用于动理学弛豫模型和硬球玻尔兹曼方程中强正激波的物理信息神经网络

Ehsan Roohi[a,*]

[a]马萨诸塞大学阿默斯特分校机械与工业工程系，美国马萨诸塞州阿默斯特

arXiv:2611.31996v1 [physics.flu-dyn] 24 Nov 2026

摘要

物理信息神经网络（PINN）在动理学方程中的应用大多局限于近平衡状态，且通常依据密度、速度和温度进行评估。本文采用仅以动理学方程训练、损失函数中不含参考数据的网络，求解稳态正激波，并对八个场进行评估：密度、速度、温度、热流、应力、一个三阶矩和两个四阶矩。网络通过一个无界带符号因子修正两个末态麦克斯韦分布的混合物，并采用精确流入条件；损失函数为三个范数下含守恒项的残差，通过 Adam 和自缩放拟牛顿方法最小化，并沿马赫数进行延拓。对于马赫数8时的硬球玻尔兹曼方程，在完成无参考测试后进行一次比较，八个场相对于直接模拟蒙特卡罗（DSMC）的最大相对 L^2 差异为0.19%；马赫数10时为0.34%。分布函数本身在速度空间的六个数量级范围内与参考结果吻合。对于 Bhatnagar–Gross–Krook（BGK）模型，马赫数50时的盲预测显示，密度、速度和温度的误差约为0.1%，但两个四阶矩的准确度有所下降。其原因被确定为一个在损失函数中权重较低的被动约化分布函数；提高该分布函数的权重并延长优化时间后，两个矩相对于离散速度解的误差在马赫数不超过70时均小于3.2%，马赫数100时为7.1%。Shakhov模型求解至马赫数20，氮气的 Rykov型模型求解至马赫数15。仅根据网络计算的精确热流平衡提供了一种无参考的准确度衡量方法：它能识别出马赫数较高时那些虽通过三项验收测试、但热流和厚度不准确的运行结果，无需参考数据，不过无法给出明确的阈值。

关键词： 物理信息神经网络（PINN）、玻尔兹曼方程、BGK 和 Shakhov 模型、Rykov型模型、激波结构、稀薄气体动力学

1. 引言

远离局部平衡态的气体由其分子速度分布函数 f 描述，它满足玻尔兹曼方程或其某种模型 [1, 2, 3]。工程上关注的量是 f的矩，也就是对分子速度进行积分所得的量。密度、速度和温度是最低阶矩；接下来是应力和热流；而应力和热流的平衡方程中包含一个三阶矩和两个四阶矩

*通讯作者电子邮件地址： roohie@umass.edu（Ehsan Roohi）

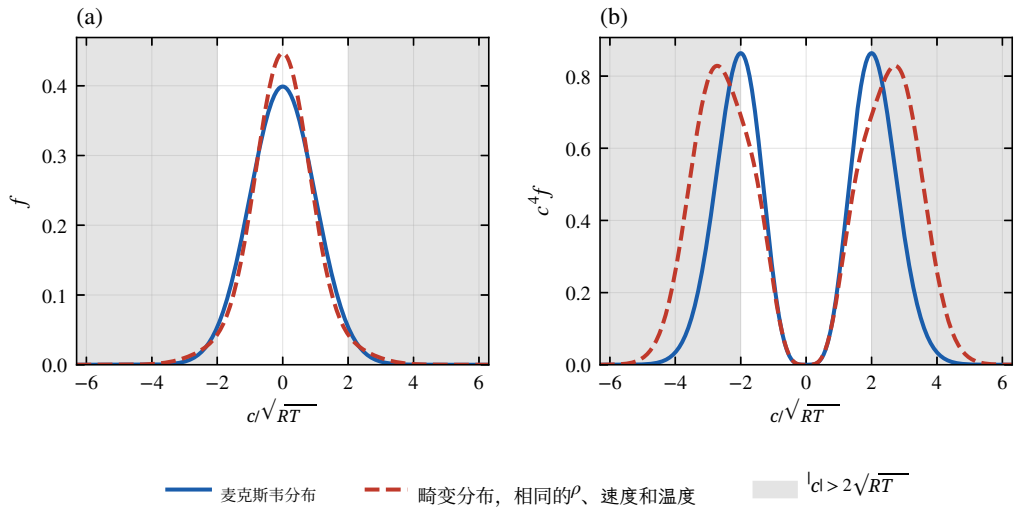

图 1：具有相同密度、速度和温度的两个分布，参照 [8]：麦克斯韦分布（实线）以及乘以 $1 + 0.04\,\mathrm{He}_4(c)$（虚线）的麦克斯韦分布，其中 c 分子速度以 $\sqrt{RT}$为单位， R 比气体常数，并且He_4 为四阶厄米多项式。（a）分布函数；（b）四阶矩的被积函数。阴影带为 $c^4 f$：其中包含麦克斯韦分布中 4.6% 的分子以及其四阶积分的 55%。两个分布的四阶积分相差 32%。

，正则化矩理论会将这些矩加入 Grad十三变量 [4, 5, 6, 7]中。矩的阶数越高，就越受高速分子的影响：在麦克斯韦分布中，速度最快的十分之一分子携带了28%的能量，以及四阶积分的一半。因此，两个分布函数的密度、速度和温度可以相同，而四阶矩却相差数十个百分点（图1）。评估动理学方程的数值解时，应依据应用所需的矩，而不能只看宏观场 [8]。

一个多世纪以来，激波的结构一直在检验人们对气体的描述：从有限振幅波的陡化和跃迁条件 [9, 10]，，到 Rayleigh、Taylor 和 Becker 的连续介质剖面——其厚度约为一个平均自由程，使连续介质描述受到质疑 [11, 12, 13, 14, 15]，——再到 Mott-Smith 和 Grad [16, 17] 所开创的动理学描述，以及下文综述的数值解。

因此，正激波是动理学求解器的标准测试对象。在强激波内部，分布函数呈双峰状 [16]：冷束流（即超声速上游气体）与下游侧的热亚声速气体共存。在马赫数20处，热气体的热速度是束流热速度的11倍；而在激波前方，仅有3%的分子承载了99%的四阶矩。对 f 而言，对矩有贡献的速度范围跨越六个数量级。直接模拟蒙特卡罗（DSMC）、离散速度方法和玻尔兹曼方程的确定性求解器能够解析这一结构，并提供本文所采用的参考值[3, 18, 19, 20]。

Mott-Smith 将激波内部的分布表示为上游和下游麦克斯韦分布的加权和 [16]，；Takata、Aoki 和 Cercignani 分析了无限强激波极限下的速度分布 [21]。研究人员测量了马赫数 7 [22] 氩气激波和马赫数 25 [23] 氦气激波内部的分布，并通过分子动力学进行了计算 [24]；直接模拟蒙特卡罗方法 [25, 3] 通过与此类测量结果进行对比得到验证 [26]，并应用于麦克斯韦分子和硬球的马赫数50激波 [27, 28]，，其结果与双峰

流体模型进行了比较 [29]。Ohwada 给出了与直接模拟蒙特卡罗一致的硬球玻尔兹曼方程确定性解 [30] ，其马赫数最高达马赫数 3；Tcheremissine 及其合作者将其推进到马赫数20，但成本随 M^2 [20, 31] 增长；Malkov等人在马赫数4和 8 [32] 下也给出了相应结果。用于碰撞算子的傅里叶谱方法 [33, 34, 35, 36]及在此基础上构建的快速算法 [37, 38, 39, 40] 使得在速度网格上计算碰撞积分成为可行；本文采用快速谱方法（第 7.1 节）。对于 Bhatnagar、Gross 和 Krook（BGK） [41], 、Shakhov [42]以及椭球模型 [43], 的弛豫模型，平面流的横向速度可以被积分消去 [44], ，随后利用离散速度方法（DVM）求解剩余方程 [45, 18]。Liepmann、Narasimha 和 Chahine 通过从纳维–斯托克斯剖面开始迭代，计算了 BGK 激波 [46]。Shakhov 求解了黏度与 T 成正比的马赫数10以内的 BGK 激波和 Shakhov激波；本文采用这一黏度定律 [47], 。Aristov 计算了马赫数100以内的 Shakhov激波，其中黏度与 $T^{0.5}$ 和 $T^{0.68}$ 成正比，并在随局部状态变化的速度网格上进行计算 [48]。由于这些模型的碰撞频率不依赖于分子速度，坐标 $\int (p/\mu)\,\mathrm{d}x$ 可将一种黏度定律下的解映射到任意其他黏度定律 [46, 49], ，因此这些结果同样适用于本文采用的定律。上述结果均以图形表示，且没有任何研究报告马赫数10以上的三阶或四阶矩。统一气体动理学格式和离散统一气体动理学格式可使此类求解器适用于不同流动状态 [19, 50, 51]。相关综述见 [52, 53], ，而激波的动理学模型则在 [54] 中进行了比较。两种福克–普朗克模型曾在超声速库埃特流以及马赫数 2 [55] 的圆柱周围流动中与直接模拟蒙特卡罗进行了比较：具有 H定理的椭球模型在激波区域更为准确；具有正确普朗特数的立方模型则在连续介质区域和壁面热流方面更为准确。作者据此认为，这两种性质都很重要；与麦克斯韦分子的直接模拟蒙特卡罗结果相比，BGK 和 Shakhov 模型也体现了这种权衡（第8节）。对于双原子气体，其转动能比平动能弛豫得更慢，Rykov 提出了具有独立平动温度和转动温度的模型 [56, 57]。Wu 等人将其写成本文采用的双分布形式，并据此为不振动多原子气体构建了具有速度依赖弛豫的模型 [58]；与马赫数4至7下的直接模拟蒙特卡罗结果相比，Rykov 模型能够较好地预测密度，但会使激波前方的温度过早升高，他们认为这源于其与速度无关的弛豫时间。当碰撞数取决于温度时，Rykov、Titarev 和 Shakhov 能够再现马赫数 12以内氮气激波的实测密度和转动温度。9 [59], Kosuge 和 Aoki 则利用椭球统计模型求解了体黏度较大的多原子气体激波 [60]。氮气激波的密度剖面和转动分布曾在 [61, 62] 中测量；采用每次碰撞均遵循经典轨迹且无需可调转动参数的直接模拟蒙特卡罗重现了这些测量结果 [63, 64], ，而分子动力学显示，转动碰撞数从100 K时的3.2升高至2000 K时的6.9 [65]。

