Modern Physics 现代物理, 2026, 16(6), 289-300
Published Online November 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/mp
https://doi.org/10.12677/mp.2026.166030

Hans汉斯

物理约束神经网络求解热传导方程研究

潘承照

贵州大学大数据与信息工程学院，贵州 贵阳

收稿日期：2026年10月17日；录用日期：2026年11月10日；发布日期：2026年11月16日

摘 要

为了比较物理约束神经网络(PINN)求解瞬态热传导方程时，软约束与硬约束策略的预测精度及初边值条件一致性。我们建立一维无量纲热传导模型，设置双正弦初始温度并推导解析解；利用自动微分计算方程残差，对照两种PINN和显式有限差分法，考察配点数量与随机初始化的影响。最终在512个内部配点、1400次Adam更新下，在固定初边损失权重$\lambda = 10$下，软约束与硬约束PINN的相对误差分别为1.57%和0.170%；三种随机种子的平均误差分别为1.40%和0.150%。相同101 × 101时空评估网格上的有限差分误差为1.37e−05，精度和单次计算用时均优于本次PINN设置。由结果可知，硬约束结构有助于提高初边值条件一致性并降低测试误差，但传统离散法对低维规则区域的高效性仍十分突出；结果仅适用于所研究模型及训练配置。

关键词

物理约束神经网络，瞬态热传导，硬约束，自动微分，有限差分法

Physics-Informed Neural Networks for Solving the Heat Conduction Equation

Chengzhao Pan

School of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: October 17, 2026; accepted: November 10, 2026; published: November 16, 2026

Abstract

To compare the prediction accuracy and the consistency of initial and boundary conditions between soft-constraint and hard-constraint strategies in solving the transient heat conduction equation using physics-informed neural networks (PINNs), a one-dimensional dimensionless heat conduction model was established. An initial temperature distribution composed of two sinusoidal modes was specified, and the corresponding analytical solution was derived. Automatic differentiation was

文章引用: 潘承照. 物理约束神经网络求解热传导方程研究[J]. 现代物理, 2026, 16(6): 289-300.
DOI: 10.12677/mp.2026.166030

employed to calculate the residual of the governing equation. The two PINN strategies were compared with an explicit finite difference method, and the effects of the number of collocation points and random initialization were investigated. The results show that, with 512 interior collocation points and 1400 Adam optimization iterations, under a fixed initial/boundary loss weight lambda = 10, the relative errors of the soft-constraint and hard-constraint PINNs were 1.57% and 0.170%, respectively. Across three random seeds, their mean relative errors were 1.40% and 0.150%, respectively. On the same 101 × 101 space-time evaluation grid, the explicit finite difference method achieved a relative L_2 error of 1.37×10^{-5}, outperforming the PINN configurations used in this study in both accuracy and computational time for a single solution. The results indicate that the hard-constraint formulation helps improve the satisfaction of initial and boundary conditions and reduce prediction errors. However, conventional discretization methods remain highly efficient for low-dimensional problems with regular domains. These findings are limited to the heat conduction model and training configurations investigated in this study.

Keywords

Physics-Informed Neural Networks, Transient Heat Conduction, Hard Constraints, Automatic Differentiation, Finite Difference Method

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

1. 引言

瞬态热传导是描述温度场随时间变化的基础物理过程，广泛存在于电子元件散热、热加工与能源系统之中。在已知热扩散系数和初边值条件时，经典有限差分、有限体积及有限元方法能够高效地求解热方程；对于规则低维区域，成熟数值格式通常兼具稳定性、精度与计算效率。另一方面，复杂边界、多物理场耦合、稀疏测温和参数反演等情形，对直接建立连续空间函数近似提出了新的需求。

Raissi 等[1]提出的物理约束神经网络(physics-informed neural networks, PINNs)把控制方程的残差纳入优化目标，通过自动微分获取所需导数，从而在不依赖温度场监督标签的条件下近似偏微分方程的解。Karniadakis 等[2]系统梳理了物理引导机器学习的主要框架及适用场景；Lu 等[3]总结了 PINN 求解微分方程的实现流程和残差配点策略。与传统离散方法不同，PINN 把温度场表示为一个由网络参数控制的连续映射，能够在完成训练后直接接受空间和时间坐标作为输入。

然而，物理方程写入损失函数不等于所得网络严格满足所有约束。常见软约束方式对方程残差、初值误差和边界误差分别取均方损失，再通过人为确定的权重求和。不同损失之间的梯度尺度可能不一致，导致优化速度、边界一致性和泛化精度受权重影响。Wang 等[4]指出了 PINN 训练中的梯度流病态和优化困难，说明仅观察总训练损失并不足以评价物理解的准确性。

另一种思路是直接修改网络输出形式。Lagaris 等[5]较早提出将满足初边值条件的函数与神经网络构造成试探解，使相应条件在结构上自动成立；Sukumar 和 Srivastava [6]进一步讨论了利用距离函数精确施加 Dirichlet 边界条件的策略。此类“硬约束”方法避免对已知条件设置惩罚权重，但是否总能改善方程残差、收敛速度或计算效率，还需要由特定问题的实验加以检验。

本文选择具有解析解的一维无源热传导问题作为受控基准，使用两个衰减速率不同的正弦模态构成初始场，避免只考察单一模态的过度简单情形。研究重点为：(1) 在相同网络结构和更新次数下，比较软约束与硬约束 PINN 的误差及条件违背情况；(2) 考察配点数量和随机初始化对结果的影响；(3) 采用相

