

物理信息神经网络融入《数值分析》课程的教学改革探索

黄毅宁华*

广西民族大学, 广西南宁 530006

摘要: 人工智能驱动的科学计算 (AI for Science) 正在深刻重塑科学计算的研究范式, 以物理信息神经网络 (PINNs) 为代表的深度学习技术, 为偏微分方程的数值求解开辟了新途径。然而, 目前研究生水平的《数值分析》课程仍然主要侧重于有限差分法和有限元法等经典数值方法, 未能及时纳入前沿方法, 如使用神经网络求解偏微分方程, 导致教学内容与科学研究的最新进展之间存在显著差距。本文在系统分析研究生在《数值分析》课程中面临的教学挑战的基础上, 论证了将基于神经网络的偏微分方程求解方法整合到课程中的必要性和可行性。提出了教学内容的三个阶段渐进式重组: 经典基础、方法比较、智能解决方案, 并从理论教学、案例教学、评估和评价三个维度设计了教学改革的具体路径。

关键词: 数值分析; 神经网络; 偏微分方程; 物理信息神经网络

DOI: 10.64649/yh.shygl.issn3105-0085.202608010

0 引言

《数值分析》这门课程, 是把数学理论和工程实践连接起来的一座桥梁, 其主要目标在于引导学生们去运用各种数值方法来解决科学与工程当中的各类实际问题。在相当长的一段时间里, 本课程的教学工作已经逐步形成了一种相对稳定且较为成熟的教学范式, 是一种把数学理论作为基础、以经典算法为核心内容、再借助编程手段加以实现的范式^{[1][2]}。近年来, 以物理信息神经网络也就是 PINNs 为代表的这类深度学习方法, 在偏微分方程数值求解这一方面取得了具有突破意义的进展^[3]。PINNs 是把控制微分方程直接嵌入损失函数当中, 从而将优化过程、微分方程本身以及相关的物理定律这三者整合进一个统一的变分框架之中。与那些传统意义上的数值方法相比, 基于神经网络的求解方式并不需要进行网格离散化处理, 也能够较为有效地去处理高维情形下的问题, 同时还可以自然地观测所得的数据整合进来^[4]。

目前, 国内外众多大学都开始开设相关专业课程, 东南大学开设了一门《求解偏微分方程的深度学习方法》的博士选修课, 湘潭大学举办了“深度学习与偏微分方程求解”研究生暑期班^{[5][6][7]}。不过, 这些已有的教学探索, 大多是以单独设立专业课程的方式来推进的, 还没有系统地把相关内容融入传统的《数值分析》课程体系当中。学生在学习过程中, 往往倾向于把神经网络算法看作是一种彼此割裂的技术工具, 而没有充分意识到, 这些算法实际上只是整个数值方法体系其中的一个组成部分。因此, 怎样把神经网络用于求解偏微分方程这一

前沿方向, 系统化地纳入《数值分析》课程的教学安排当中, 进而推动教学思路从侧重离散方法逐步转向强调有机整合的方法路径, 已然构成了当前亟须加以应对的一项教学挑战^{[8][9]}。

本文基于第一手教学实践, 系统地探索了一种将基于神经网络的求解偏微分方程的方法整合到研究生水平的《数值分析》课程中的教学改革方法。这种方法包括课程内容的重组、教学方法的设计和评估机制的改革, 其目的是为 AI for Science 环境下面向计算数学的研究生课程的转型和升级提供参考。

1 课程融入的必要性与可行性分析

偏微分方程是描述客观物理世界规律的最重要的数学工具之一, 在电磁学、热力学、流体力学和量子力学等学科中有着重要的应用。传统的数值方法, 如有限差分法和有限元法, 在处理高维问题、复杂的域离散化以及时间迭代引起的误差累积时面临着许多挑战。

1.1 必要性: 三重驱动下的课程变革诉求

神经网络能够任意接近任何非线性函数, 因此它为求解微分方程提供了一种新方法。通过神经网络训练获得的近似解是连续函数, 随着问题维数的增加, 计算成本和内存需求的相应增加仍然相对较小, 从而有效地缓解了维数诅咒。这一进展意味着, 如果不将神经网络方法纳入课程, 学生对数值方法的知识将是不完整的。

目前, AI for Science 已成为全球科学研究竞争的前沿战场。在物理学、材料科学、生物学和工程学等众多领域, 研究人员越来越多地采用神经算子方法 (如 PINNs 和 DeepONet)