Grad矩方法 [4] 及其后续的闭合层级 [66] 用有限组矩来描述稀薄气体。正则化13矩方程 [5] 被应用于 [67], 中的激波结构，而正则化26矩方程 [7] 则加入了应力和热流守恒律中出现的三阶和四阶矩（相关论述见 [6, 68]）。由于热流平衡包含四阶矩，因此即使解在密度、速度和温度方面准确，在用于闭合层级的量上仍可能不准确；因此，网络的评估范围扩展至四阶矩。

最小化微分方程残差的网络可追溯至Lagaris等人 [69]；目前的形式——物理信息神经网络（PINN）——则由Raissi等人提出 [70] （综述见 [71, 72]）。针对含激波的欧拉方程的物理信息神经网络研究见于 [73], ，以及一种无数据

有限体积卷积网络求解了马赫数从2到 15 [74]的圆柱周围稳态欧拉方程。已有研究报告的失效模式包括损失项之间的不平衡以及刚性梯度流 [75, 76] ，以及微分算子导致损失景观条件恶化 [77, 78]。补救措施包括自适应损失权重 [75, 79], 、课程学习和因果训练 [77, 80], 、自适应配点 [72, 81] ，以及能够严格满足边界条件的试探函数 [69,82, 83]。Adam [84] 通常之后会采用有限记忆布罗伊登–弗莱彻–戈德法布–沙诺方法（L-BFGS） [85]；采用修正拟牛顿方法可获得小得多的误差 [86], ，尤其是自缩放BFGS和Broyden更新 [87, 88], ，以及自然梯度方法 [89] 和Levenberg–Marquardt方法 [90, 91, 92, 93, 94]。

Lou等人针对离散速度集 [95]上的BGK方程构建了物理信息神经网络。其正问题不使用任何数据，包括克努森数最高达 $= 5$ 的低速库埃特流，以及雷诺数为100的腔体流，并在速度方面进行了评估；此外，还将克努森数为 $= 0.1$ 至10的稀薄腔体流作为逆问题求解，所用内部速度数据来自离散统一气体动力学解。文献 [96] 中的网络求解了线性化BGK流；在采用离散速度公式和自适应权重的情况下，文献 [97]还求解了库埃特流、热传递流、管道流和腔体流；文献 [98]则研究了约化BGK微流。渐近保持网络保留了多尺度动力学方程的扩散极限 [99, 100] ，并已扩展至不确定性量化和双保真设置 [101, 102]。Li等人利用速度方向上的神经稀疏表示，求解了BGK模型和二次Boltzmann碰撞模型，用于非定常波和Sod问题 [103], ；可分离物理信息神经网络则求解了光滑问题和黎曼问题中的BGK模型，空间维数最高达三维，克努森数范围为0.01至 1 [104]；二者均比较了密度、速度和温度。Ko等人指出，最小化标准 L^2 残差并不能保证矩的准确性，并提出了更加偏重高速的损失函数 [105]；文献 [106]给出了平衡态附近Boltzmann物理信息神经网络的误差估计。对于激波，Kim和Jun基于带有Grad型闭合的椭球Fokker–Planck模型的五矩投影训练了一个网络，在无数据的情况下获得了马赫数10的氩激波，并将评估范围扩展至应力和热流 [107]。本工作的前身在有无矩监督的情况下求解了BGK激波和Shakhov激波，并报告了最高四阶的矩 [8]。

另一类研究路线则从数据中学习动力学描述的部分内容：矩闭合 [108], 其中包括一种具有一个速度维度的BGK方程闭合模型，该模型在较低马赫数下的动力学解上进行训练，能够再现马赫数11和 21 [109]下密度、速度与温度的离散速度激波剖面；碰撞算子 [110, 111, 112, 113, 114],包括在带有软守恒约束的空间均匀BGK和玻尔兹曼方程谱解上训练的傅里叶神经算子 [115], 这是一种数据训练的空间均匀对应模型，而非本文仅基于方程的空间非均匀解；可微动力学求解器 [116]；稀薄流动的算子替代模型 [117], 其中包括一种物理约束算子网络，用于具有较大体黏度的 [60], 多原子激波的密度剖面；该网络通过数据损失以及针对单调性和远场梯度的惩罚项进行训练，是已知解的替代模型，而不是动力学方程的解；以及粒子方法中的碰撞模型 [118, 119]。与本文最接近的两项工作与本文的区别如下。Kim和Jun [107] 不使用数据，并在马赫数10下得到正激波，但其研究对象是带有闭合的Fokker–Planck模型的五矩投影，而非分布函数，并且评估范围达到应力和热流。Li等人 [103] 表示分布函数并纳入二次玻尔兹曼碰撞算子，针对非定常波和激波管问题进行研究，并以密度、速度和温度进行评估。本文的贡献具有明确的针对性：对于稳态正激波，损失函数仅包含动力学方程，不包含动力学求解或

训练后的特征修正、针对同一模型的离散速度解和直接模拟蒙特卡罗解进行验证，以及表1中的模型和马赫数（BGK达到马赫数100，Shakhov达到马赫数20，氮气模型达到马赫数 15，硬球玻尔兹曼达到马赫数10）。我们尚未发现具备这些性质的更早网络解；（马赫数11和21，宏观场）以及的网络针对的是不同的问题。

在此前的一篇论文中， [8] 作者比较了采用和未采用矩数据训练的 BGK 和 Shakhov 激波物理信息神经网络，并通过热流、应力和高阶矩对其进行了评估。仅根据方程训练的网络，在 Shakhov模型下可达到马赫数5，在 BGK模型下可达到马赫数7；而在马赫数8和12时，则需要从网络解出发进行动理学求解（特征修正）。这些网络将 Rankine–Hugoniot混合物乘以有界修正项，以固定混合物对残差加权，使用 192×64 至 512×144 个速度节点解析横向速度，并在拟牛顿阶段采用了187个预先指定的点。本文探讨的是：对于单原子和双原子气体，若要使仅根据方程训练的网络无需此类修正即可求解强激波，需要作出哪些改变。

该方法基于四项选择（第 3 节说明哪些部分来自 [8]）。第一项是分布函数的形式：网络给出一个无界的带符号修正项，并将其加到两种末态麦克斯韦分布的混合物上，再乘以分子自进入计算域以来发生碰撞的概率，从而使流入分布保持精确。通过在整个相平面上测量参考解所需的修正项，并与网络学得的修正项进行比较。第二项是损失函数，其中仅包含动理学方程：其残差采用三种范数，分别以不同方式对冷束、稀疏的高温分子和高速尾部加权；此外还包括通量恒定条件、残差的低阶矩，以及用于确定激波位置的条件。第三项是配点和速度节点的集合，两者都集中布置在激波和冷束所需之处，并设置从不用于训练的独立测试点。第四项是优化器：Adam、自缩放拟牛顿方法，以及沿马赫数进行延拓。

采用这些设置，仅依据方程训练的网络即可求解马赫数100下的BGK激波、马赫数20下的Shakhov激波、马赫数 15下氮气的Rykov型模型，以及马赫数2、5、8和10下的硬球玻尔兹曼方程。报告的八个场（包括两个四阶矩 R_{xx} 和 Δ）均与同一模型的解进行了比较。对于BGK模型，马赫数70时两个四阶矩与离散速度解的差异在3.2个百分点以内，马赫数100时在7.1个百分点以内；经查明，其误差源于损失函数中一个约化分布的权重，因此提高了该权重并延长了优化时间（第5.4节）。Shakhov模型在马赫数20以内精度良好；更高马赫数下，运行结果虽通过验收测试，但热流偏差为4%至18%，而精确热流平衡的残差无需参考值即可反映这一点（第5.5节）。对于马赫数8下的硬球玻尔兹曼方程，八个场各自与直接模拟蒙特卡罗结果的相对L^2 范数差异均在0.19个百分点以内，计算范围为 $|x| \le 17\,\lambda_1$，其中 x 从密度中点起算， λ_1 以一个上游平均自由程为尺度；在完成无参考测试后进行了一次比较，而在 $|x| \le 10\,\lambda_1$ 处，逐点差异至多为 2.0×10^{-3} 各场尺度的2（图2）；马赫数10时，在一次非盲测比较中，范数差异在0.34个百分点以内（第7.5节）。

只有通过无需参考值的测试，运行才会被接受：通量的恒定性、测试点处的残差，以及采用更精细速度规则时的变化。表 1 列出了每个结果的状态，说明其参考值在开发过程中是否可用。动力学问题特有的失效模式通过无需参考值的指标进行记录：激波发生塌缩

