扩散控制的液滴生长的物理信息神经网络求解方法

Pavel Gol'din[1] 和 Gennady Y. Gor[2], a)1)*Alpha SystematiX*2)新泽西理工学院奥托·*H*·约克化学与材料工程系，
美国新泽西州纽瓦克市马丁·路德·金大道*323*号，邮编*07102*

（*电子邮箱：gor@njit.edu）

（日期：2026年1月9日）

本文采用物理信息神经网络（PINN）方法，研究具有移动边界的球形液滴的扩散控制生长。控制扩散方程与界面质量平衡相耦合，并将液滴半径作为随时间变化的附加可训练函数。对于各种初始液滴半径，物理信息神经网络都能准确再现自相似生长定律和浓度分布，展现出向渐近扩散区间收敛的特性。所提出的方法为求解移动边界扩散问题提供了灵活且计算高效的框架，并可方便地扩展以纳入其他物理效应。

arXiv:2601.05042v1 [physics.flu-dyn] 8 Jan 2026

a)http://porousmaterials.net

一、引言

新相粒子的扩散驱动生长是多种物理和化学体系中的基本过程，包括蒸气-气体混合物中的气溶胶形成，以及熔体或溶液中的结晶。对此类过程的经典理论描述通常基于球对称假设。即使在这些假设下，此类问题的解析和数值求解仍颇具挑战。原因在于，移动边界——即新相生长中粒子的表面——上施加了斯特藩边界条件。

具体而言，我们关注蒸气-气体介质中扩散控制的液滴生长问题[1]，，这是大气化学与物理学中的一个核心问题[2]。如果假设初始浓度均匀，且液滴的初始半径趋于零，$R(0) = 0$，同时扩散系数为常数，那么扩散问题的解可写成解析自相似形式[3]，，由此得到液滴半径 $R(t) \propto \sqrt{t}$的简单时间依赖关系。此前已针对熔体和溶液中的结晶问题证明了这类自相似解[4,5]。

一旦放宽上述任何假设，例如引入有限初始半径，或认为扩散系数随浓度变化，自相似性便会消失，问题的求解也因此面临挑战。解析解通常依赖准稳态近似[1,6]。采用有限差分技术求数值解同样具有挑战性，因为这需要使用自适应网格等方法。[7]。

物理信息神经网络（PINNs）为求解此类问题提供了一种替代性且高度灵活的框架[8–10]。在物理信息神经网络方法中，神经网络用于近似浓度，而控制方程（偏微分方程）以及边界条件和界面动力学则通过损失函数施加。与基于网格的数值方法不同，物理信息神经网络能够处理移动边界、不连续性和耦合非线性动力学，而无需显式离散化。此外，它们还允许直接优化其他未知量，例如液滴半径 $R(t)$，并同时优化浓度分布。

在本研究中，我们将物理信息神经网络方法应用于 Adzhemyan 等人最初研究的经典扩散控制液滴生长问题。[3]在不假设自相似性的情况下，神经网络“学习”浓度分布以及液滴半径随时间的演变。值得注意的是，训练后的物理信息神经网络能够再现自相似标度 $R(t) \propto \sqrt{t}$，并给出与解析解一致的浓度分布，即使初始半径有限也是如此。这

表明，物理信息神经网络不仅能将已知解析结果作为涌现特征加以恢复，还能将其拓展至解析方法失效的情形，为研究具有移动边界的扩散过程提供统一的数据驱动框架。

II. 理论背景：扩散控制的液滴生长

过饱和蒸气-气体混合物中的液滴生长是一个经典的扩散控制过程。在扩散限制区，从蒸气向液滴表面的质量传输速度远慢于凝结的界面动力学。因此，周围介质可用球对称条件下的扩散方程描述，

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial n}{\partial r}\right), \tag{1}$$

边界条件为

$$n(R(t),t) = n_{\mathrm{s}}, \qquad \lim_{r\to\infty} n(r,t) = n_0, \tag{2}$$

其中，$R(t)$ 为液滴半径，D 为扩散系数，n_{s} 和 n_0 分别为液滴表面和体相中的蒸气浓度（数密度）。液-汽界面的运动由表面质量守恒（斯特藩条件）决定，

$$(n_{\mathrm{l}} - n_0)\,\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} = D\left.\frac{\partial n}{\partial r}\right|_{r=R(t)}, \tag{3}$$

其中，n_{l} 为液相的数密度。

我们引入无量纲浓度差

$$\phi(r,t) \equiv \frac{n(r,t) - n_{\mathrm{s}}}{n_0 - n_{\mathrm{s}}}. \tag{4}$$

我们还引入一些特征长度尺度 ℓ，以及相应的时间尺度 $t_0 \equiv \ell^2/D$。我们将使用以下无量纲变量来重写该问题：

$$\tilde{R} \equiv R/\ell \qquad \tilde{r} \equiv r/\ell \qquad \tilde{t} \equiv t/t_0. \tag{5}$$

将方程 4 和 5 代入方程 1，得到

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}}\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{r}}\right), \tag{6}$$