来解决正向和反向问题。社会对于研究生在数值计算方面所应具备能力的要求,已经不再局限于对经典算法的理解与实际实施层面,而是进一步转变为要求其能够把数值理论同智能技术有机结合起来,去应对那些具有跨学科属性、高维度特征以及强非线性特性的复杂问题。

研究生教育除了要开展知识传授方面的工作之外,还需要着力培养学生的学术判断能力以及创新思维能力。让学生有机会接触并运用神经网络来求解偏微分方程这个前沿方向,一方面可以拓展他们对于各类计算方法的整体认知视野,另一方面也有助于帮助他们深入理解科学计算范式在发展过程当中所呈现出的演进逻辑。无论是从基于网格的离散化方式转向函数近似手段,还是从依赖人工经验的手动设计路径逐步过渡到以数据为驱动的方法体系,这些转变过程都使得学生能够站在更为宏观和系统的层次上,去把握数值方法背后所蕴含的本质特征。

1.2 可行性:理论、工具与经验的支撑

PINNs的理论框架相对成熟,具有简洁优雅的核心概念。它将偏微分方程问题表述为 $L(x,u)=0$ ($x \in \Omega$)和边界条件 $B(x,u)=0$ ($x \in \partial \Omega$),其中神经网络 $\hat{u}(x)=N(x;\theta)$ 近似真实解,网络参数通过最小化包含控制方程残差和边界条件残差的损失函数来训练。该框架与传统的变分法和最小二乘法有着深刻的数学联系,从而提供了一座理论桥梁,促进了从数值分析课程到神经网络方法的自然过渡。

近年来,DeepXDE和Nvidia的PhysicsNeMo等开源库的出现大大降低了实现PINNs的障碍。学生只需几行代码即可构建和训练PINNs,而无需从头开始构建复杂的深度学习框架。这使得在有限的课时内进行使用神经网络解决偏微分方程的实践教学成为可能。

2 教学内容的重构设计

传统的《数值分析》课程内容主要涵盖经典模块,如误差分析、非线性方程求解、求解线性方程组的直接和迭代方法、插值和曲线拟合、数值微积分和求解常微分方程的数值方法。将基于神经网络的偏微分方程解整合到这个课程体系中不仅仅是增加一个新章节,相反,它需要对课程内容进行系统的重组。本文提出了一个三阶段递进的教学内容框架。

2.1 第一阶:经典方法奠基

本课程的前半部分依然会把教学重点放在经典数值方法的讲授方面,但与此同时,也应当为后续在整个教学过程所要展开的神

络方法打下必要的基础。具体来说,在开展有限差分法的教学活动时,教师需要引导学生去关注网格离散化的过程、代数公式的构建方式、求解问题所遵循的基本范式,以及这些方法本身所具有的若干局限性,比如维数灾难问题,还有在处理复杂几何区域时所面临的困难。而在讲授变分法与有限元法的过程中,则应着重阐释函数近似这一核心概念,也就是借助有限维函数空间当中的函数,来对无限维空间中所存在的真实解进行逼近。

2.2 第二阶:方法对比与范式转换

在完成经典方法教学后,将分配2~3个专用课时用于方法的比较分析和反思。这一阶段的核心教学目标是帮助学生了解从经典数值方法到神经网络方法的演变。具体的教学设计包括:(1)对有限差分法、有限元法和神经网络法在求解偏微分方程时采用的基本方法进行系统比较,特别是从离散方程到函数近似的范式转变;(2)分析神经网络方法的优点(无网格性、固有并行性、易于处理高维问题)和局限性(训练困难、可解释性差、理论保证不足);(3)引导学生思考这两种范式代表的是替代关系还是互补关系。

2.3 第三阶:神经网络求解PDE的核心方法

作为本模块当中一个极为关键的组成部分,需要把PINNs的基本原理进行系统性的教学工作。教学过程当中的几个重点内容包括:(1)把偏微分方程或者偏微分方程组所对应的残差,当作损失函数其中的一个构成部分来使用;(2)借助自动微分这个技术手段,来完成网络输出相对于其输入的各阶偏导数的计算工作;(3)对损失函数进行设计,也就是构建起控制方程残差损失、边界与初始条件损失以及数据损失这三类项的加权组合形式;(4)有关模型训练的具体策略以及超参数调整方面的相关技术方法。