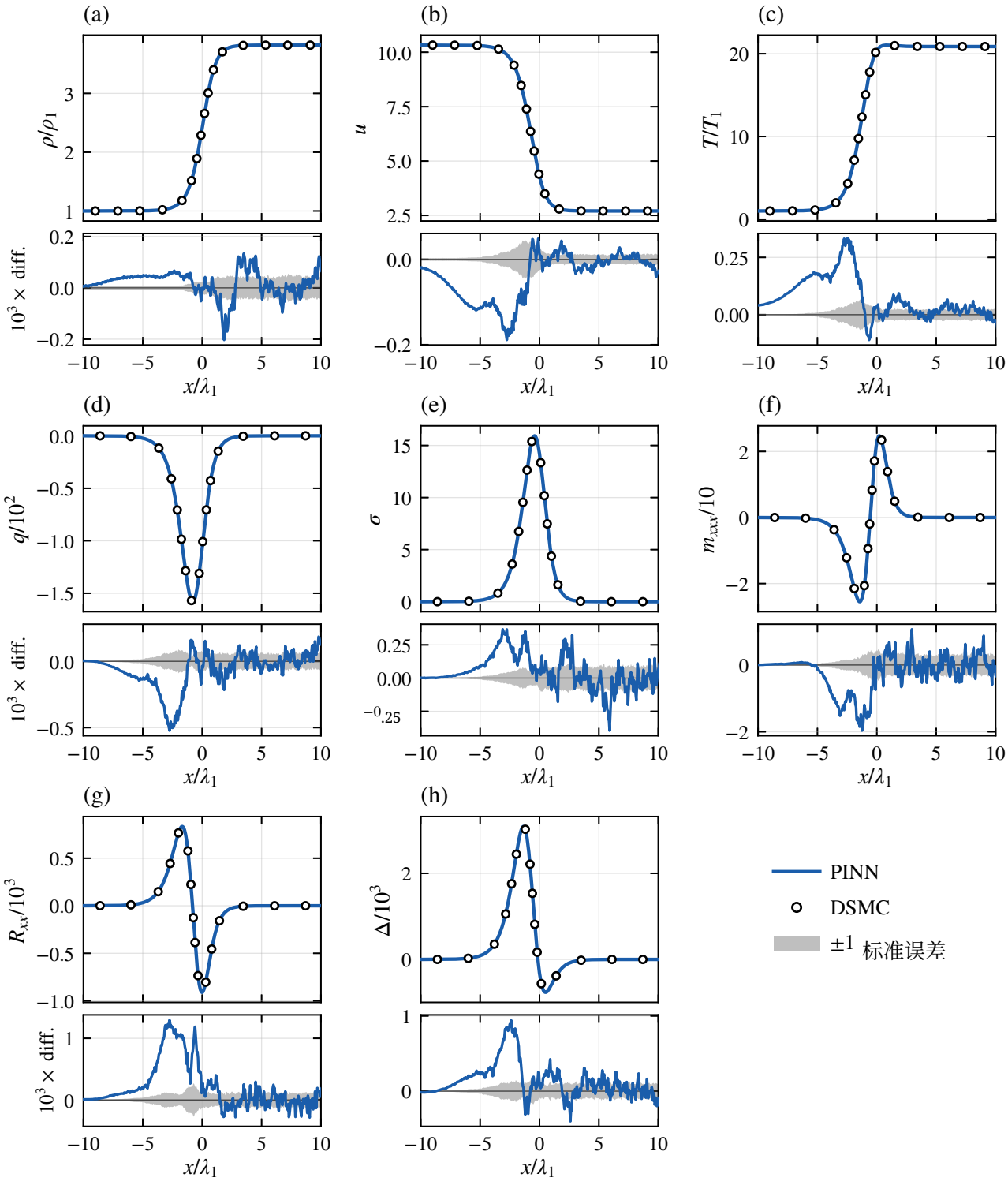

图2：网络求解的马赫数8下硬球玻尔兹曼方程（第7.5节）；无参考测试后进行了一次比较。(a) 密度 ρ，(b) 速度 u，(c) 温度 T，(d) 热流 q，(e) 应力 σ，(f) 三阶矩 m_{xxx}，(g) 和 (h) 四阶矩 R_{xx} 和 Δ （定义见第2节；单位设定使上游密度和温度满足 $\rho_1 = RT_1 = 1$）；实线：物理信息神经网络；符号：直接模拟蒙特卡罗。每个面板下方：物理信息神经网络减去直接模拟蒙特卡罗，再除以场的尺度（对于 ρ、 u 和 T，尺度取跃变量；对于其他场，取最大绝对值），然后乘以 10^3；灰色带表示直接模拟蒙特卡罗的正负一个标准误差。坐标 x 以密度中点为基准，单位为上游平均自由程 λ_1 。

两个配点之间，一个会截去上游运动分子的计算域，以及一个无法分辨冷束的速度立方体。

第 2 至 4 节介绍模型和问题、方法以及参考解。第 5 至 7 节报告单原子弛豫模型、氮气（包括损失函数、配点和优化器方面的证据）以及玻尔兹曼方程的激波；第 8节将它们与已发表的解和测量结果进行比较，第 9 节讨论成本、失败情况和局限性。补充材料包含参考求解器、碰撞积分的评估、实现细节、每次运行的设置以及更多结果。

2. 动理学模型与测试问题

2.1. 动力学方程

稀薄气体由其分子的位置 $\boldsymbol{x}$ 和分子速度 $\boldsymbol{v}$ 上的分布函数 $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ 描述。此处考虑的所有流动均为稳态，因此

$$\boldsymbol{v}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}} f = \mathcal{C}[f], \tag{1}$$

其中碰撞项 $\mathcal{C}$ 是玻尔兹曼积分或其弛豫模型 [1, 2]。所有变量均无量纲，气体常数已并入温度（单位见第2.2节），弛豫模型的符号采用 [8]中的定义。密度 ρ、速度 $\boldsymbol{u}$和温度 T 是以下各矩

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} f\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad \rho\boldsymbol{u} = \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{v} f\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad 3\rho T = \int_{\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{c}|^2 f\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad \boldsymbol{c} = \boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}, \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{c}$ 为热运动速度，压力为 $p=\rho T$。

硬球的玻尔兹曼方程。碰撞项是积分

$$\mathcal{C}[f] = Q(f,f) = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{S^2} |\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_*|\left[f(\boldsymbol{v}')f(\boldsymbol{v}_*')-f(\boldsymbol{v})f(\boldsymbol{v}_*)\right]\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}}{4\pi}\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}_*, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{v}' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{v}_*) + \frac{1}{2}|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_*|\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{v}_*' = \frac{1}{2}(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{v}_*) - \frac{1}{2}|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_*|\boldsymbol{\Omega}$ 分别是碰撞后的速度，$\boldsymbol{\Omega}$ 遍历单位球面 S^2。因子 $1/\sqrt{2}$ 表示长度以上游平均自由程 $\bar{\lambda}_1 = 1/(\sqrt{2}\,\pi d^2 n_1)$为单位时、直径为$d$ 的硬球，其中 n_1 为上游数密度。

***BGK*和*Shakhov*模型。** 弛豫模型将 Q替换为

$$\mathcal{C}[f] = \frac{f^*-f}{\tau}, \tag{4}$$

其中，目标 f^*由 f的少数几个矩构成，碰撞时间为 τ。BGK模型 [41]取局部麦克斯韦分布，

$$f^* = \mathcal{M}[\rho,\boldsymbol{u},T], \qquad \mathcal{M}[\rho,\boldsymbol{u},T](\boldsymbol{v}) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}}\exp\!\left(-\frac{|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}|^2}{2T}\right), \tag{5}$$

且普朗特数为 1。Shakhov模型 [42] 使用热流$\boldsymbol{q} = \frac{1}{2}\int \boldsymbol{c}\,|\boldsymbol{c}|^2 f\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}$修正目标分布，

$$f^* = \mathcal{M}[\rho,\boldsymbol{u},T]\left[1+(1-\mathrm{Pr})\,\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{c}}{5\rho T^2}\left(\frac{|\boldsymbol{c}|^2}{T}-5\right)\right], \tag{6}$$

使应力以 $1/\tau$ 的速率弛豫，而热流以 Pr/τ 的速率弛豫，其中 Pr 是普朗特数；$\mathrm{Pr} = 2/3$ 是单原子值，而 $\mathrm{Pr} = 1$ 则对应 BGK模型。当 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{c} < 0$时，高速分子的沙霍夫目标分布为负，因此该模型的解在此处也为负；这决定了第 3.2 节中修正项的形式。碰撞时间由黏度 $\mu = \mu_1 T^{\omega}$ 得出，

$$\tau = \frac{\mu}{p} = \frac{\mu_1 T^{\omega-1}}{\rho}. \tag{7}$$

氮气的 *Rykov* 型模型。对于具有两个转动自由度的双原子气体（比热比 $\gamma = 7/5$），我们采用 Wu 及其合作者 [58]提出的双分布形式的 Rykov 模型 [56]： $F(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{v})$ 是分子分布函数，而 $H(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{v})$ 是分子的转动能分布函数，并且

$$\boldsymbol{v}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}} F = \frac{1}{\tau}\Big[(F_t - F) + \frac{F_r - F_t}{Z}\Big], \qquad \boldsymbol{v}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}} H = \frac{1}{\tau}\Big[(H_t - H) + \frac{H_r - H_t}{Z}\Big]. \tag{8}$$

密度和速度是 的矩（2）。平动温度、转动温度以及热流为

$$\begin{aligned} 3\rho T_{\mathrm{tr}} &= \int |\boldsymbol{c}|^2 F\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad \rho T_{\mathrm{rot}} = \int H\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \\ \boldsymbol{q}_{\mathrm{tr}} &= \frac{1}{2}\int \boldsymbol{c}\,|\boldsymbol{c}|^2 F\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{q}_{\mathrm{rot}} = \int \boldsymbol{c}\,H\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \end{aligned} \tag{9}$$

而 $T = (3T_{\mathrm{tr}} + 2T_{\mathrm{rot}})/5$ 是总温度。令 $\mathcal{M}(\Theta)$ 为密度为 ρ、速度为 $\boldsymbol{u}$、温度为 Θ 的麦克斯韦分布，则四个目标值为

$$\begin{aligned} F_t &= \mathcal{M}(T_{\mathrm{tr}})\Big[1 + \frac{\boldsymbol{q}_{\mathrm{tr}}\cdot\boldsymbol{c}}{15\rho T_{\mathrm{tr}}^2}\Big(\frac{|\boldsymbol{c}|^2}{T_{\mathrm{tr}}} - 5\Big)\Big], \\ F_r &= \mathcal{M}(T)\Big[1 + \omega_0\frac{\boldsymbol{q}_{\mathrm{tr}}\cdot\boldsymbol{c}}{15\rho T^2}\Big(\frac{|\boldsymbol{c}|^2}{T} - 5\Big)\Big], \\ H_t &= T_{\mathrm{rot}} F_t + (1-\delta_{\mathrm{R}})\,\frac{\boldsymbol{q}_{\mathrm{rot}}\cdot\boldsymbol{c}}{\rho T_{\mathrm{tr}}}\,\mathcal{M}(T_{\mathrm{tr}}), \\ H_r &= T\,F_r + \omega_1(1-\delta_{\mathrm{R}})\,\frac{\boldsymbol{q}_{\mathrm{rot}}\cdot\boldsymbol{c}}{\rho T}\,\mathcal{M}(T). \end{aligned} \tag{10}$$