边界条件为

$$\phi(\tilde{R}(\tilde{t}),\tilde{t}) = 0, \qquad \lim_{\tilde{t}\to\infty} \phi(\tilde{r},\tilde{t}) = 1, \tag{7}$$

and

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{R}}{\mathrm{d}\tilde{t}} = a \left.\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{r}}\right|_{\tilde{r}=\tilde{R}(\tilde{t})}, \tag{8}$$

其中

$$a \equiv \frac{n_0 - n_\mathrm{s}}{n_1 - n_0}. \tag{9}$$

遵循 Adzhemyan 等人[3], 的方法，可以引入一个无量纲变量

$$\rho \equiv \frac{r}{R(t)} = \frac{\tilde{r}}{\tilde{R}(\tilde{t})}, \tag{10}$$

该变量是以瞬时液滴半径归一化的径向坐标，因此 $\rho = 1$ 对应于移动界面。将式（10）代入式（6），得到常微分方程

$$\phi''(\rho) + \frac{2}{\rho}\phi'(\rho) + b\rho\phi'(\rho) = 0, \tag{11}$$

其中 b是待定常数。要求相似形式（10）对所有t均成立，即可得到相应的液滴半径增长定律:

$$\tilde{R}^2(\tilde{t}) = 2b\tilde{t}. \tag{12}$$

因此，液滴半径按 $R(t) \propto \sqrt{t}$的规律缩放,¯这是扩散限制传输的直接结果。

该问题的自相似解为[3–5]:

$$\phi(\rho) = \frac{b}{a}\int_1^\rho \frac{\mathrm{d}x}{x^2}\exp\left[-\frac{b}{2}(x^2-1)\right] \tag{13}$$

其中，参数 b 由斯特藩条件（3）唯一确定。将自相似形式（公式 13）代入斯特藩条件，可得到参数 b所满足的以下隐式关系:

$$a = b\int_1^\infty \frac{\mathrm{d}x}{x^2}\exp\left[-\frac{b}{2}(x^2-1)\right]. \tag{14}$$

尽管这一自相似解优雅且具有直观的物理意义，但它依赖于若干限制性假设：(i) 初始液滴半径趋近于零，$R(0) = 0$；(ii) 初始

浓度均匀；(iii) 扩散系数D 为常数。然而，在实际系统中，初始半径是有限的，早期瞬态过程并不具有自相似性，且传输系数可能取决于温度或浓度[1]。在这些情况下，不存在解析解。在接下来的章节中，我们将展示，物理信息神经网络（PINN）无需显式施加自相似解，即可恢复该解（方程 13）；它还可以将分析扩展到自相似性并不严格适用的情况，例如初始半径有限的情形。

III. 物理信息神经网络

物理信息神经网络（PINN）通过将控制物理定律嵌入神经网络的结构中，已成为求解偏微分方程（PDE）的一种通用框架[8–10]。在其标准形式中，神经网络 $\phi(\mathbf{x},t;\,\theta)$ 由可训练权重 θ 参数化，用于近似偏微分方程的解。网络接收空间和时间坐标作为输入，并输出相应的剖面值（例如浓度、温度或位移）。PINN 损失函数并非仅最小化由数据定义的损失，而是将控制方程本身的残差纳入其中，从而确保预测解在整个区域内都满足物理规律。

对于形式如下的一般偏微分方程

$$\mathcal{N}[\phi(\mathbf{x},t)] = 0,$$

残差 $\mathcal{R}(\mathbf{x},t) = \mathcal{N}[\phi(\mathbf{x},t)]$通过自动微分计算，并纳入总损失函数：

$$\mathscr{L} = \lambda_{\mathrm{PDE}}\langle|\mathscr{R}(\mathbf{x},t)|^2\rangle + \lambda_{\mathrm{BC}}\langle|\phi-\phi_{\mathrm{BC}}|^2\rangle + \lambda_{\mathrm{IC}}\langle|\phi-\phi_{\mathrm{IC}}|^2\rangle.$$

这些项分别对应偏微分方程残差、边界条件（BC）和初始条件（IC），而 λ_i 是加权系数。最小化该损失函数可促使网络趋向于同时满足物理约束和任何可用数据的解。这种方法无需进行空间或时间离散化，并已成功应用于广泛的稳态和瞬态问题，包括热传导[11]，波传播[12,13]，和流体动力学[14,15]。

尽管具有很大的灵活性，标准的物理信息神经网络表述假设计算域及其边界是固定的，并且可以预先确定。因此，物理信息神经网络在处理具有静止边界或预设边界运动的问题时表现良好，但当

区域本身随时间演化时，便会面临重大挑战。扩散控制相变，例如过饱和蒸气中液滴的生长，正属于后一类问题：液体与蒸气相之间的移动边界 $r = R(t)$ 必须与浓度分布同时确定。该界面的动力学取决于液滴表面处的浓度梯度，从而在偏微分方程与控制 $R(t)$ 的附加常微分方程（ODE）之间引入了非线性耦合。