同评估网格上的显式有限差分结果，检验神经网络方法在低维规则区域的实际代价。本文不提出新型通用算法，也不将数值演示误称为物理实测实验。

2. 热传导模型与理论解

2.1. 控制方程与初边值条件

考虑均匀、各向同性且无内部热源的一维薄棒，其横向温差忽略不计。将长度、时间和温度分别无量纲化后，设位置 $x\in[0,1]$、时间 $t\in[0,1]$，温度记为 $u(x,t)$，热扩散系数取 $\alpha=0.1$。其瞬态热传导方程为：

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2},\ 0<x<1,0<t\le 1 \tag{1}$$

在两端始终维持零参考温度的 Dirichlet 边界条件下，设置一个由低阶模态叠加构成的非平衡初始温度分布：

$$u(0,t)=u(1,t)=0,\ u(x,0)=\sin(\pi x)+\frac{1}{2}\sin(2\pi x) \tag{2}$$

本文的 u 表示相对于参考温度的无量纲温差。对于所设初始条件和齐次 Dirichlet 边界条件，解析温度场在研究时空域内保持非负。对于一般初边值问题，无量纲温差也可能取负值，表示温度低于参考温度，并不代表绝对温度为负。

2.2. 解析基准与耗散性质

由分离变量法可知，空间本征函数 $\sin(n\pi x)$ 对应的时间因子为 $\exp(-\alpha n^2\pi^2 t)$。利用初始系数 1 和 0.5，可得到整个时空域内的精确解：

$$u_{\text{exact}}(x,t)=\sin(\pi x)\mathrm{e}^{-\alpha\pi^2 t}+\frac{1}{2}\sin(2\pi x)\mathrm{e}^{-4\alpha\pi^2 t} \tag{3}$$

本文仅在计算误差和绘图环节使用式(3)；PINN 训练本身不读取解析解，也不使用解析解生成监督标签。由式(3)可见，较高空间频率的第二模态以 4 倍于第一模态的指数速率衰减，因此早期温度剖面变化更为剧烈。

两端无源且固定为零时，热方程还满足能量耗散关系。对控制方程乘以 $2u$ 并在空间区间积分，再利用分部积分及边界条件，可得：

$$E(t)=\int_0^1 u^2(x,t)\,\mathrm{d}x,\ \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=-2\alpha\int_0^1\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\mathrm{d}x\le 0 \tag{4}$$

式(4)说明平方温度积分 $E(t)$ 应随时间非增。该量不是严格意义上的热力学内能，而是用于验证扩散平滑性的数学能量。利用独立评估网格计算 $E(t)$，可以从总体耗散趋势上补充检验网络预测是否与热扩散物理相符。

3. 研究方法与计算设置

3.1. 网络表示与方程残差

两种 PINN 均采用全连接前馈神经网络，输入为坐标 (x,t)，输出为标量温度近似值；网络包含 3 个隐藏层，每层 32 个神经元，激活函数为 tanh。网络权重以 Xavier 方式初始化，全部训练均在 CPU 上使用单精度浮点数完成，采用 Adam 优化器，初始学习率 0.002，固定迭代 1400 步，不使用学习率调整、

提前停止或解析解反馈。

使用自动微分依次计算网络温度对时间的一阶导数和对位置的二阶导数，构造方程残差：

$$f_\theta(x,t)=\frac{\partial u_\theta}{\partial t}-\alpha\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial x^2} \tag{5}$$

在时空域内采用带随机扰乱的 Sobol 低差异序列布置内部配点。基准方案使用 512 个内部配点，训练时固定该配点集合以尽量减少数据变化带来的干扰；软约束的初始点、左右边界点分别各取 128 个。由于研究目标是求解已知控制方程，训练损失不包含任何来自解析解的观测值(图 1)。

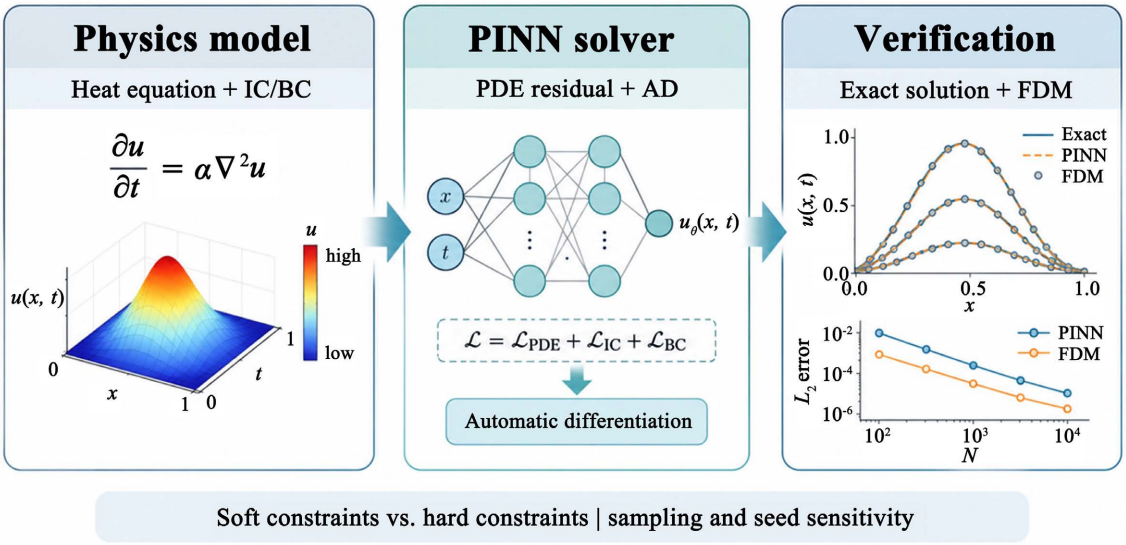


Figure 1. Workflow for the controlled heat-equation PINN benchmark
图 1. 热传导方程 PINN 数值对照研究流程