弹性碰撞会在时间 τ 内使 F 趋近于 F_t，而平动与转动会在时间 $Z\tau$ 内交换能量。碰撞时间是平动模式的碰撞时间，$\tau = T^{\omega-1}\mathrm{tr}\,/\rho$。网络代码与参考求解器中使用相同的常数：$Z = 3.1616$、$\delta_{\mathrm{R}} = 0.7519$、$\omega_0$ =0.4946、$\omega_1 = 1.9574$和 $\omega = 0.74$；δ_{R} 是 Wu及其合作者写作 δ 的常数。取 Z =3.1616 时，转动能会在 $\frac{5}{3}Z\tau = 5.3\,\mu/p$ 内弛豫至平动温度；转动碰撞数 $Z_{\mathrm{rot}} = 20Z/(3\pi) = 6.7$ 以 $\pi\mu/(4p)$ 为单位，按 Wu及其合作者的约定，对应于 $Z_{\mathrm{DSMC}} \approx 5$；$\omega_0$ 和 ω_1 由 Z 通过 Mason–Monchick 热导率关系得出，如同 [58],，且该模型的体黏度为 $\mu_b = \frac{4Z}{15}\mu = 0.84\,\mu$，Pr 为 $= 0.707$。Wu及其合作者在自己的氮气激波计算中使用了 $Z = 2.226$；常数 Z 所带来的影响将在第8节讨论。这些常数所隐含的热导率推导见补充材料第S8.1节。

2.2. 单位

采用弛豫模型进行激波计算时，上游状态给出 $\rho_1 = T_1 = 1$，速度以 $\sqrt{RT_1}$ 为单位，长度以 $\ell_0 = \mu(T_1)/(\rho_1\sqrt{RT_1})$ 为单位，因此式（7）中的 $\mu_1 = 1$。BGK 和 Shakhov 计算采用 $\omega = 1$，因此 $\tau = 1/\rho$；其中一组 BGK 计算采用常数 $\tau = 1$，遵循前一篇论文中 BGK 计算的约定 [8]。氮气计算采用 $\omega = 0.74$。硬球计算的长度单位为 λ_1。采用硬球黏度 $\mu = 1.016034\,(5\pi/32)\,\rho\,\bar{c}\,\lambda$后，有 $\ell_0 = 0.7959\,\lambda_1$ 和$\omega = 1/2$，因此，采用 $\mu_1 = 0.7959$ 和 $\omega = 1/2$ 的 Shakhov 计算，其长度单位和黏度与玻尔兹曼计算相同。补充表 S11 汇总了所有计算所用的单位和碰撞项。

2.3. 约化分布

在一维流动中，f 取决于流向分子速度 v 和横向速率 $r = (v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$。输运算子 $v\,\partial_x$ 不作用于 r，弛豫模型的每个目标都是 r 中的麦克斯韦分布与 r^2中的多项式的乘积，而目标中涉及的矩仅以 1 和 r^2 对分布函数加权。因此，对横向平面进行积分可得封闭方程 [44]，用于

$$
\begin{aligned}
g &= \int_0^\infty f\,2\pi r\,\mathrm{d}r, \qquad k = \int_0^\infty r^2 f\,2\pi r\,\mathrm{d}r,\\
l &= \int_0^\infty r^4 f\,2\pi r\,\mathrm{d}r, \quad h = \int_0^\infty H\,2\pi r\,\mathrm{d}r,
\end{aligned}
\tag{11}
$$

（氮气中将f 替换为 F，且仅在此处存在 h），即

$$
v\,\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\varphi^* - \varphi}{\tau}, \qquad \varphi \in \{g,k,l\} \text{ or } \{g,k,h,l\}, \tag{12}
$$

目标值为 φ^*，见 附录 A。该约化是精确的。分布 g、k 和 h 携带密度、速度、温度、热流和应力，且其方程是封闭的；l 仅四阶矩所需，且不会反馈影响。因而，未知量是 $(x,\ v)$ 的函数，并且约五十个节点的一维速度规则取代了三维速度规则中的数千个节点。对于（3），不存在这样的约化，因为它耦合了所有速度分量：在那里，未知量仍为 $f(x,\ v,\ r)$，位于三维速度网格上（第 3.8 节）。

2.4. 正激波

在 $x \in [-L, L]$ 上以激波自身的参考系计算该激波，超声速气体从左侧进入。对于马赫数 M，上游状态为 $(\rho_1,\ u_1,\ T_1) = (1,\ M\sqrt{\gamma},\ 1)$，下游状态则由Rankine–Hugoniot 关系得出，

$$
\rho_2 = \frac{(\gamma+1)M^2}{(\gamma-1)M^2+2}, \qquad u_2 = \frac{u_1}{\rho_2}, \qquad T_2 = \frac{2\gamma M^2 - (\gamma-1)}{(\gamma+1)\,\rho_2}, \tag{13}
$$

其中，$\gamma = 5/3$ 适用于单原子气体，$7/5$ 适用于氮气，且两种气体在两个端态下的温度相同。分子在 $x = -L$ 处以 $v > 0$ 和上游麦克斯韦分布进入，在$x = L$ 处以 $v < 0$ 和下游麦克斯韦分布进入。稳态问题具有平移不变性，激波的位置由 $\rho(0) = (\rho_1 + \rho_2)/2$确定。半长度为 $L = 15M$，适用于

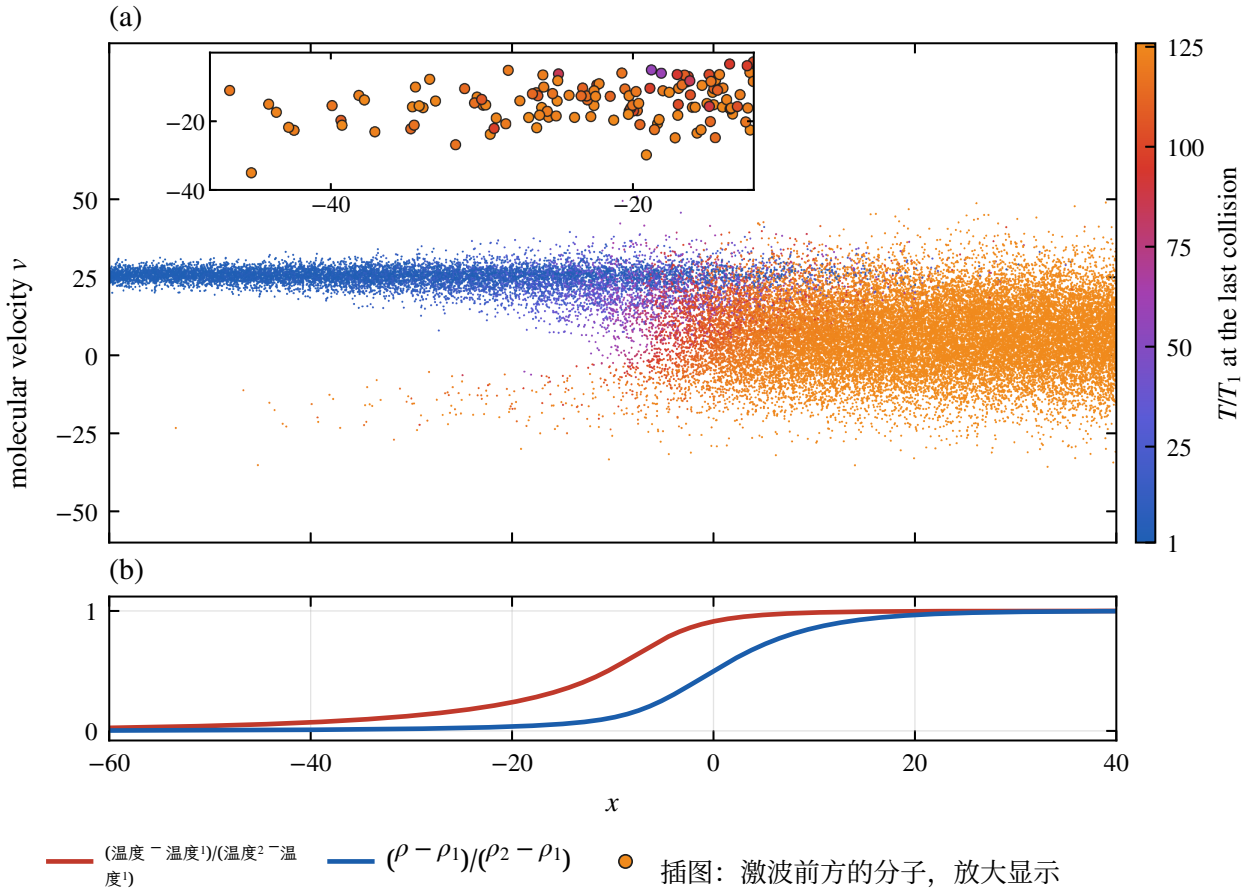

图3：通过分子观察马赫数20时的BGK激波。(a) 位置平面中的分子 x和分子速度 v （稳态的三个瞬间中的分子），根据每个分子最后一次碰撞处气体的温度着色，从 T_1 （蓝色，来流气体）到 T_2 （橙色，下游气体）。这些分子是BGK方程的一种随机实现，采用离散速度解的收敛场：每个分子自由飞行，并以速率 $1/\tau$从局部麦克斯韦分布中获取新的速度；它们在激波上游20个单位处的速度分布与该解一致，相对误差在1.8百分比以内 L^2（统计意义上）。(b) 离散速度解的密度和温度，在其两个端值之间进行缩放。框选插图是区域 $-48 < x < -12$的 $-40 < v < 0$ 放大视图，向上游运动的分子以更大的尺寸绘制；其坐标轴与该面板采用相同的坐标。补充视频1展示了运动中的分子、移动位置处的分布，以及第3.2节中混合物的修正（慢动作版本：https://www.youtube.com/watch?v=9hSQn6-cPD8）。