在此类情况下，经典的物理信息神经网络（PINN）方法变得不再适用，因为它无法在训练过程中直接表示或更新未知的边界位置。为克服这一局限，我们扩展了标准的物理信息神经网络表述，将液滴半径 $R(t)$ 视为由一组可学习参数表示的可训练函数。$R(t)$ 的演化通过由界面质量平衡条件推导出的附加损失项加以约束。这一修改使网络能够在单一优化框架内，以自洽的方式同时学习扩散分布和移动边界动力学。如下所示，这种广义物理信息神经网络不仅能够复现 Adzhemyan 等人的解析解自相似解，而且对于有限初始半径和瞬态非自相似状态同样有效。

A. 实现细节

为求解具有移动边界的扩散控制的液滴生长问题，我们采用了改进的物理信息神经网络（PINN）表述，使其能够同时学习扩散分布和液滴半径的演化。虽然数值解使用无量纲变量 $\tilde{R}$、$\tilde{r}$ 和 $\tilde{t}$，但为简洁起见，下面将省略波浪号。无量纲浓度分布 $\phi(r,t)$ 由一个全连接前馈神经网络（记作 PhiNet）表示，该网络以径向坐标 r 和时间 t 为输入，并输出相应的 ϕ 值。该网络包含四个隐藏层，每层有 15 个神经元，并采用双曲正切（tanh）激活函数，从而提供自动微分所需的平滑性和可微性。

与所有区域边界均固定的传统物理信息神经网络不同，本文的公式中引入了一组额外的可训练参数，用于表示离散时间节点处的液滴半径 $R(t)$。这些参数记为 $R_i \equiv R(t_i)$，并与神经网络权重一起进行优化。在训练过程中，通过对相邻时间节点之间进行线性插值，得到中间时刻的半径，从而确保界面位置连续演化

。这种处理方式将移动边界有效地嵌入学习过程中，无需显式进行前沿跟踪或重新网格划分。

损失函数结合了若干具有物理依据的项：

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\mathrm{PDE}} + \mathscr{L}_{\mathrm{IC}} + \mathscr{L}_{\mathrm{BC}} + \mathscr{L}_{R(t)} + \mathscr{L}_{R_0}. \tag{15}$$

其中，$\mathscr{L}_{\mathrm{PDE}}$ 用于在球坐标下强制满足扩散方程（式 6），

$$\mathscr{L}_{\mathrm{PDE}} = \left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)^2 \right\rangle,$$

其中，尖括号表示对时空域内的配置点（r,t）取平均。项 $\mathscr{L}_{\mathrm{IC}}$ 和 $\mathscr{L}_{\mathrm{BC}}$ 分别对应初始条件和边界条件。移动界面处的条件表示为 $\phi(R(t),t) = 0$，而初始浓度分布满足 $\phi(r,0) = 1$。

该 formulation 的关键组成部分是项 $\mathscr{L}_{R(t)}$，它根据界面通量条件（式 8）约束液滴半径动力学。实际计算中，在瞬时界面位置 $r = R_i$ 处求导数 $\partial\phi/\partial r$，并通过相邻时间节点之间的有限差分近似 $R(t)$ 的时间导数。偏微分方程残差与界面条件之间的这种耦合，确保液滴的增长率与其表面的扩散通量一致。

最后一项，$\mathscr{L}_{R_0} = (R(0) - R_0)^2$，用于约束给定的初始半径。使用 Adam 优化器，通过同时调整神经网络权重和半径参数来最小化总损失 $\mathscr{L}$。训练过程中，采用自动微分计算 $\phi(r,t)$ 的空间导数和时间导数，从而无需显式离散化即可准确地约束扩散方程。

这种表述使神经网络能够自洽地“发现”浓度分布和液滴半径随时间的演化。值得注意的是，尽管没有显式施加自相似性，训练后的物理信息神经网络仍能重现 Adzhemyan 等人解析理论预测的自相似标度 $R(t) \propto \sqrt{t}$。此外，该方法对于有限初始半径和非自相似瞬态仍然稳健，展现了其将经典扩散控制生长模型推广到严格自相似性假设之外的能力。

1. 训练算法

所提出的物理信息神经网络的训练过程可概括如下：

1. 在初始化浓度分布 θ对应的神经网络参数 ϕ（r, t; θ）。

2. 定义时间节点 $t_i \in [0,1]$ 处可训练的离散半径值 $R_i = R(t_i)$。

3. 对于每个训练轮次：

(a) 在区域 $r \in [R(t), R_{\max}]$ 中生成配置点 (r,t)。

(b) 计算扩散方程的偏微分方程残差：

$$\mathscr{R}_{\mathrm{PDE}} = \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r}.$$

(c) 计算以下各项对应的损失：

- 偏微分方程残差（$\mathscr{L}$偏微分方程），
- 边界条件和初始条件（$\mathscr{L}$边界条件, $\mathscr{L}$初始条件），
- 半径动力学：

$$\mathscr{L}_{R(t)} = \left\langle \left(\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} - a \frac{\partial \phi}{\partial r}\Big|_{r=R(t)} \right)^2 \right\rangle,$$