3.2. 软约束 PINN

常规软约束 PINN 直接令网络输出 $u_\theta(x,t)$ 近似温度场，通过方程残差均方损失 $\mathcal{L}_f$、初值均方损失 $\mathcal{L}_0$ 和边界均方损失 $\mathcal{L}_b$ 联合优化。为保证初边值项具有一定权重，本文明确采用固定权重 10，并保持所有随机种子实验一致：

$$\mathcal{L}_{\text{soft}}=\frac{1}{N_f}\sum_{j=1}^{N_f}\left|f_\theta(x_j,t_j)\right|^2+10\mathcal{L}_0+10\mathcal{L}_b \tag{6}$$

其中 $\mathcal{L}_0$ 为初始采样点上 $u_\theta(x,0)$ 与规定初温的均方差；$\mathcal{L}_b$ 为左右两端采样温度平方的平均值。该设置仅作为可复现基准，权重 10 未经过大规模超参数寻优，因此不能据此推断软约束 PINN 在最佳调参情况下的性能。

3.3. 硬约束 PINN

为了严格满足式(2)的初值和边界条件，令网络本体输出为 $N_\theta(x,t)$，构造如下试探温度场：

$$\hat{u}_\theta(x,t)=u(x,0)+tx(1-x)N_\theta(x,t) \tag{7}$$

由于 $t=0$ 时修正项为零，该表达式自动恢复给定初值；由于 $x(1-x)$ 在两端为零，$\hat{u}_\theta(0,t)$ 与 $\hat{u}_\theta(1,t)$ 也自动满足边界条件。由此可将损失简化为单一方程残差项：

$$\mathcal{L}_{\text{hard}} = \frac{1}{N_f}\sum_{j=1}^{N_f}\left|f_\theta\left(x_j,t_j\right)\right|^2 \tag{8}$$

需要强调，硬约束并未在整个区域自动满足热方程，控制方程仍须依靠优化求解。其潜在优势在于消除了初边值惩罚项的竞争，但乘子 $tx(1-x)$ 同时会改变梯度分布，在更高维或不规则边界下不一定容易构造。本文比较的是“输出构造 + 损失定义”的整体方案，而非完全隔离单一因果因素的消融试验。

3.4. 有限差分基准

为避免只与另一种神经网络比较，另行实现显式前向欧拉时间推进和中心空间差分组合格式(FTCS)。空间位置 $x_i = i\Delta x$，时间 $t_n = n\Delta t$，在内部节点上有：

$$u_i^{n+1} = u_i^n + r\left(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n\right),\ r = \frac{\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{9}$$

经典显式格式的稳定性要求 $r \le 1/2$。用于全域误差对照的有限差分网格选择 $\Delta x = 0.01$、$\Delta t = 0.0002$，故 $r = 0.2$；总时间步数为 5000，每间隔 50 步保存一次温度分布，恰好与 PINN 评估所用的 101 × 101 时空网格一致，不需要插值。为观察离散误差随网格变化的趋势，还选取 40、80 和 160 个空间间隔分别计算终点误差。相关离散方法理论可参见 LeVeque [7]。

3.5. 评价指标与复现条件

对 101 × 101 均匀评估节点上的预测值和式(3)的解析值进行比较，采用相对 L_2 误差作为主要总体评价指标：

$$\varepsilon_{\text{rel},2} = \frac{\left\|\boldsymbol{u}_{\text{pred}} - \boldsymbol{u}_{\text{exact}}\right\|_2}{\left\|\boldsymbol{u}_{\text{exact}}\right\|_2} \tag{10}$$

同时统计均方根误差(RMSE)、最大绝对误差(L_∞)、初边值最大违背量和在独立内部节点上评估的 PDE 残差 RMSE。PDE 测试残差使用 50 × 50 个与训练配点独立的规则节点(坐标端点内缩 0.005)，避免将训练损失误当作泛化误差。计时只统计求解器训练或时间推进，不包括网络预测网格与绘图，因而主要用于展示数量级差异，不作为跨硬件速度排名(表 1)。

Table 1. Principal numerical settings and training protocol
表 1. 主要计算参数与训练协议

项目	取值
空间/时间区间	[0, 1] × [0, 1]
热扩散系数 α	0.1 (无量纲)
网络结构	2–32–32–32–1, tanh
Adam 学习率/训练步数	0.002/1400
训练内部配点 Nf	256, 512, 1024 (Sobol)
软约束初值/边界点	128/每侧 128
初值/边界损失权重	10/10
测试网格/随机种子	101 × 101; 2026, 2027, 2028
计算实现	PyTorch 2.10.0+cpu；CPU 双线程