单原子气体（马赫数5时为75，马赫数20时为300）；氮气在马赫数2、5、7、8、10、12和15时分别为30、50、60、60、120、120和120。

无界气体中的稳态正激波没有外部长度，因此也没有自由克努森数：以 ℓ_0 或 λ_1 为单位时，其结构仅取决于 M 以及分子模型。相关的克努森数是局部量，即上游平均自由程与密度厚度之比 $\delta_\rho = (\rho_2-\rho_1)/\max_x(\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}x)$；本文所研究激波的克努森数值列于补充材料第S8.1节。

图3 展示了强激波的动力学结构。上游所有分子都属于一束窄束流，其速度为 $v \approx u_1$；下游分子则形成一个以 u_2 为中心的宽麦克斯韦分布，其热速度大于 u_2，因此一些高温分子会向上游运动。那些穿过激波的分子会向前进入来流气体，直到发生碰撞，其中速度较慢的分子最先碰撞；它们在

负速度处形成舌状区，可延伸至密度上升前方数十个单位；它们在那里加热气体，这就是温度远早于密度开始上升的原因。因此， f的神经表示必须解析宽度为 $\sqrt{T_1}$的束流、宽度为 $\sqrt{T_2}$ 的热气体（在马赫数20时宽度为其十一倍），以及稀疏的上游运动分子；在激波前方20个单位处，这些分子占气体的3%，却携带了四阶矩的99%。

2.5. 报告的矩

每个解都通过其四阶以内的矩进行评估。除 ρ、 u 和 T 外，还包括热流和法向应力，

$$q = \frac{1}{2}\int c_x |\boldsymbol{c}|^2 f \,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad \sigma = \int \left(c_x^2 - \frac{|\boldsymbol{c}|^2}{3}\right) f \,\mathrm{d}\boldsymbol{v} = P_{xx} - \rho T, \tag{14}$$

以及正则化矩理论在 Grad十三变量 [6, 7], 中增加的三阶和四阶矩

$$\begin{gathered} m_{xxx} = \int \left(c_x^3 - \frac{3}{5} c_x |\boldsymbol{c}|^2\right) f \,\mathrm{d}\boldsymbol{v}, \qquad \Delta = \int |\boldsymbol{c}|^4 f \,\mathrm{d}\boldsymbol{v} - 15\rho T^2, \\ R_{xx} = \int |\boldsymbol{c}|^2 \left(c_x^2 - \frac{|\boldsymbol{c}|^2}{3}\right) f \,\mathrm{d}\boldsymbol{v} - 7T\sigma. \end{gathered} \tag{15}$$

在麦克斯韦分布中，这五项均为零。对于氮气， f 在式 F 和 T 中分别替换为 T_{tr} (14) 和 (15)，由此定义 q_{tr}、 σ、 m_{xxx}、 R_{xx} 和 Δ；此外，还报告了式 T_{rot} 和 q_{rot} (9) 中的。按实际实现方式，以约化分布表示的公式见附录 A。

3. 方法

图4 概述了该方法，图19 以流程图展示了针对弛豫模型和玻尔兹曼方程的一次优化步骤。一个小型网络给出指数$N_\theta(x,\ v)$；分布函数是一个解析基准乘以该指数的带符号函数；在一组速度节点上计算其矩，以定义碰撞模型的目标；动理学方程在一组配点上的残差则纳入一个不含参考数据的损失函数。四项选择决定了最小化该损失能否得到解： 的形式（第3.2节）、损失函数（第3.4节）、配点和速度节点（第3.5节），以及优化器（第3.6节）。以下针对第2.3节的约化松弛模型进行说明；第3.8 节说明碰撞模型改变时有哪些变化。第3.3节给出了关于形式的证据；关于损失函数、配点和优化器的证据则来自氮气计算，见第6.4 至6.6节。

继承的元素和新增元素。 具有经过训练的宽度和流入因子的混合物（方程（19）和（20））、残差的三个范数、通量和钉扎项、残差矩、默认权重，以及 Adam 和自缩放布罗伊登法的组合序列，均取自早期论文 [8]。新增内容包括无界的带符号修正项 $\sinh N_\theta$；采用拉伸速度规则的一维速度空间；包络中的局部麦克斯韦分布和当前解；尾部权重由四次幂改为八次幂；带有测试点的嵌套配置集；从马赫数 5 起改变的三个权重；仅通过拟牛顿法进行马赫数延拓；以及对硬球碰撞积分的处理（详见补充材料第 S8.1节）。尚未确定究竟是哪一个新增元素起了决定性作用。采用当前损失函数、配点和优化器进行测试时，早期的有界形式可计算至马赫数 12（第3.2节）；该测试无法确定早期方法受到限制的原因。

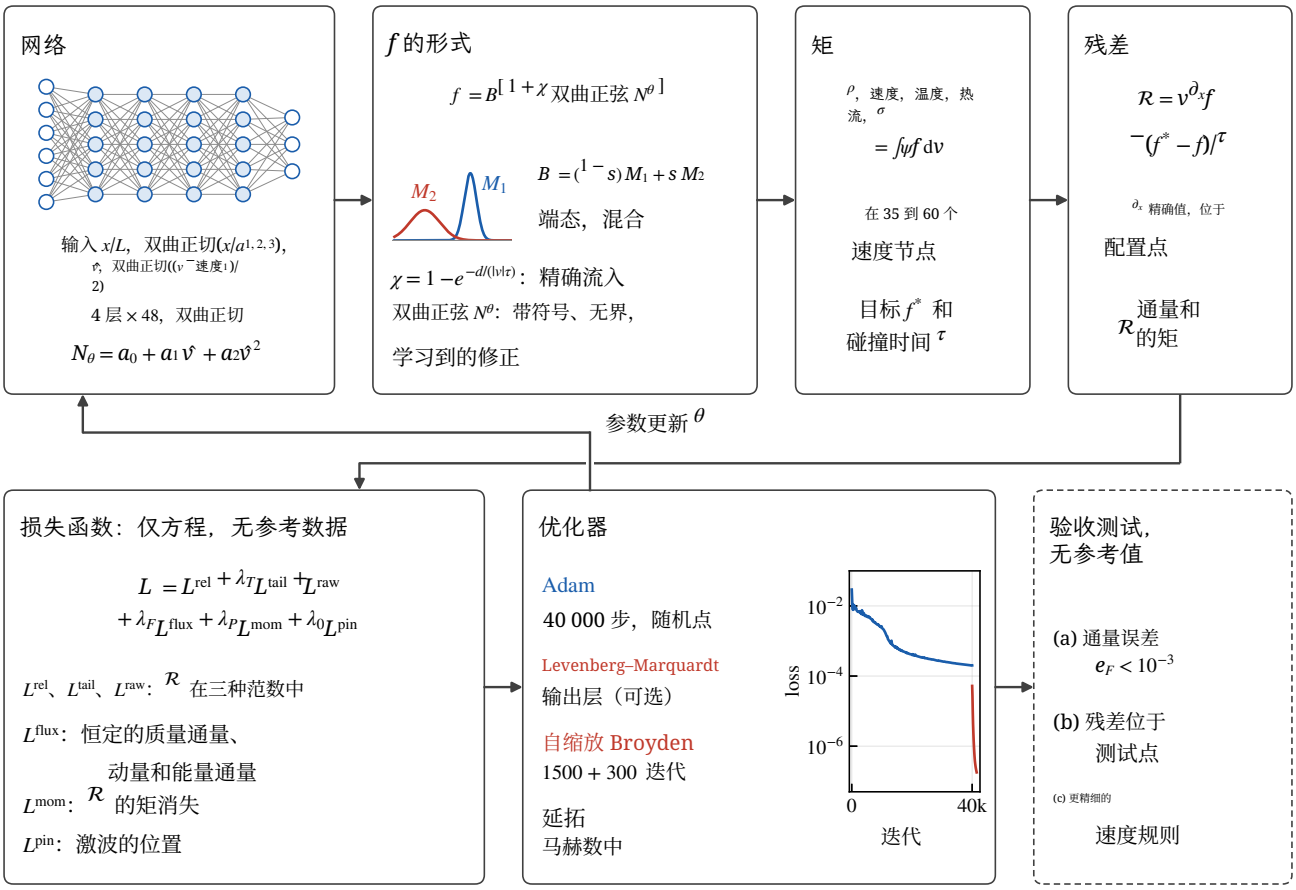

图4：方法概览：网络及其输入、 f的形式、矩、动理学方程的残差、损失函数、训练阶段，以及无需参考值的验收测试；这些测试在训练后进行，且不属于损失函数的一部分（虚线框）；插图显示了马赫数5时 BGK激波的损失函数随迭代次数的变化。第3 节中的四种选择分别是 f的形式、损失函数、带有速度节点的配点，以及优化器。速度规则包含35至60个节点；马赫数20时的 Shakhov激波则包含119个节点（第3.5节）。

3.1. 网络

该网络将由位置 x和分子速度 v构成的六个输入映射为一个指数 $N_\theta^{(m)}(x,\ v)$，分别对应单原子气体的每个约化分布 φ_m、 $m \in \{g,k,l\}$ 以及氮气的$m \in \{g,k,h,l\}$。输入为

$$\frac{x}{L}, \qquad \tanh\frac{x}{2.5}, \qquad \tanh\frac{x}{8}, \qquad \tanh\frac{x}{25}, \qquad \hat{v} = \frac{v - v_c}{v_s}, \qquad \tanh\frac{v - u_1}{2}, \tag{16}$$