- 以及初始半径约束（$\mathscr{L}_{R0}$）。

（d）构建总损失：

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\mathrm{PDE}} + \mathscr{L}_{\mathrm{IC}} + \mathscr{L}_{\mathrm{BC}} + \mathscr{L}_{R(t)} + \mathscr{L}_{R_0}.$$

（e）更新 使用 Adam 优化器通过梯度下降同时优化 θ 和所有 R_i。

4. 继续训练，直到总损失 $\mathscr{L}$ 降至 10^{-3} 以下。

收敛后，网络得到的浓度分布 $\phi(r,t)$ 和液滴半径$R(t)$ 与扩散方程和界面通量条件一致。学习得到的半径演化呈现出自相似标度 $R(t) \propto \sqrt{t}$，这证实了物理信息神经网络在未显式假设自相似性的情况下，自洽地恢复了 Adzhemyan 等人的解。

2. 训练设置

所有计算均使用 PyTorch 框架完成，并对空间变量和时间变量启用了自动微分。在每次实验中，浓度分布$\phi(r,t)$ 由一个全连接神经网络表示，而液滴半径 $R(t)$ 则参数化为定义在均匀时间网格上的一组可学习值 $R_i = R(t_i)$。网络参数和半径值通过 Adam 优化器联合优化，学习率为 10^{-4}。

空间域截断于$R_{\max} = 17$，该值足够大，使浓度分布趋近于其远场分布值；因此，该区域实际上代表无限介质。时间区间 $[0,1]$ 被离散为$N_t = 25$ 个均匀间隔的节点，对应一组可学习的半径值$R(t_i)$。这一节点数既提供了足够的灵活性以解析界面的时间演化，又使可训练参数的数量保持适中，并确保优化过程稳定。

每个训练轮次中，均采样 1024 个配置点（r,t），以施加扩散方程约束。结果表明，这种采样密度能够可靠地控制偏微分方程残差，同时不会带来显著的计算开销。此外，还生成了额外的点集，以施加初始条件 $\phi(r,0) = 1$ 和界面边界条件 $\phi(R(t),t) = 0$。将连接 $\mathrm{d}R\,\mathrm{d}t$ 与$r = R(t)$处浓度梯度的界面质量平衡条件（式 8）作为单独的损失项纳入模型，使网络能够自洽地学习界面运动。针对多个不同的初始半径R_0 进行训练，以研究瞬态增长行为对初始液滴尺寸的依赖性。每次训练最多进行 7.5×10^4 个训练轮次，不过通常在总损失降至 2×10^{-3}以下后即可提前收敛。所有计算均在标准台式 CPU 上完成，表明即使不使用 GPU 加速，所提出的物理信息神经网络表述仍具有较高的计算效率。

IV. 结果与讨论

图 1 展示了训练过程中各项损失的变化。偏微分方程残差、边界条件项和初始条件项在多个数量级上稳步下降，而用于约束界面半径动力学的辅助损失也呈现出类似趋势。经过约 2×10^3 个训练轮次后，所有损失项均降至 10^{-3} 以下，总损失趋于平稳，这表明

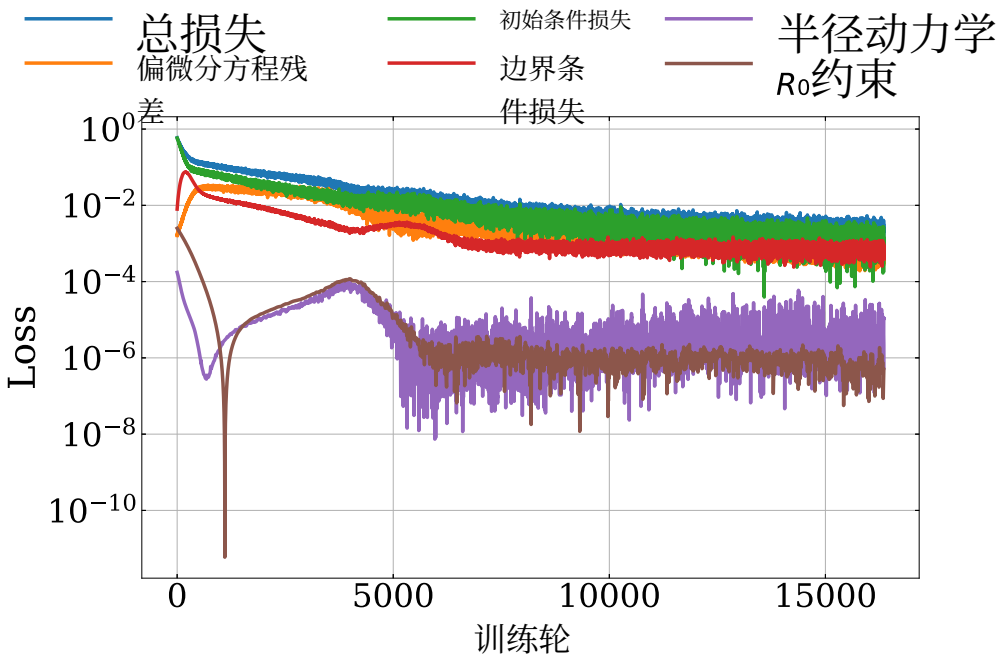


图1. 物理信息神经网络优化过程中的训练损失分量。偏微分方程残差、初始条件和边界条件损失，以及半径动力学约束均在训练过程中单调下降。当所有分量达到 10^{-3}–10^{-5} 水平后，总损失趋于稳定，表明物理信息神经网络同时满足了扩散方程、界面条件以及液滴半径的演化定律。