3 教学方法与评价改革

利用神经网络求解偏微分方程涉及三个知识领域的交叉,即神经网络理论、优化理论与偏微分方程理论。

3.1 双线并行的理论教学

为缓解学生在学习过程中的认知压力,课程设计采用了双线并行的教学模式。该方法以问题为导向为核心思路,梳理了各类方法的适用性及实施步骤,而理论主线紧密围绕各方法的内容展开,并辅以相应的理论基础,包括一般近似定理、PINNs误差分析及其他相关知识。

两条路径的并行推进,既保障了教学的可操作性,又满足了研究生阶段所需的理论深度。

3.2 对比驱动的案例教学

案例教学在本次课程改革当中发挥着十分关键的支撑性作用。所有用于教学的案例均提供了经典的数值解法以及神经网络解法,并且借助对比分析的方式,来引导学生对这两种求解方法各自所具有的优势与彼此之间的差异形成较为全面的理解。比如,在讲解一维导热方程的求解方法这一部分内容时,首先会把有限差分法的整个求解过程进行系统性回顾,接着再把PINNs的求解过程予以具体演示,最后则是在设定相同精度要求的前提下,对两种方法在计算效率、编程复杂程度以及实际适用范围这三个方面展开细致比较。

3.3 学训一体的实践教学

实践教学所采用的是一种将课堂代码演示、课后编程作业以及综合实践项目三者有机整合起来的教學模式。在课堂代码演示这个环节当中,会把DeepXDE或者PyTorch当作主要工具来使用,现场展示PINNs的构建过程以及训练过程。课后编程作业则被设计成一项具有转化

性质的任务,也就是说,学生需要基于所提供的代码框架,去完成网络结构的修改、损失函数权重的调整,或者测试方程的替换等工作。

4 结语

随着人工智能技术不断进入到科学研究的各个领域当中,科学计算这一方向的研究模式正在发生比较深刻的变化过程。面向研究生所开设的《数值分析》这门课程,不能只是把教学内容局限在传统的数值方法这个范围之内,而应当结合学科当前的发展趋势与实际走向,把像借助神经网络来求解偏微分方程这样的前沿研究方向,有步骤、有层次地纳入现有的教学体系当中去。本文所提出的三阶渐进式教学内容重构方案,以及对比驱动的教学方法,其主要目的在于推动教学内容从简单拼接、彼此割裂的状态,转向一种相互关联、内在统一的整合方式,从而帮助学生在扎实掌握经典解题方法的基础之上,逐步建立起对于智能解题方法的基本认识,并切实提高他们在实际问题中运用这类方法的能力。

参考文献:

- [1] 付涛,陈久朋,王森,等.数值分析课程与人工智能技术深度融合的教学改革探索[J].高教学刊,2025,11(30):156-161.
- [2] 张永金,王静,李五明.AI赋能数值分析教学改革探索与实践——以理工科研究生数值分析为例[J].教育进展,2025,15(12):187-194.DOI:10.12677/ae.2025.15122263.
- [3] 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.
- [4] 吴奕飞,张晓岩,石兴云,等.双向赋能:AI-PDE交叉课程教学新范式探索[J].数学之友,2026,40(3):71-73.
- [5] 东南大学.“求解偏微分方程的深度学习方法”课程简介[EB/OL]:https://math.seu.edu.cn/_upload/article/files/3e/ca/dda23a7a4e838101851035a992fa/56ef97d1-4175-453e-b20d-e948af81efab.pdf.
- [6] 郑海艳,黎健玲,邓镇国.人工智能+新工科背景下“数值分析”课程教学改革探索[J].Advances in Education, 2025, 15.DOI:10.12677/ae.2025.155819.
- [7] 湘潭大学.“深度学习与偏微分方程求解”研究生暑期学校招生简章[EB/OL]:<https://yjsc.xtu.edu.cn/info/1014/9932.htm>.
- [8] 殷图源,魏大盛,王海辉.有限差分与人工神经网络方法求解偏微分方程解对比及定性分析[J].应用数学进展,2020,9(12):8.DOI:10.12677/AAM.2020.912260.
- [9] 张弘钱旭宋松和.“偏微分方程数值解”课程教学实践[J].新课程教学(电子版),2020,000(024):P.66-67.

作者简介:黄毅(1989.08—),男,壮族,广西贵港人,博士,副教授,研究方向:计算物理。宁华(1982.09—),女,壮族,广西南宁人,博士,教授,研究方向:凝聚态物理。

项目信息:广西研究生教育创新计划项目,广西学位与研究生教育改革课题,JGY2026125和JGY2025126。