与 $v_c = (u_1 + u_2)/2$ 和 $v_s = 3\sqrt{T_2}\,x$ 的饱和函数能够解析激波层及其前驱区，其特征长度不依赖于 L；$\hat{}v$ 在高温下游分布函数中为量级一，而最后一个输入仅在冷上游束流中变化。由于 v_c，v_s 和 u_1遵循 Rankine–Hugoniot 状态，因此在一个马赫数下训练的网络，在相邻马赫数下也能给出近似解；第3.6 节所述的延拓方法正是利用了这一点。四个隐藏层各含 48 个神经元，采用双曲正切激活函数，并连接一个线性输出层；该输出层为每个约化分布函数返回三个系数：

$$N_\theta^{(m)}(x,v) = a_0^{(m)} + a_1^{(m)}\hat{v} + a_2^{(m)}\hat{v}^2, \tag{17}$$

其中每个 $a_i^{(m)}$ 都是六个输入的函数。麦克斯韦分布的速度或温度发生变化时，其指数会产生二次变化，因此式（17）能够表示该变化，而无需使用较大的权重。基准（第 w 3.2 节）的宽度为；该网络包含 7834 个参数（单原子气体）或 7981 个参数（氮气）。残差中的导数 $\partial N_\theta/\partial x$ 通过前向传播进行解析传播，所有网络代码均以双精度计算；初始化方式和参数数量见补充材料第S8.2节。

3.2. 分布函数的形式

网络不会直接输出分布函数。每个约化分布函数写作

$$\varphi_m(x,v) = B_m(x,v)\left[1+\chi(x,v)\sinh N_\theta^{(m)}(x,v)\right], \tag{18}$$

也就是说， $f = B\,[1+\chi\,\sinh\ N_\theta]$ 表示分布函数本身。基准是两个 Rankine–Hugoniot 状态的平衡分布 $\varphi_{1,\ m}$ 和 $\varphi_{2,\ m}$ 的混合物，如 Mott-Smith [16]以及[8],中所示

$$B_m(x,v) = [1-s(x)]\,\varphi_{1,m}(v) + s(x)\,\varphi_{2,m}(v), \qquad s(x) = \frac{\Lambda(x/w)-\Lambda(-L/w)}{\Lambda(L/w)-\Lambda(-L/w)}, \tag{19}$$

其中逻辑函数为 $\Lambda(z)\ = (1+e^{-z})^{-1}$。下游状态的权重 s 在$x=-L$ 处为零，在 $x=L$处为一，其中心位于 $x=0$处，损失函数中的钉扎项（第 3.4 节）将激波置于此处。宽度 w (初始值为3)是基准中唯一需要训练的参数；它与网络一起针对同一损失函数进行优化。流入因子

$$\chi(x,v) = 1-\exp\Big[-\frac{d_{\rm in}(x,v)}{|v|\,\tau_{\rm in}}\Big], \qquad (d_{\rm in},\tau_{\rm in}) = \begin{cases}(x+L,\ \tau_1), & v\ge 0,\\ (L-x,\ \tau_2), & v<0,\end{cases} \tag{20}$$

其中， τ_1 和 τ_2 分别是上游状态和下游状态的碰撞时间；流入因子表示速度为 v 的分子自进入计算域以来发生碰撞的概率，其计算采用该分子进入时所经过状态的碰撞时间。

入射分布是精确的：在 $x=-L$处， $s=0$且对于 $v\ge 0$， $\chi=0$，因此$\varphi_m=\varphi_{1,\ m}$；在 $x=L$处， $\varphi_m=\varphi_{2,\ m}$ 对于 $v<0$。因此，损失函数不需要边界项。数值 $N_\theta=0$ 给出了混合物，它具有正确的端态，但不是一个解：在强激波前方，它包含气体中不存在的缓慢高温分子（图 5）。因子$1+\chi\,\sinh\ N_\theta$将 N_θ一一映射到实数轴上。对于较大的正值 N_θ，它按 $\chi e^{N_\theta}/2$增长，这正是上游束流两侧所需要的；上游束流在激波前方受热并变宽。对于负值 N_θ ，它会经过零点，因此可以在多个数量级的范围内从基准中移除分子，且分布函数可以改变符号。Shakhov 模型和氮气模型需要这个符号，因为它们的解在高速尾部为负；在一次未进一步记录的探索性运行中，正值形式 $B\exp(\chi N_\theta)$使马赫数2下氮气激波的热流偏差达到 6 个百分点。代码中为 $|N_\theta|\le 40$。

早期的网络 [8] 使用了有界修正项， $f\ =\ B\,[1+\chi\,6$双曲正切$(N_\theta/6)]$,因此$f/B\ \le\ 7$。方程（18）移除了这一界限。仅将其预先固定的唯一改动设为有界形式后重复进行，Section 5 （$\tau=1/\rho$）的 BGK 延拓在 Section 3.7 的测试 (a) 和 (b) 中通过了马赫数5、7、8、10和12的测试，每个场与离散速度法的差异均在1.6%以内。其 R_{xx} 和 Δ 在马赫数5、10和12时的准确度比带符号形式低2.0至4.3倍，而在马赫数7和8时处于相同运行结果之间的散点范围内；与此同时，其 ρ、 q 和 σ 在马赫数10和12时更加准确；有界网络学到的基准宽度大了1.5至1.7倍。这次单随机种子

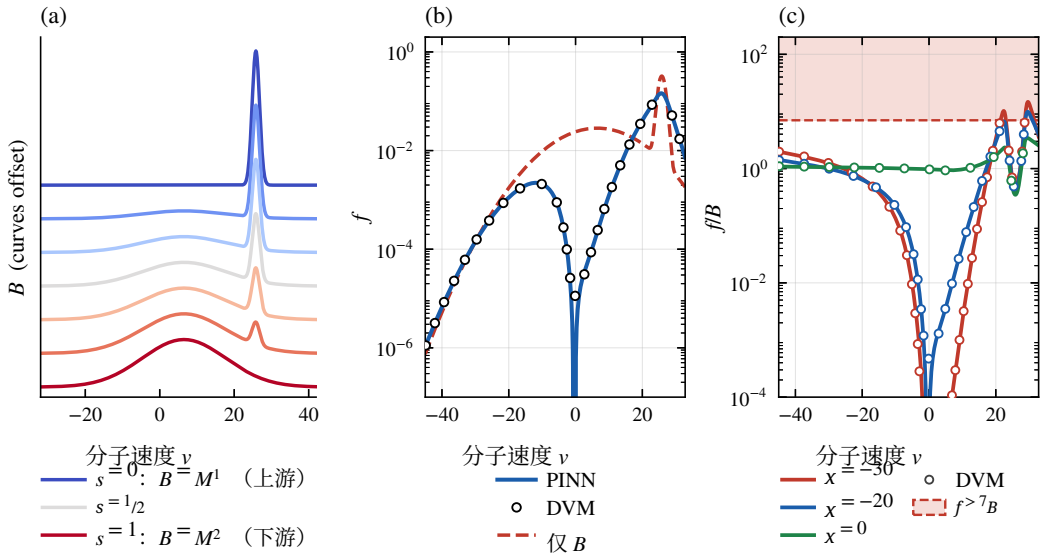

图5：马赫数20下分布函数的形式（BGK）。(a) 从上游束流到下游麦克斯韦分布的混合物（曲线错开）。 B (b) 密度中点上游20个长度单位处的约化分布函数：物理信息神经网络（线）、离散速度法（符号）和 B 本身（虚线）。(c) 因子 f/B 在 $x=-30$， -20 以及0处：物理信息神经网络（线）和离散速度法（符号）；虚线和阴影标示 $f>7B$ 在此网络基准上的范围，超过了早先论文中有界形式的最大因子（有界网络会训练出更宽的基准，见第3.2节）。

测试在马赫数12处停止；它并未表明无界形式是必要的，也未说明早期方法受到何种限制；该方法在损失函数、点和优化器方面也有所不同（补充材料 Section S1和表S2）。

3.3. 马赫数*20*时 *BGK*激波所需的修正项

该形式的依据取自第 5 节所报告的马赫数20时的 BGK激波；相同模型的离散速度法解仅在训练后使用，长度（以 ℓ_0 为单位）均从密度中点开始测量。该混合物（图 5a）具有正确的端态，但在中间区域与解相差甚远。它包含完整的下游麦克斯韦分布，包括运动缓慢且向前运动的高温分子；在激波前方，这些分子并不存在，因为在那里向下游运动的分子来自冷气体，而向上游运动的缓慢分子会在移动不远后发生碰撞。在图 5(b) 所示位置，仅由该混合物得到的密度为 1.592，而离散速度法得到的密度为 1.093（高出 46 个百分点），法向应力 $\int c^2 g\mathrm{d}v$ 为 247.6，而离散速度法为 63.6（几乎高出四倍）。采用因子 $1+\chi\sinh N_\theta$ 后，在携带四阶矩的速度范围内，该网络与离散速度法的相对 L^2 范数相差 0.22 个百分点 g （在携带密度的速度范围内相差 0.26 个百分点）；其密度和法向应力比离散速度法的值高 0.06 个百分点，而其 $\int c^4 g\mathrm{d}v$ 低 0.006 个百分点。

图 6 比较了离散速度法所需的因子 g_{DVM}/B与学习得到的因子在位置与速度平面上的情况：从中点前方 45 个长度单位到后方 15 个长度单位，共取 120 个位置；在每个位置，取 g_{DVM} 超过其最大值的 10^{-7} 所对应的速度，共计 41 080 个节点。所需因子的范围为 1.1×10^{-6} 至 21.1。较小的值位于激波前方、速度接近零的区域；较大的值位于冷束两侧的边缘。冷束在密度上升之前已被加热并展宽，而混合物仍保持低温。在密度中点处，