模型同时满足了扩散方程、界面条件以及学习得到的液滴半径轨迹。所有损失项的权重均设为相同。对于所研究的问题，优化过程表明所有约束都稳定且同步收敛，这说明无需进行额外的损失重加权。这种稳定化与学习得到的半径和浓度分布中呈现的正确自相似生长定律相吻合，如图 2、图 3 和图 4 所示。

图2展示了若干不同初始半径R_0下液滴半径的演化。尽管各条轨迹从不同的初始尺寸出发，后续增长会迅速趋近于共同的扩散状态。在所有情况下，数值解均收敛于解析预测$R(t)= \sqrt{2bt}$，该预测对应于初始半径趋于零时得到的自相似极限（公式12）。

—

这一行为反映了这样一个事实：项 R_0^2 仅影响短时动力学：它会使 $R^2(t)$ 的早期演化发生水平位移，但不会改变长时增长

率。瞬态阶段结束后，界面运动完全由扩散控制，解进入普适的自相似区域。对于所有测试的 R_0，物理信息神经网络轨迹与解析曲线高度吻合，这表明该网络正确捕捉了扩散分布和移动边界动力学，并在未明确施加自相似生长定律的情况下恢复了预期的自相似生长定律。

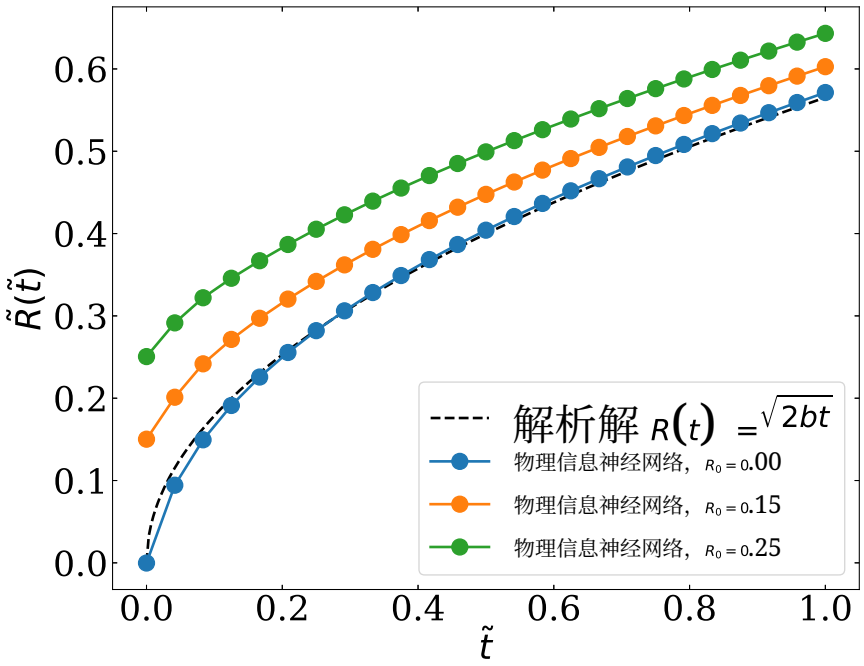


图2. 对多个初始半径R_0下液滴半径演化的物理信息神经网络预测。模型参数：$a = 0.1$；对应的值 $b = 0.159$。

图4中的多面板比较展示了对于不同初始液滴半径R_0 和约化时间 $\tilde{t}$，物理信息神经网络预测的浓度分布如何趋近于自相似分布。对于每一组($R0$，$\tilde{t}$)，物理信息神经网络解（实线）与解析参考曲线（虚线）在整个外部区域 $\tilde{r} > \tilde{R}(t)$内吻合极佳。在早期，当有限初始半径的影响仍然存在时，两种分布之间可见微小偏差，主要出现在移动界面附近。然而，随着$\tilde{t}$ 增大，这些差异迅速减小。对于所有三种初始半径，分布逐渐塌缩至相同的普适形状，证实了自相似区域的形成。总体而言，该图表明，物理信息神经网络能够准确重建浓度分布的空间结构及其向渐近自相似形式的收敛过程，而不受初始液滴尺寸影响。

