 有效减小了损失函数的波动幅度、提高了计算的稳定性, 加快了收敛速度。然而, 仍需要注意的是, 过大的 ε 虽然能够给计算稳定性和收敛性带来优势, 但可能会出现过度平滑, 导致神经网络在学习过程中丢失了部分关键的物理信息, 影响计算结果的精确度。因此, 在实际应用的场景中, 应综合考虑计算稳定性、收敛性和结果精确度等多方面因素, 通过合理地权衡选择合适的 ε 值, 从而达到最佳的计算效果。

4.2 序参数分析

接下来, 分别结合有限差分分解与 PINN 预测解对不同相界厚度参数 ε (分别为 0.1、0.2、0.3、0.4、0.5) 的序参数 u 分布图像进行分析。其中, PINN 的迭代次数为 2000 次, 可得出以下关于序参数分布可视化的结论。

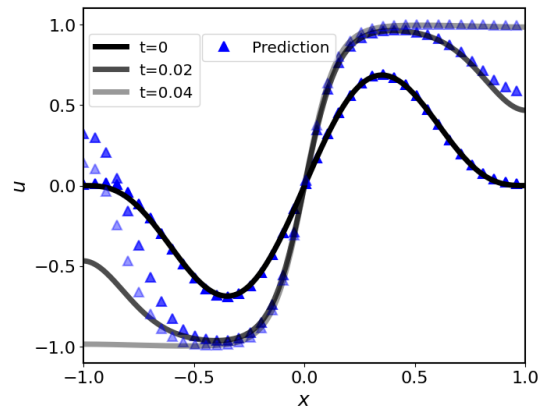


图 7 $\varepsilon=0.1$ 时的序参数变化

Figure 7 Order parameter variation when $\varepsilon=0.1$

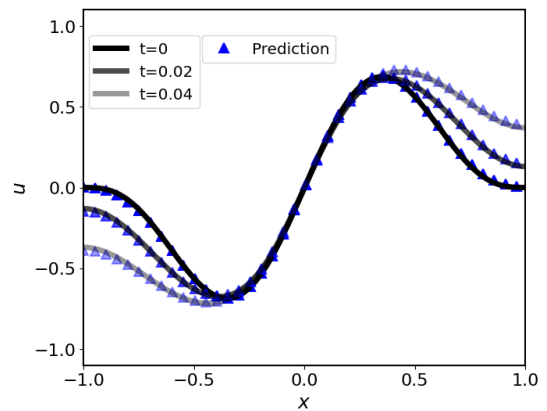
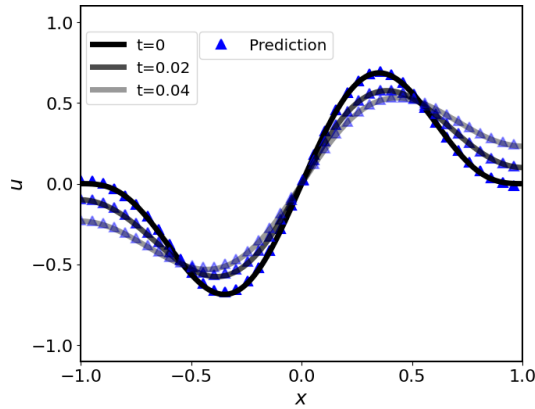
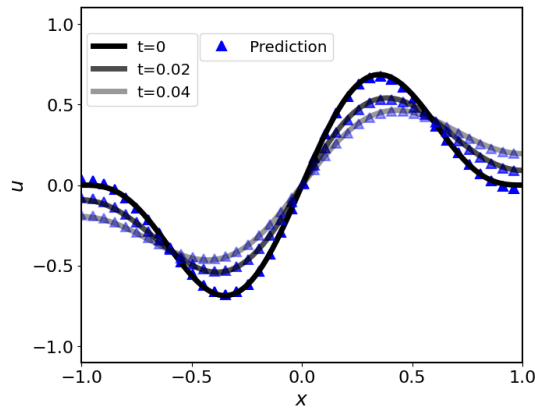
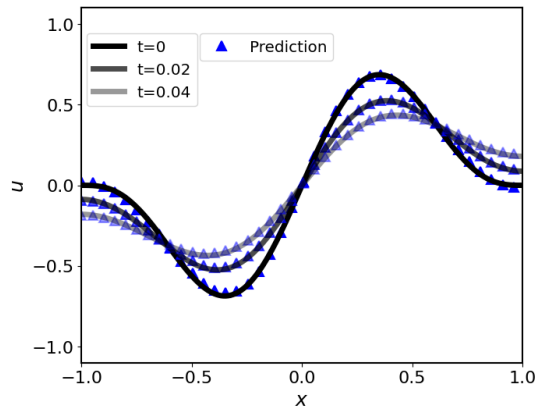