4. 数值结果与分析

4.1. 温度场与瞬态衰减

图 2 给出了解析温度场、512 个内部配点下硬约束 PINN 的预测场及其带符号误差。两者均呈现从初始双模态结构向以第一模态为主的平滑分布转变的过程；图中第三幅误差图采用单独量程，以揭示较小的局部差异。误差主要集中于初期随时间快速变化的区域，符合第二模态衰减速率较快的物理特征。

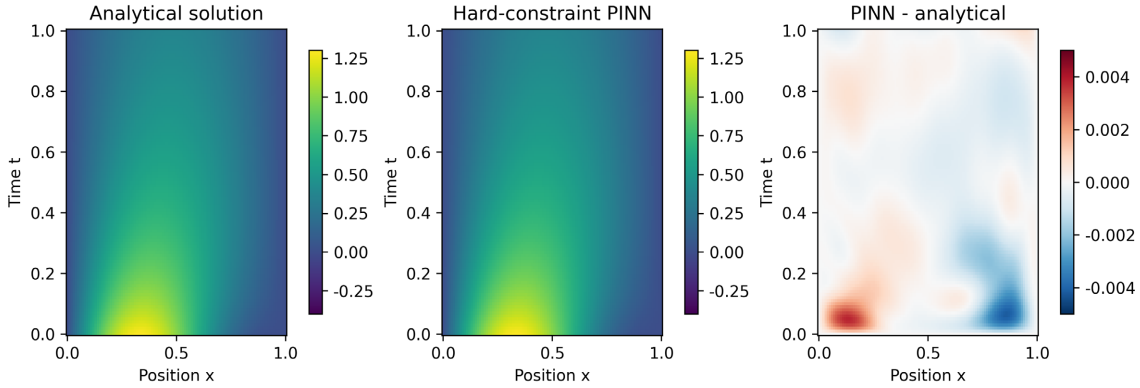


Figure 2. Analytical temperature, hard-PINN prediction and signed error
图 2. 解析温度场、硬约束 PINN 预测及带符号误差

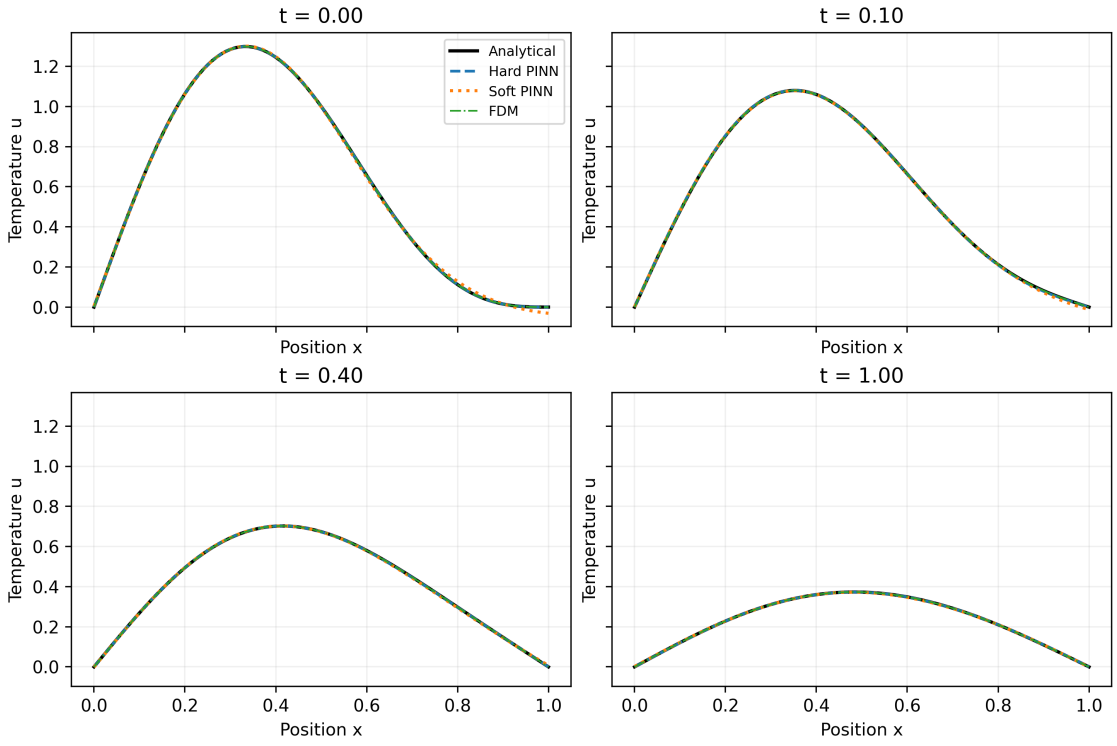


Figure 3. Temperature profiles at four selected times
图 3. 四个代表时刻的温度分布对比

在 t = 0、0.1、0.4 和 1.0 四个代表时刻，图 3 同时绘制解析剖面、两种 PINN 和有限差分结果。硬约束解在初始时刻与解析曲线重合；软约束解在初期边界附近略有偏差。随着第二模态逐渐衰减，不同方