对于所有测试的初始半径R_0，物理信息神经网络都能准确再现液滴生长动力学。随着

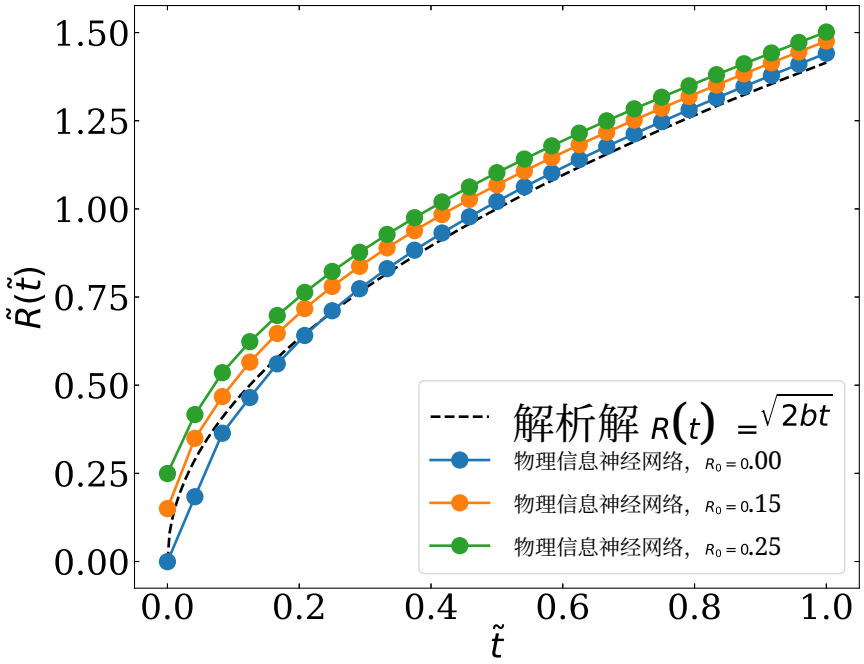


图3. 对于归一化情形 $b = 1$（对应于 $a = 0.3445$），物理信息神经网络解仍能再现整体扩散增长趋势，但与解析剖面的吻合程度略低于增长较慢的情形 $b = 0.159$。这是预期之中的，因为较大的 b 对应更快的界面运动和浓度分布中更强的梯度，从而使学习问题更具挑战性。

初始半径的影响逐渐减弱，如图2所示，学得的半径逐步趋近于渐近标度$R(t) \sim \sqrt{2bt}$。在整个时间区间内，物理信息神经网络轨迹与解析预测高度吻合。

图4比较了物理信息神经网络生成的浓度分布与自相似解。早期时刻，由于有限初始半径，界面附近会出现小幅偏差，但这些偏差很快便会消失。对于所有R_0 以及所有测试时刻，物理信息神经网络都能捕捉正确的空间结构，并收敛至普适自相似分布。总体而言，结果表明，即使初始液滴半径有限，所提出的物理信息神经网络表述仍能可靠地恢复正确的增长定律和浓度分布。

为量化整个时空域内所学习浓度分布的准确性，我们计算了物理信息神经网络预测与自相似解之间的绝对偏差，$|\varphi_{\mathrm{PINN}} - \varphi_{\mathrm{SS}}|$。所得误差图如图5所示。误差主要集中在早期时刻运动液滴界面附近的一狭窄区域内，此处浓度梯