图 8 $\varepsilon=0.2$ 时的序参数变化

Figure 8 Order parameter variation when $\varepsilon=0.2$

图 9 $\varepsilon=0.3$ 时的序参数变化Figure 9 Order parameter variation when $\varepsilon=0.3$ 图 10 $\varepsilon=0.4$ 时的序参数变化Figure 10 Order parameter variation when $\varepsilon=0.4$ 图 11 $\varepsilon=0.5$ 时的序参数变化Figure 11 Order parameter variation when $\varepsilon=0.5$

相界区域宽度与 ε 的关系: 随着相界厚度参数 ε 从 0.1 逐渐增大至 0.5, 相界区域呈现出持续扩张的趋势。在 $\varepsilon=0.1$ 时, 相界区域相对较为狭窄, 序参数 u 在相界附近的变化较为急剧, 不同相之间的过渡较为迅

速; 而当 ε 增大到 0.5 时, 相界区域显著的变宽、序参数 u 在相界范围内的变化趋于平缓。这表明了 ε 直接决定了相界区域的宽度且二者呈正相关关系。

序参数 u 的空间变化特性: 在初始时刻 $t=0$, 各取值下的序参数 u 分布曲线具有相似的起始形态。但随着时间的推进 ($t=0.02$ 和 $t=0.04$), 不同 ε 值对应的序参数 u 空间变化趋势出现了明显差异。较小的 ε 值 (如 0.1) 下, 序参数 u 在相界处的变化依然相对陡峭, 在空间上的跃迁较为明显, 意味着不同相之间的界限相对清晰; 而较大的 ε 值 (如 0.5) 下, 序参数 u 从一个相态过渡到另一个相态时, 在空间上的变化更为平滑, 相界处不再存在明显的突变, 而是形成了一个更宽连续过渡区域, 这体现了 ε 对序参数空间变化率的调控作用。

预测值与不同时刻数值解的契合度: 从图像中“Prediction”(蓝色三角形)与不同时刻 ($t=0$ 、 $t=0.02$ 、 $t=0.04$) 的有限差分数值解 (曲线) 的对比来看, 随着 ε 的增大预测值与理论值在相界区域的契合程度有所变化。在 ε 较小时, 预测值在 ε 相界处能较好地捕捉到序参数的快速变化; 但在较大 ε 时, 虽然整体趋势相符但在相界更宽的过渡区域细节上, 预测值与理论值存在一定偏差。这反映出相界厚度 ε 不仅影响序参数的实际分布特性, 也对基于模型的预测精确度产生了影响; 较大的 ε 使得相界区域的复杂性增加, 给模型准确预测序参数分布带来了一定的挑战。

时间演化对序参数分布的影响共性: 对于所有的 ε 取值, 随着时间从 $t=0$ 推进到 $t=0.02$ 再到 $t=0.04$, 序参数 u 的分布均发生了演变, 且整体趋势都是朝着相分离进一步发展的方向。在相分离过程中, 序参数 u 逐渐趋向于更清晰地划分不同的相态, 只是在不同 ε 下, 相界的形态和序参数过渡方式存在着差异。这表明了时间是驱动序参数分布变化的重要因素, 而 ε 则在其中起到了调节相界特性和序参数变化方式的作用。总之相界厚度参数 ε 对序参数 u 的空间分布、变化特征以及模型预测的准确性都有着显著影响, 这些结论为深入理解 Allen-Cahn 方程中的相界行为和序参数演化提供了直观、重要的可视化依据。