法对主导低频温度分布的预测趋于一致。需要指出，图 3 中的有限差分线与解析曲线接近，并非 PINN 与有限差分精度完全一致；较小差异应结合定量误差表解释。

4.2. 软、硬约束的误差对照

表 2 统计了随机种子 2026、内部配点 512 个且训练 1400 步的模型结果。软约束 PINN 的相对 L_2 误差为 1.572%，硬约束 PINN 为 0.1702%，后者相对误差约为前者的 0.11 倍。硬约束网络的初值最大偏差仅约 1.86e−07，边界误差为零；软约束对应最大偏差均约为 0.042。

Table 2. Error and runtime comparison on the same evaluation grid
表 2. 统一时空评估网格上的误差与运行时间

方法	相对 L_2 误差	RMSE	L_∞	残差 RMSE	耗时/s
软约束 PINN (512)	0.015720	0.007584	0.042170	0.07280	4.36
硬约束 PINN (512)	0.001702	0.000821	0.004164	0.02431	4.65
显式有限差分(101 × 101)	0.000014	0.000007	0.000015	—	0.024

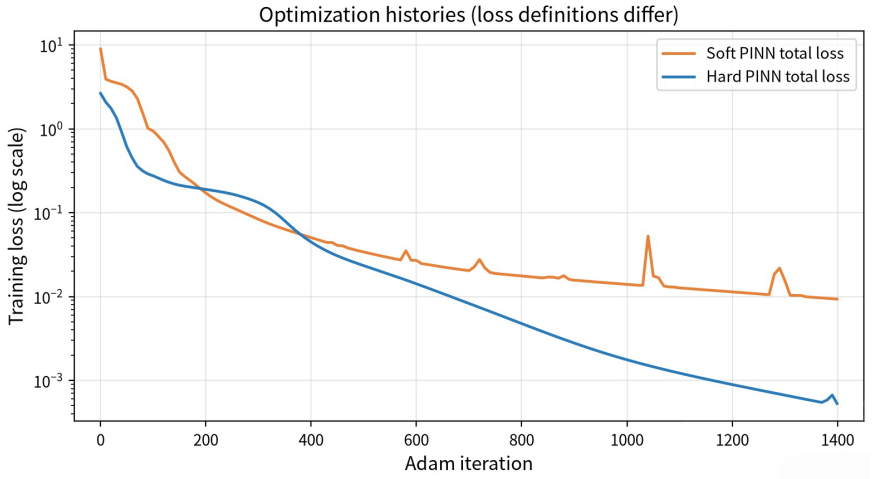


Figure 4. Loss histories of the soft- and hard-constraint PINN training schemes
图 4. 软约束与硬约束 PINN 训练损失历程

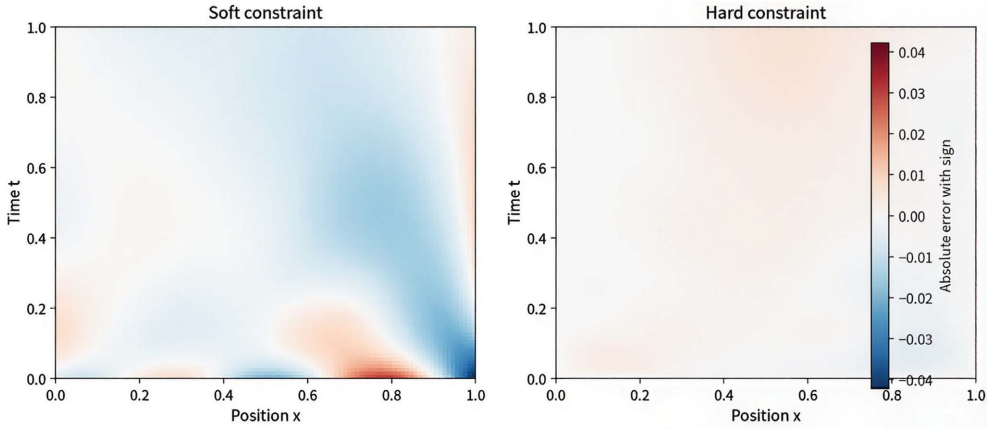


Figure 5. Signed error fields of the two constraint schemes with a shared color range
图 5. 相同色标下两种约束方案的带符号误差场

图 4 展示了两种 PINN 训练目标的下降趋势。需要注意，软约束的总损失包含初值与边界权重项，而硬约束只有方程残差项，因此不能直接把两条损失曲线的数值大小当作两种方法求解精度的可比标尺。独立网格上的解误差及残差 RMSE 才是本研究用于比较的主要依据。

图 5 采用相同色标范围绘制两种预测场相对于解析解的带符号误差。可以直观看到，软约束在初期及端点附近存在更显著的局部误差，硬约束则将这部分条件不一致的误差消除。硬约束仍存在一定内部残差和温度预测误差，说明严格施加初边值条件不能替代方程近似能力。

4.3. 内部配点数量敏感性

在保持网络层数、学习率、随机种子和 1400 次更新不变的前提下，将硬约束 PINN 的内部配点由 256 增至 512 和 1024。表 3 及图 6 给出了相应总体误差与训练耗时。适当增加配点能够更充分地覆盖时空区域，但配点增加也提高了自动微分计算量；512 到 1024 的误差改进已明显减弱。这表明固定训练预算下，单纯增加配点不保证与计算成本成比例的收益。

Table 3. Effect of interior collocation count for the hard PINN
表 3. 硬约束 PINN 内部配点数对计算结果的影响