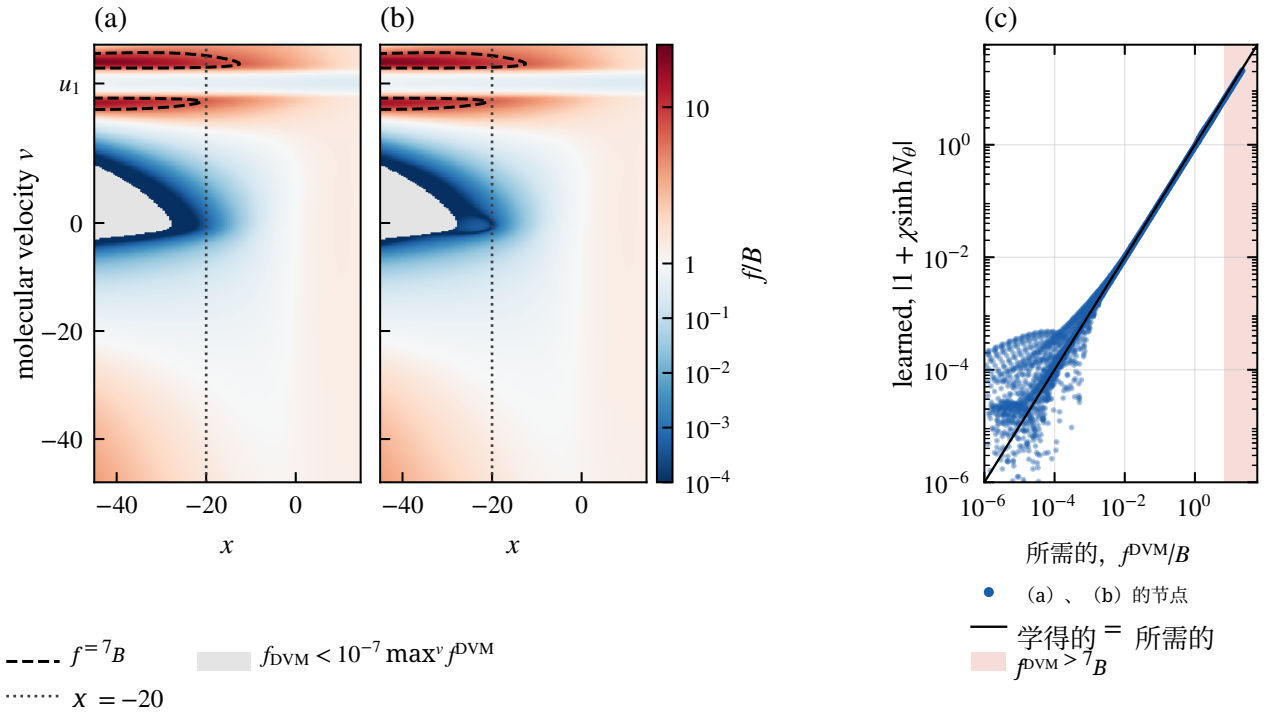

图6：马赫数20的BGK激波的 f/B 平面上的因子 $(x,\ v)$：(a) 离散速度法所需的因子，f_{DVM}/B；(b) 物理信息神经网络学习得到的因子；(c) 在图谱的41 080个节点处，学习值与所需值的对比，并显示等值线。颜色刻度为对数刻度，在 $f = B$处为白色；灰色表示 f_{DVM} 低于其在 10^{-7} 上的最大值的 v的节点。虚线轮廓：该网络基准上的 $f = 7B$；点线：图 5(b)中的位置；刻度u_1 表示上游速度；(c)中的阴影：所需因子高于7。

因子保持在 0.35 至 3.5 之间。当所需因子高于约 10^{-3} 时，网络能够复现该因子：在所有节点上，$|$学习得到的/所需 $-1|$ 的中位数误差为 0.30 百分比，94.6 百分比的节点在 5 百分比以内达成一致，而承载四阶矩 99 百分比的节点在 1.3 百分比以内达成一致。

低于 10^{-3}时，在承载 5.9×10^{-6} 分子的节点中，有3.6%的节点上的学习因子出现散点；在全部节点的0.89%上，该因子略为负值，这是网络产生的误差，但在前方20个长度处，任何矩的变化均不超过0.02%；继续进行准牛顿阶段可减少散点（补充材料第 S1 和 S8.3节）。在束流两侧，该基准上所需的因子超过7；对应速度所承载的密度最高达17.6%，但四阶矩最多仅占0.2%。

3.4. 损失函数

设 $x_i,\ \ i=1,\ \ldots\ldots,\ \ N_x$为配点，$v_j,\ \ w_j$为第3.5节中的速度节点和权重，并令 $\langle\cdot\rangle$表示对配点取平均值。约化方程（12）的残差为

$$\mathcal{R}_{ij}^{(m)} = v_j \frac{\partial \varphi_m}{\partial x}(x_i, v_j) - \frac{\varphi_m^*(x_i, v_j) - \varphi_m(x_i, v_j)}{\tau(x_i)}. \tag{21}$$

定义 φ^* 和 τ 的矩直接从 φ 在相同节点上计算，因此 $\mathcal{R}$是网络的非线性泛函。平方残差在以下速度上求和

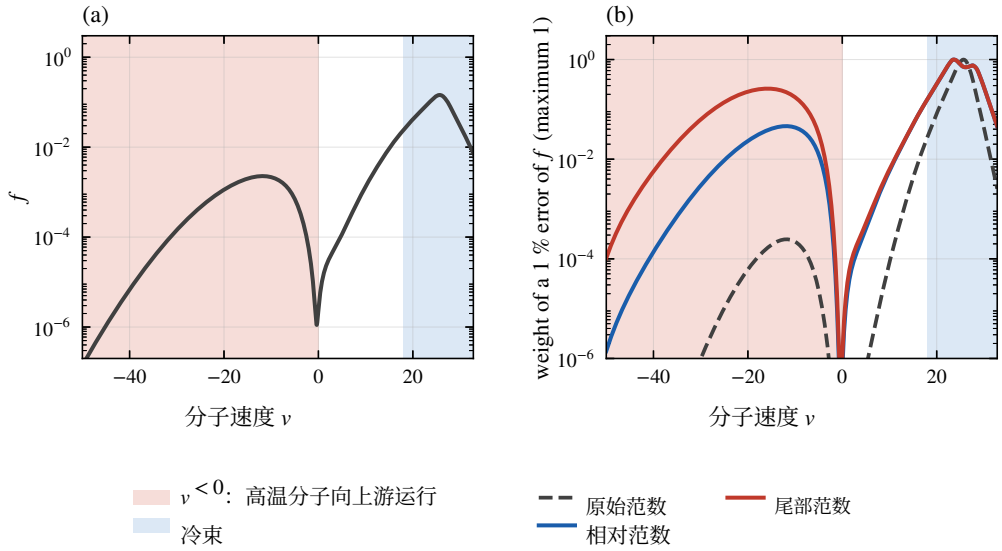

图 7：马赫数20下，位于密度中点前方20个长度单位处的 BGK激波残差三个范数的权重。(a) 约化分布。(b) 在每个速度处均为 f、1 百分比的相同相对误差对原始范数、相对范数和尾部范数的贡献，每条曲线均除以其最大值；以及训练代码为训练网络计算的包络和尾部权重。红色阴影： $v<0$，向上游运行的高温分子（占密度的3百分比，占四阶矩的99百分比）；蓝色阴影：冷束。

三种范数，每种都相对于局部分布的一种不同度量。前两种使用包络

$$\mathcal{E}_m = B_m^{(3)} + M_m^{\mathrm{loc}} + |\varphi_m|, \tag{22}$$

固定宽度为 $w=3$ 的混合物、当前局部状态的平衡分布与当前解的幅值之和；我们记作 $\mathcal{D}_{mij} = \mathcal{E}_{mij} + 10^{-7}\max_j \mathcal{E}_{mij}$。相对范数、尾部加权范数和原始范数为

$$\mathcal{L}_{\mathrm{rel}} = \Big\langle \sum_m a_m \frac{\sum_j w_j\, \mathcal{E}_{mij} \left(\mathcal{R}_{ij}^{(m)}/\mathcal{D}_{mij}\right)^2}{\sum_j w_j\, \mathcal{E}_{mij}} \Big\rangle, \tag{23}$$

$$\mathcal{L}_{\mathrm{tail}} = \Big\langle \sum_m a_m \frac{\sum_j w_j\, t_{ij}\, \mathcal{E}_{mij} \left(\mathcal{R}_{ij}^{(m)}/\mathcal{D}_{mij}\right)^2}{\sum_j w_j\, t_{ij}\, \mathcal{E}_{mij}} \Big\rangle, \tag{24}$$

$$\mathcal{L}_{\mathrm{raw}} = \Big\langle \sum_m a_m \sum_j w_j \left(\mathcal{R}_{ij}^{(m)}/S_m\right)^2 \Big\rangle, \tag{25}$$

采用尾部权重 $t_{ij} = 1 + [(v_j - u(x_i))^2/(5T_2)]^2$ 以及尺度 $(S_g,\ S_k,\ S_h,\ S_l) = \rho_2(1,\ 2T_2,\ T_2,\ 8T_2^2)$。原始范数主要由分布函数较大且控制宏观场的速度所决定。相对范数将平方残差除以包络，使误差的计数大致与其影响的分子数量成比例，其中也包括激波前方稀疏的高温分子。尾部范数则为携带热流和四阶矩的分子添加了一个随热运动速度的四次方增长的权重；Ko等人 [105] 关于BGK方程加权残差的研究为采用该权重提供了动机，但并未证明当前损失函数的收敛性（补充材料第S8.4节）。系数 a_m 默认均为1。