5 结论与展望

本文基于 PINN 模型, 求解了具有不同相界厚度的 Allen-Cahn (AC) 方程, 系统研究了相界厚度对 AC 方

程数值结果的影响,并深入分析了 PINN 在求解此类问题上的性能与优势。研究表明, PINN 模型能够有效求解不同相界厚度变化的 AC 方程问题,准确反映 AC 方程在不同相界厚度下的物理特性,例如序参数分布和误差分布;同时,该模型还能通过调整迭代次数来适应相界厚度变化引起的挑战,实现稳定又高效的数值求解。

本研究深化了 Allen-Cahn 方程的物理内涵的理解,为后续优化相关数值的问题提供了高效的方法,也为 PINN 在材料科学、凝聚态物理等领域的应用奠定了基础。未来工作可进一步拓展 PINN 在多维相场模型、多物理场耦合问题中的应用,探索更加有效的网络结构和训练策略,提升其在复杂场景下的性能和泛化能力;也可结合其他先进机器学习技术和物理建模方法,进一步提高相场模拟的精确度和效率;此外,可推动 PINN 在更多实际问题中的应用研究,例如新材料的设计与开发、材料性能的优化等,从而为相关领域的发展提供更加有力的支持。

参考文献

- [1] 苏阳, 吴文华, 杨志刚, 等. 机器学习加速相场计算的发展及应用 [J]. 鞍钢技术, 2024, (06): 50-60+115.
- [2] 甘玉凤, 陈静然, 周志华, 等. 石蜡基复合相变材料及其在储能系统中的应用 [J]. 化工进展, 2025, 44(S1): 277-287.
- [3] 徐海航. 基于物理信息神经网络的热力耦合数值计算方法 [D]. 大连理工大学, 2024.
- [4] 陈金雄, 张敏, 沈丹梅, 等. 有限差分法的一维热传导方程应用 [J]. 武夷学院学报, 2022, 41(03): 53-57.
- [5] 曹通. 基于有限元法的低碳钢中马氏体相变相场模拟 [D]. 中北大学, 2022.
- [6] 巫诚. 基于深度神经网络的偏微分方程无监督算子学习 [D]. 苏州大学, 2024.
- [7] 毛顺元, 董若冰, 王炜琦, 等. 在天文学中基于机器学习的流体力学问题加速求解 [C] // 中国力学学会流体力学专业委员会. 第十三届全国流体力学学术会议摘要集 (下), 2024: 623.
- [8] 高欣雨. 基于物理信息神经网络的液滴动力学自适应界面捕捉方法研究 [D]. 大理大学, 2025.
- [9] 于浩. 基于物理信息神经网络模型的流体力学问题求解 [D]. 华中科技大学, 2022.
- [10] 许梦强. 基于物理信息神经网络的多尺度热传导分析 [D]. 合肥工业大学, 2023.
- [11] 余波, 许梦强, 高强. 基于物理信息神经网络的功能梯度材料稳态/瞬态热传导分析 [J]. 计算力学学报, 2023, 40(04): 594-601.
- [12] 尤红俊, 赵倩倩, 刁佳宇, 等. 加权基因共表达网络分析联合机器学习方法筛选扩张型心肌病生物标记及免疫浸润分析 [J]. 中国循证心血管医学杂志, 2024, 16(05): 517-522.
- [13] Fazly M. Qualitative dynamics of a coupled Allen-Cahn system with phase-field interactions [J]. Physica Scripta, 2025, 100(11): 115239-115239.
- [14] 谭美华, 范菁. 基于深度学习和物理信息神经网络的微分方程解 [J]. 长春大学学报, 2024, 34(08): 26-30.
- [15] 祝鸿伟. 相场方程满足物理规律的神经网络方法 [D]. 广东工业大学, 2025.
- [16] 张良承, 郭敏, 张云飞, 等. 小波分析结合多层感知机神经网络模型的 PM2.5 浓度短期预测 [J]. 测绘科学, 1-11 (2025-12-05).
- [17] 李佳琦. 数据与物理模型双驱动模型降阶技术 [D]. 电子科技大学, 2025.
- [18] 汤双霞. 基于 TensorFlow.js 和 JSDoop 的神经网络训练 [J]. 信息技术与信息化, 2021, (07): 68-69+75.
- [19] 苏玉刚, 阳剑, 戴欣, 等. 基于 TensorFlow 神经网络的 MCR-WPT 系统负载与互感识别方法 [J]. 电力系统自动化, 2021, 45(18): 162-169.