内部配点数	相对 L_2 误差	最大绝对误差	训练耗时/s
256	0.002315	0.006257	3.92
512	0.001702	0.004164	4.65
1024	0.001676	0.003981	6.56

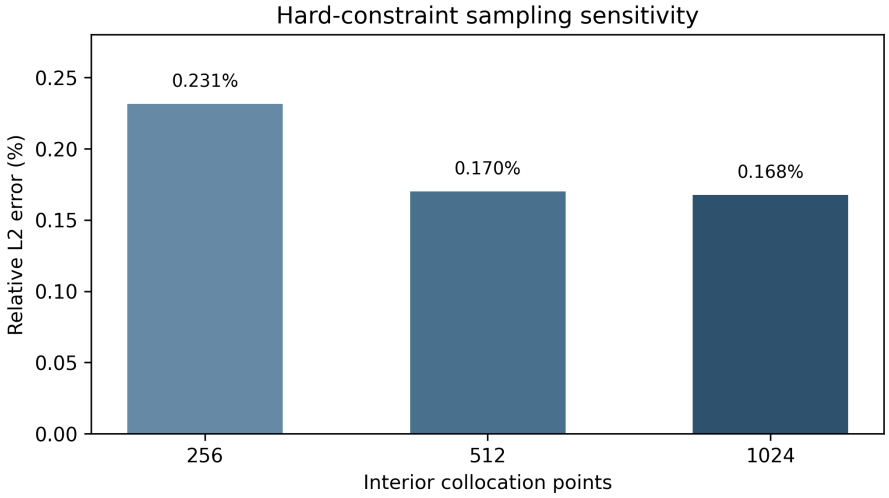


Figure 6. Hard-PINN relative L_2 errors for different collocation counts
图 6. 不同内部配点数下硬约束 PINN 的相对 L_2 误差

4.4. 随机初始化与结果稳定性

固定 512 个内部配点及全部优化设置，将随机种子分别设置为 2026、2027 与 2028，重新初始化网络并生成各自扰乱后的 Sobol 配点。因为随机种子同时影响权重初始化与采样点位置，表 4 刻画的是整套随机训练流程的变动，而不是只改变权重的单因素实验。

三次独立训练中，软约束 PINN 相对 L_2 误差平均为 1.40% (样本标准差 0.31 个百分点)，硬约束为 0.1500% (样本标准差 0.0223 个百分点)；对全部三个种子，硬约束方案均表现出较小的误差，见图 7。不

过，三个种子样本量有限，不能由此宣称结果在不同方程、网络规模或优化器上具有统计意义的普适优势。

Table 4. Seed-dependent errors for 512 collocation points
表 4. 512 配点下不同随机种子的预测误差

随机种子	软约束 L_2	硬约束 L_2	软约束残差	硬约束残差
2026	0.015720	0.001702	0.07280	0.02431
2027	0.010395	0.001260	0.05725	0.01747
2028	0.015939	0.001538	0.06206	0.02220
均值	0.014000	0.001500	—	—
样本标准差	0.003140	0.000223	—	—

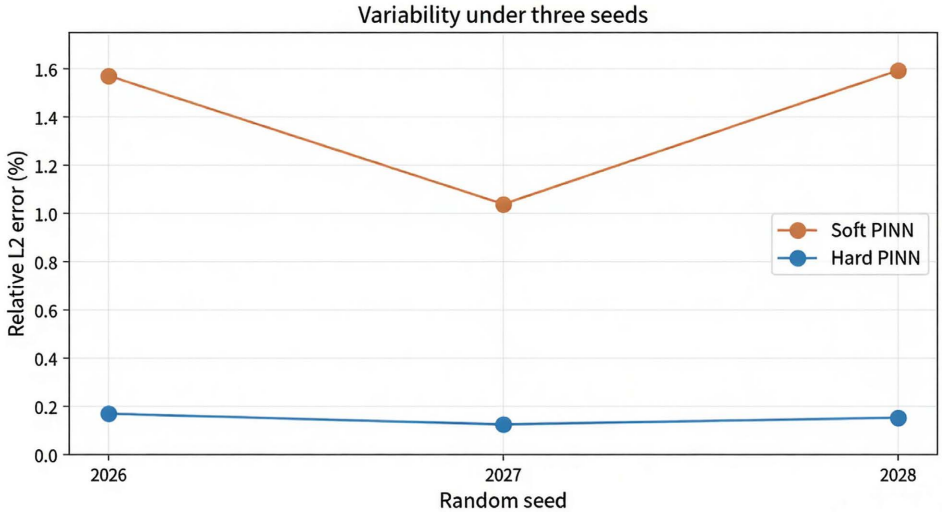


Figure 7. Variation of relative errors across three random seeds
图 7. 三种随机种子下预测相对误差的变化

4.5. 软约束损失权重的敏感性

Table 5. Sensitivity of soft-constraint PINN to the initial/boundary loss weight
表 5. 软约束 PINN 对初边损失权重的敏感性

权重 λ	相对 L_2 误差	初边最大违背量	PDE 残差 RMSE
0.1	0.03912	1.18×10^{-1}	1.26×10^{-2}
1.0	0.01858	7.69×10^{-2}	2.41×10^{-2}
10.0	0.01572	4.22×10^{-2}	7.28×10^{-2}
100.0	0.05206	1.43×10^{-2}	1.66×10^{-1}