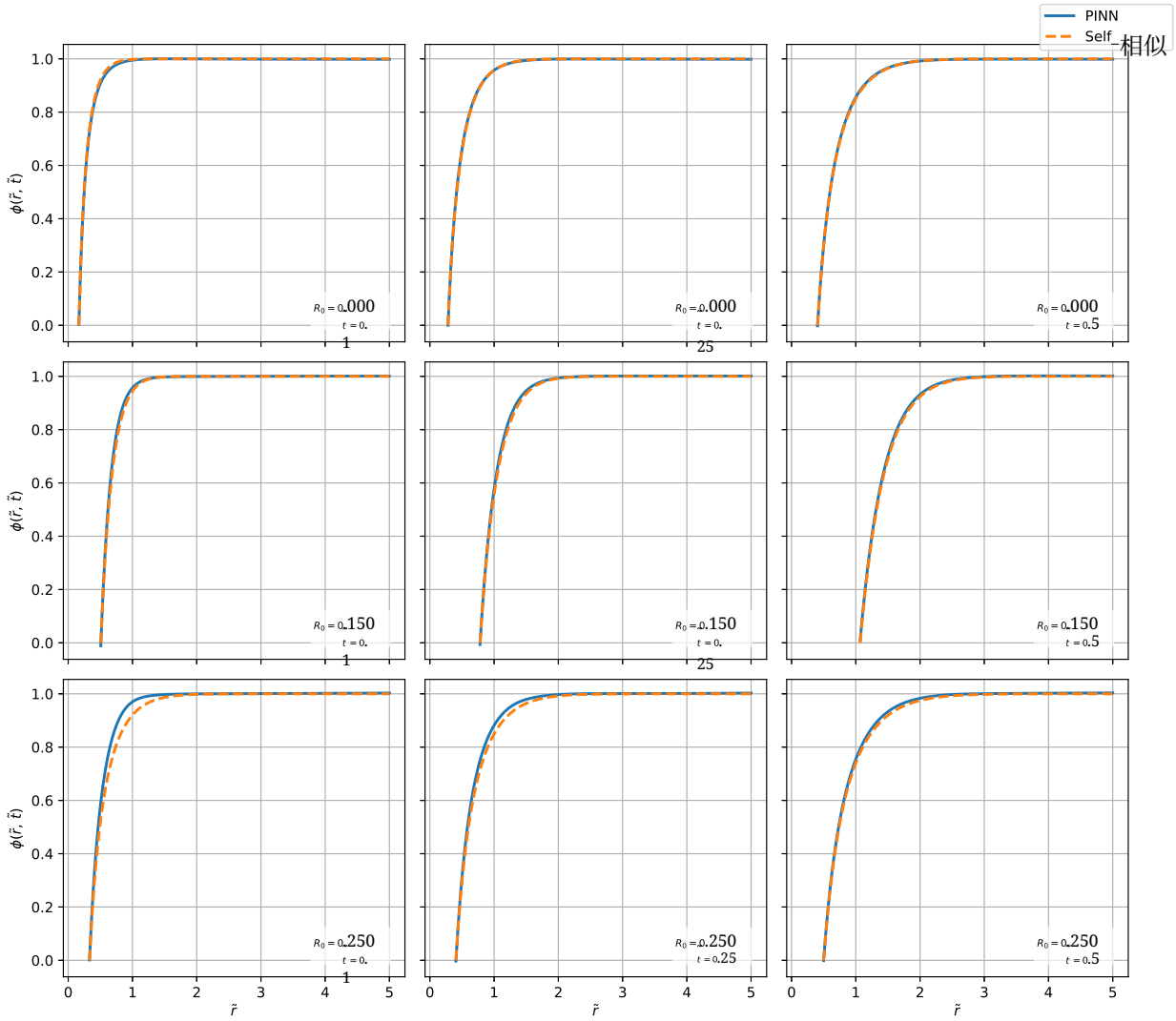


图 4. 不同初始半径 R_0 和约化时间 $\tilde{t}$下的物理信息神经网络解与自相似浓度分布。每个面板显示一对曲线：实线对应物理信息神经网络解，虚线表示解析自相似分布。

度最大；而远离前沿后误差迅速衰减，证实物理信息神经网络能够高保真地重构自相似浓度分布。

此处采用的物理信息神经网络框架的一个重要优势在于，它能够灵活地修改控制方程和边界条件。特别是，当前 formulation 可以自然扩展，以考虑移动界面处的其他物理效应，例如由表面张力（开尔文效应）引起的曲率相关边界条件[1,2]。在这种情况下，液滴表面的平衡浓度将成为局部曲率的函数，从而导致界面几何与

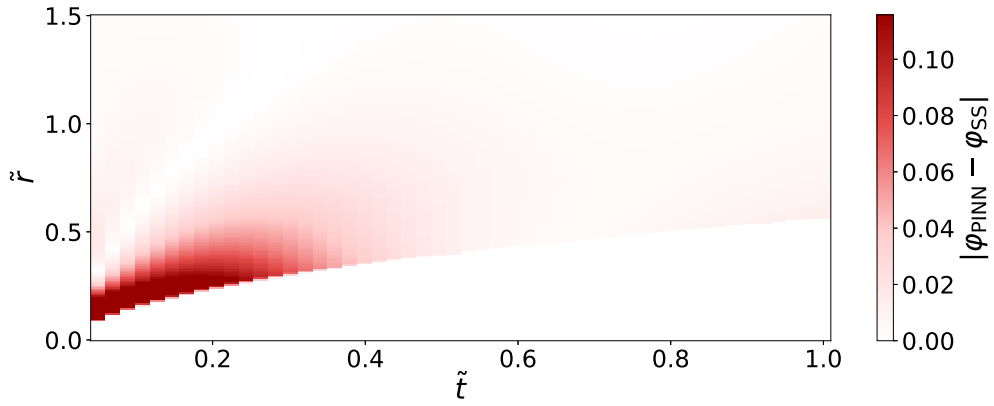


图5. 物理信息神经网络预测与自相似解之间的绝对误差时空图，$|\varphi_{\mathrm{PINN}} - \varphi_{\mathrm{SS}}|$，对应于$R_0 = 0$。误差在早期局限于移动界面附近，并在空间和时间上迅速衰减，表明物理信息神经网络能在区域的大部分范围内准确再现浓度分布。