为检验固定权重 $\lambda = 10$ 对软约束结果的影响，在保持网络结构、512 个内部配点、1400 步 Adam 更新与随机种子 2026 不变的前提下，将初值与边界损失的权重分别取 $\lambda = 0.1$、1、10、100 进行对照。表 5 显示，随着 λ 由 0.1 增至 10，相对 L_2 误差由 3.91%降至 1.57%，初边条件最大违背量由 0.118 降至 0.042；但 λ 进一步增至 100 时，初边违背量虽继续下降至 0.014，PDE 残差 RMSE 却由 0.073 升至 0.166，整体

相对误差反弹至 0.0521。这一非单调趋势表明，单一常数权重无法同时兼顾方程残差与初边条件的优化：权重过小会使初边条件欠拟合，权重过大则以牺牲方程残差精度为代价。本文 $\lambda = 10$ 的结果仅作为受控对照基准，不代表软约束 PINN 在最优调参下的性能；基于梯度流信息的自适应权重方法(如 Wang 等[4]提出的学习率退火，以及 McClenny 和 Braga-Neto 提出的自自适应权重[8])可能缓解这一固定权重折中，但未在本研究中实现。

4.6. 有限差分对照与耗散检验

表 2 显示，相同 101×101 时空网格上的显式有限差分方法相对 L_2 误差为 0.00137%，明显小于 PINN；完成 5000 个时间步的纯数值推进耗时约 0.024 s，而两种 512 配点 PINN 分别训练 4.36 s 和 4.65 s。上述比较的计时边界不同(训练阶段与单次前向求解阶段)，但足以说明在本研究的低维光滑问题上，神经网络方法并未带来更优的求解效率。

网格检验中，40、80、160 个空间间隔对应的 $t = 1$ 终点相对 L_2 误差依次为 2.21e−05、5.50e−06、2.69e−06。三组时间步长均满足显式稳定性条件；空间和时间步长同步变化，因而这里仅将其作为网格细化误差减小的证据，不把该组结果解释为纯空间二阶收敛阶的严格测量。

图 8 给出由数值温度场计算的 $E(t) = \int_0^1 u^2 \mathrm{d}x$ 的时间变化。三种数值方法的离散能量均随时间单调下降，与式(4)的理论耗散性质一致；但是能量单调下降只是必要的物理一致性检查之一，不能证明数值解处处满足控制方程。

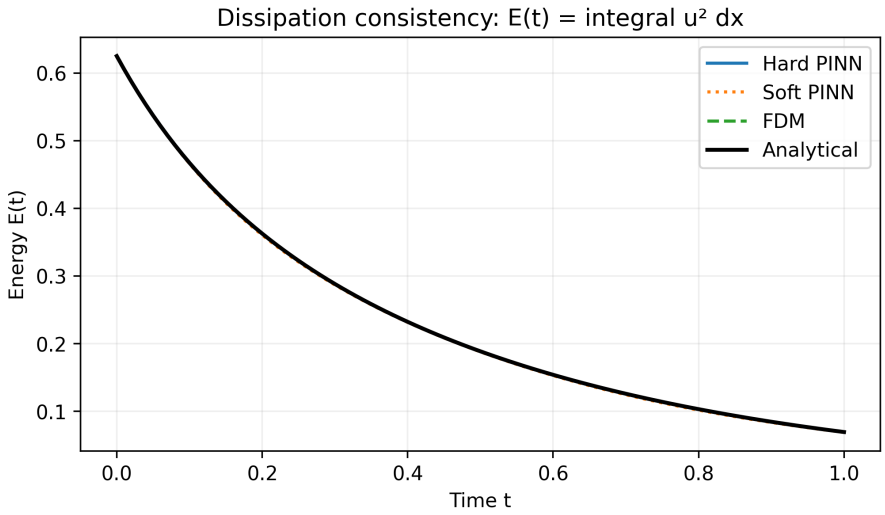


Figure 8. Decay of the squared-temperature integral in three solvers
图 8. 三种方法的平方温度积分随时间的衰减

5. 讨论

5.1. 硬约束为何改善本算例误差

软约束策略要求单一网络同时压低偏微分方程残差、初始温度误差以及两侧边界误差，三部分目标的梯度大小和收敛进程未必一致。硬约束策略把初边值条件转移到试探解的代数结构中，减少了需要依靠梯度迭代近似实现的条件数目，因此在有限训练步数下，网络更容易将有效拟合能力集中于控制方程。本算例的定量误差、初边值违背量及多个随机种子实验共同支持这一局部解释。

但“严格满足初边值条件”与“整体解的误差必然更小”并非数学等价关系。若问题含不连续系数、

强时间尺度分离、复杂几何或非齐次混合边界，硬约束试探函数的形式可能增加导数计算负担，也可能影响优化景观。对于难以构造精确试探函数的真实工程域，设计边界兼容函数本身就是一个需要研究的问题。

5.2. 硬约束构造方法的适用边界

本文式(7)所采用的硬约束构造本质上依赖两个初等乘子：时间因子 t 在 $t=0$ 时归零以自动满足初值条件，空间因子 $x(1-x)$ 在两端点归零以自动满足齐次 Dirichlet 边界。这一构造仅在齐次 Dirichlet 边界与规则矩形域下可写为初等解析形式，其适用边界需要明确说明。