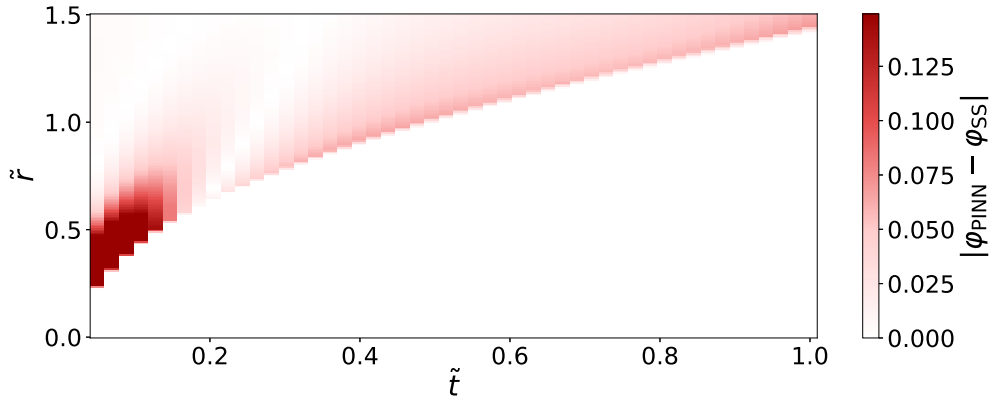


图6. 尽管$b = 1$对应的增长率较高，物理信息神经网络仍保持稳定，并能准确再现浓度分布的定性结构，误差热图印证了这一点。

扩散分布之间的非线性耦合 [3,6]。在传统数值格式中，纳入此类效应通常需要复杂的界面追踪和网格自适应 7；而在物理信息神经网络方法中，则可以直接通过在损失函数中加入额外项来实现。

V. 结论

在本研究中，我们证明了物理信息神经网络能够成功再现具有移动边界的球形液滴的经典扩散控制生长，

边界。在不预先施加任何自相似结构的情况下，物理信息神经网络表述恢复了液滴半径的扩散生长定律，以及解析解所预测的浓度分布空间结构。物理信息神经网络得到的浓度分布与解析自相似解在很宽的时间范围内高度吻合，而误差热图表明，差异主要局限于早期瞬态阶段和移动界面附近。我们还考察了对应于较大无量纲参数 b 的更快生长区间。虽然仍能恢复自相似行为，但在瞬态阶段，半径和浓度分布都呈现出略大的偏差，这反映了问题刚性的增加。尽管如此，整体吻合度依然稳健，表明所提出的方法在不同生长速率下均具有稳定性。研究结果凸显了物理信息神经网络在移动边界扩散问题中的灵活性，以及它们直接从控制方程和边界条件中捕捉涌现渐近区间的能力。该框架可自然拓展至更复杂的情形，包括曲率相关界面条件、非等温效应或耦合传输过程。这些方向为将物理信息机器学习应用于广泛的经典与现代问题开辟了道路，这些问题描述了新相颗粒的生长和演化界面。

数据可用性

用于生成　本文所述结果的代码已在 GitHub 上公开发布　.

致谢

作者感谢 Ilya Kremnev 博士促成了此次合作。

参考文献

[1]N. A. Fuchs，《气态介质中的蒸发与液滴生长》（Pergamon Press，1959年）。[2] J. H. Seinfeld 和 S. N. Pandis，《大气化学与物理学：从空气污染到气候变化》（John Wiley & Sons，2016年）。[3]L. T. Adzhemyan、A. N. Vasil'ev、A. P. Grinin 和 A. K. Kazansky，"蒸气-气体介质中成核并生长的液滴的蒸气扩散问题的自相似解"，《胶体杂志》**68**，381–383（2006年）。[4]C. Zener，"固溶体中球形析出物的生长理论"，《应用物理学杂志》**20**，950–953（1949年）。[5]F. C. Frank，"扩散控制的径向对称相生长"，《伦敦皇家学会会刊：A辑，数学与物理科学》**201**，586–599（1950年）。[6]A. P. Grinin、A. K. Shchekin、F. M. Kuni、E. A. Grinina 和 H. Reiss，"过饱和蒸气中液滴的非稳态扩散生长研究：移动边界与物料衡算的处理"，《化学物理学杂志》**121**，387–393（2004年）。[7]W. Shyy，《带移动边界的计算流体动力学》（CRC Press，1995年）。[8]I. E. Lagaris、A. Likas 和 D. I. Fotiadis，"用于求解常微分方程和偏微分方程的人工神经网络"，《IEEE神经网络汇刊》**9**，987–1000（1998年）。[9]M. Raissi、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，"物理信息神经网络：求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架"，《计算物理学杂志》**378**，686–707（2019年）。[10] G. E. Karniadakis、I. G. Kevrekidis、L. Lu、P. Perdikaris、S. Wang 和 L. Yang，"物理信息机器学习"，《自然综述：物理学》**3**，422–440（2021年）。[11]S. Cai、Z. Wang、S. Wang、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，"用于传热问题的物理信息神经网络"，《传热学杂志》**143**，060801（2021年）。[12]C. Song、T. Alkhalifah 和 U. B. Waheed，"使用物理信息神经网络求解亥姆霍兹方程的通用框架"，《国际地球物理学杂志》**228**，1750–1762（2022年）。[13]M. Rasht-Behesht、C. Huber、K. Shukla 和 G. E. Karniadakis，"用于波传播和全波形反演的物理信息神经网络（PINNs）"，《地球物理研究杂志：固体地球》**127**，e2021JB023120（2022年）。

[14]B. Steinfurth 和 J. Weiss，“使用物理信息神经网络同化三维分离流的平均实验数据”，《流体物理》**36**，015131（2024）。[15]Y. K. Rudenko、N. A. Vinnichenko、A. V. Pushtaev、Y. Y. Plaksina 和 A. V. Uvarov，“利用背景导向纹影测量和物理信息神经网络重建平均速度、压力和湍流黏度场”，《流体物理》**37**，095106（2025）。