首先，对于非零 Dirichlet 边界(如两端恒温 $u(0,t)=g_1(t)$、$u(1,t)=g_2(t)$ 且 $g\neq 0$)，上述空间乘子会把边界温度压至零，与给定边界值矛盾；此时需要将已知边界函数显式叠加到试探解中($u=g(t)\cdot$边界权函数$+D(x)\cdot N(x)$)，且 $g(t)$ 本身须已知并光滑可导。其次，对于 Neumann 边界($\partial u/\partial n=h(t)$)，乘子法约束的是 u 本身为零而非法向导数为零，需要对乘子求导构造或改用变分/弱形式，构造难度显著上升。再次，对于 Robin 混合边界(u 与 $\partial u/\partial n$ 的线性组合给定)和不规则非矩形区域，多项式乘子 $x(1-x)$ 不再在真实边界上为零，初等乘子法基本失效。

对于二维或任意形状区域，Sukumar 和 Srivastava [6]提出利用符号距离函数 $\varphi(x)$ ($\varphi=0$ 标识边界)作为通用乘子，使硬约束构造摆脱对规则几何的依赖；水平集函数与距离函数方法是当前推广硬约束至复杂域的主要技术路线。需要强调，本文硬约束相对于软约束的精度优势是在齐次 Dirichlet 规则域这一最易构造的场景下取得的；当边界条件或几何变复杂时，边界兼容函数本身的构造成本会上升，并可能影响自动微分的计算图与优化景观，本文结果外推到上述复杂情形时需要谨慎。

5.3. PINN 与传统数值方法的适用边界

在一维规则区域、已知初边值且已有稳定离散格式的正问题中，有限差分法的时间推进只需局部邻点运算，通常无需训练，因此在精度和时间上更具优势。PINN 的主要方法价值在于连续参数化表示、与零散观测数据融合、未知参数识别及更复杂约束的统一表达；上述潜在用途不是本文数值实验已验证的性能优势。

应区分“网络训练耗时”“网络训练后单次查询耗时”和“为新参数重新训练耗时”。本文只给出第一类与有限差分单次求解的计时，未进行多工况重复查询性能测试，也没有包含超参数搜索及不同硬件加速的影响，因此不把表 2 中的秒数作为普遍适用的性能比值。

5.4. 研究局限与后续工作

本研究属于无噪声、无热源、常系数且具有解析解的合成数值基准，没有实际传感器测量与材料实验。网络规模、初始温度模态、软约束权重、训练轮数及随机种子范围有限，也未引入 L-BFGS 优化、动态权重、残差自适应采样或傅里叶特征网络。因而所得结果可以复现本模型下的比较，不足以推广为“硬约束 PINN 普遍优于软约束 PINN”的结论。

在此基础上，可将模型拓展为时变热源、空间非均匀扩散率、Robin 边界、二维不规则区域以及带测量噪声的热扩散系数反演问题，并通过相同计算预算、相同评价网格和更充分的随机重复检验不同优化策略。这些问题更能体现物理模型与数据融合的实际价值。

6. 结论

(1) 对于本文双正弦初始温度的一维热传导基准，512 个配点和 1400 次 Adam 更新时，在固定初边损失权重 λ = 10 下，硬约束 PINN 相对误差为 0.1702%，低于软约束 PINN 的 1.572%；硬约束通过结构

设计满足已知初值和边界条件。

(2) 在 3 个随机种子下，硬约束 PINN 的平均相对 L_2 误差为 0.1500%，软约束为 1.40%；配点增多能降低测试误差，但边际改进随样本规模增加而减弱。两种 PINN 预测的能量积分均呈物理上合理的非增趋势。

(3) 对于本研究的低维规则算例，显式有限差分法在精度与计算时间上均优于 PINN，说明提出或采用神经网络数值方法时应充分披露传统基线。本文结果是对热方程初边值施加策略的可复现数值比较，而不是对神经网络求解器整体优越性的证明。

参考文献

[1] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E. (2019) Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, 686-707. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045

[2] Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S. and Yang, L. (2021) Physics-Informed Machine Learning. *Nature Reviews Physics*, **3**, 422-440. https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5

[3] Lu, L., Meng, X., Mao, Z. and Karniadakis, G.E. (2021) DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations. *SIAM Review*, **63**, 208-228. https://doi.org/10.1137/19m1274067

[4] Wang, S., Teng, Y. and Perdikaris, P. (2021) Understanding and Mitigating Gradient Flow Pathologies in Physics-Informed Neural Networks. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **43**, A3055-A3081. https://doi.org/10.1137/20m1318043

[5] Lagaris, I.E., Likas, A. and Fotiadis, D.I. (1998) Artificial Neural Networks for Solving Ordinary and Partial Differential Equations. *IEEE Transactions on Neural Networks*, **9**, 987-1000. https://doi.org/10.1109/72.712178

[6] Sukumar, N. and Srivastava, A. (2022) Exact Imposition of Boundary Conditions with Distance Functions in Physics-Informed Deep Neural Networks. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **389**, Article ID: 114333. https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114333

[7] LeVeque, R.J. (2007) Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems. Society for Industrial and Applied Mathematics. https://doi.org/10.1137/1.9780898717839

[8] McClenny, L.D. and Braga-Neto, U.M. (2023) Self-Adaptive Physics-Informed Neural Networks. *Journal of Computational Physics*, **474**, Article ID: 111722. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111722