图 7 说明了为什么单一范数并不足够。在图 5(b) 所示的位置，向上游运行的高温分子占气体的3.0%，却携带了 $\int c^4 g \mathrm{d}v$的98.9%；但它们在原始范数中仅占0.06%，在相对范数中占8%，而在尾部范数中占36%。这只是基于权重的论证；这些项在训练中的作用将在第6.4节进行检验。

其他项在每个配点处施加守恒条件，并固定原点。对于 $J_n(x)$,$n = 1$，2，3，网络的质量、动量和能量通量以及 J_n^{RH}它们的上游值，

$$\mathcal{L}_{\mathrm{flux}} = \Big\langle \sum_{n=1}^{3} \Big(\frac{J_n(x_i)}{J_n^{\mathrm{RH}}} - 1 \Big)^2 \Big\rangle. \tag{26}$$

残差的低阶速度矩 P_k 采用下游尺度进行无量纲化后，即为质量、动量、能量、应力和热流的局部守恒关系（单原子气体有五个；氮气有七个，包括转动热流和转动能），并且

$$\mathcal{L}_{\mathrm{mom}} = \Big\langle \sum_{k} P_k(x_i)^2 \Big\rangle. \tag{27}$$

由于动理学方程无法确定激波的位置，因此将原点处的密度固定为，

$$\mathcal{L}_{\mathrm{pin}} = \Big[\frac{\rho(0) - \bar{\rho}}{\bar{\rho}} \Big]^2, \qquad \bar{\rho} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2}. \tag{28}$$

通量和 P_k 在附录 A中列出。损失函数为

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\mathrm{rel}} + \lambda_T \, \mathcal{L}_{\mathrm{tail}} + \mathcal{L}_{\mathrm{raw}} + \lambda_F \, \mathcal{L}_{\mathrm{flux}} + \lambda_P \, \mathcal{L}_{\mathrm{mom}} + \lambda_0 \, \mathcal{L}_{\mathrm{pin}}, \tag{29}$$

采用默认权重 $\lambda_T = 1$， $\lambda_F = 30$， $\lambda_P = 0.1$以及 $\lambda_0 = 30$。它包含动理学方程、通过（18）给出的解析端态以及守恒条件；其中不涉及离散速度或蒙特卡罗数据。

包络和尾部权重不携带梯度。在 Adam 阶段，它们每一步都会重新计算；在全批量阶段，则在该阶段开始时计算一次，随后固定不变，因此在线搜索期间，损失函数是参数的固定函数。因此，不同阶段的损失值不可比较。

从马赫数5开始，在拟牛顿阶段进行了三项调整，每项调整都通过确定一次停滞的氮气计算的损失函数来设定（第 6.4节）：(i) $\lambda_T = 0.1$，因为当 $\lambda_T = 1$ 时，尾项由上游远处的少数高温分子主导；(ii) $a_l = (T_1/T_2)^2$, ，因为 l的残差——一种不参与任何碰撞靶函数、也不进入其他方程的被动分布——在马赫数7时占 $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$ 和 $\mathcal{L}_{\mathrm{tail}}$ 的五分之四；(iii) $\lambda_P = 100$ 和 $\lambda_F = 3000$ ，在包含300次迭代的最终阶段中使用，因为残差矩约占损失函数的 10^{-3} ，且转动能守恒关系的单符号误差沿激波累积。这些权重是在参考值可用时，于马赫数5至8范围内选定的（表1）。马赫数20以上，(ii)中的权重$(T_1/T_2)^2$ 对于BGK模型的四阶矩而言过小，因此被（32）所取代（第5.4节）。

3.5. 配置点与速度节点

配置点。 方程在沿着激波排列的嵌套配置点集合处施加（图 8a）。在拟牛顿阶段，配置点固定：分别取整个计算域中128个相等

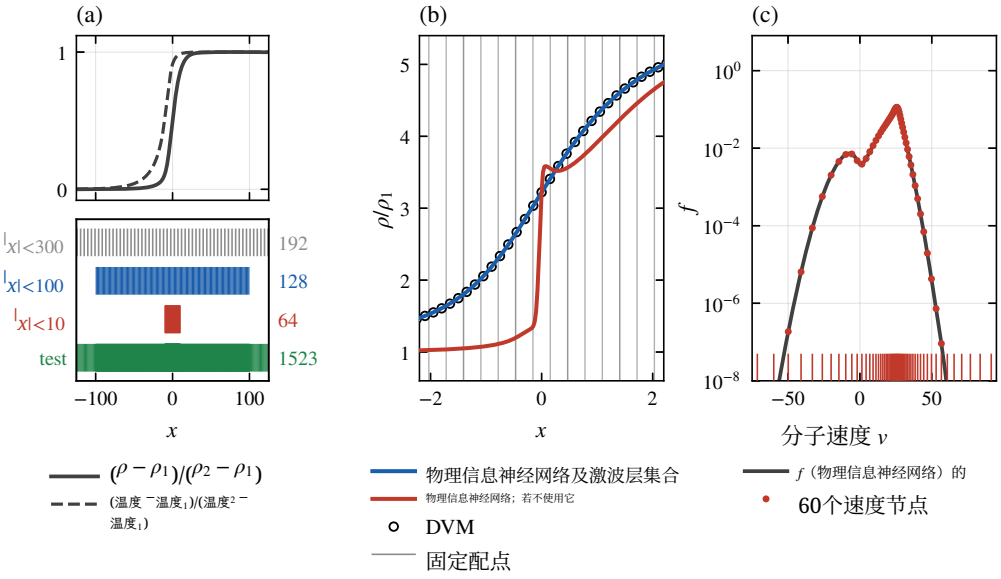

图8：配点和速度节点。(a) 马赫数20（BGK）：归一化密度和温度；下方为拟牛顿阶段三个嵌套集合中的固定配点，以及1523个从未用于训练的测试点；视图为 $|x| < 125$ 计算域 $|x| < 300$。(b) 氮气，马赫数7，从头开始训练，分别不使用和使用激波层集合（第 6.5节）；符号：离散速度法；细竖线：固定配点。(c) 马赫数20的BGK激波在 $x = -10$处的约化分布上的60个速度节点；节点以刻度线形式在坐标轴上重复标出。

网格单元的中点、核心中128个网格单元的中点 $|x| < L/3$、每个端部区间中32个网格单元的中点 $5L/6 < |x| < L$ 以及激波层中64个网格单元的中点 $|x| < 10$，总计384个点。在马赫数20（$L = 300$）时，它们在激波层中的间距为0.31，在核心区和两端为1.6，在其间区域为4.7。在 Adam 阶段，每一步都会抽取新的点：在相同区间的每个划分网格单元中随机取一个位置（每步144个点）。相同区间内的另一组1523个点从不用于训练；这些测试点用于第 3.7节中的测试。补充材料第S8.5 节给出了这些划分。

速度节点。 该分布函数将热速度为单位的窄上游束流与高温部分相结合；在马赫数20下，高温部分 $\sqrt{T_2}$ 很宽，达到11个单位。因此，节点从束流处向外拉伸，

$$v_j = u_1 + d\,\sinh\frac{\Delta v\,\xi_j}{d}, \qquad w_j = \Delta v\,\cosh\frac{\Delta v\,\xi_j}{d}, \qquad \xi_j = \xi_0 + j + \varsigma, \tag{30}$$

其中 $d = 4$ 和 $\Delta v = 0.5$，区间为 $[u_2 - 7.5\sqrt{T_2}, \max(u_1 + 7,\ u_2 + 7.5\sqrt{T_2})]$，，其下端固定了 ξ_0；束流处的间距为 Δv，离开束流后按 $[1+(v-u_1)^2/d^2]^{1/2}$增长。这是在变量 ξ中的中点求积公式，其中被积函数光滑且衰减迅速，因此对于任意偏移量 ς都具有谱精度。拟牛顿阶段使用 $\varsigma = 1/2$；在 Adam 阶段，每一步都从 $[0, 1)$中均匀抽取 ς，从而使方程在所有速度处都得到满足。对于马赫数5至20之间的单原子气体，该规则使用39至60个节点；对于马赫数5至15之间的氮气，使用35至51个节点；相比之下，在马赫数20下，具有相同间距的均匀求积公式使用337个节点（图8c）；其准确度见补充材料第S8.5节。对于马赫数20下的 Shakhov激波，束流处的间距必须减半（第 5.2 节）。在马赫数2下，使用带有 $\Delta v = 0.25$ 的均匀求积公式，不包含激波层集合。

3.6. 马赫数的优化器与延拓

在延拓的第一个马赫数（马赫数5）下，训练分为三个阶段。第一阶段是 Adam [84], ，在随机配置点和速度偏移上进行40 000步训练，学习率从 10^{-3} 按几何级数衰减至 10^{-5}。第二个可选阶段是对输出层进行 Levenberg– Marquardt 求解 [90, 91] ：固定隐藏层后，固定点上的损失函数是441或588个输出权重的平方和，最多通过八次阻尼高斯–牛顿迭代使其最小化。两个阶段都使用默认权重；其设置见补充材料第S8.8节。第三阶段是在所有参数上采用稠密自缩放布罗伊登法 [87, 86, 88]，使用固定的配置点、固定的速度节点和冻结包络：这是一种拟牛顿法，采用逆海森矩阵的完整近似以及强 Wolfe 线搜索（补充材料第 S8.7节）。该方法需要其所最小化函数的精确梯度，这正是冻结包络的原因。当达到预先固定的迭代次数时，或连续六次搜索失败时，阶段提前结束；也可在梯度范数低于 10^{-13} 时结束，或者达到其时间限制；损失函数没有容差要求。在马赫数5下，该阶段使用第 3.4节的权重（i）和（ii）运行1500次迭代，随后使用（iii）运行300次迭代。

每个更高的马赫数都通过延拓获得：仅使用拟牛顿法，从低一个马赫数在其最终阶段之前的参数开始，迭代 800 次（氮气为 600 至 800 次），随后进行最终的 300 次迭代。输入（16）和基准（19）根据新的 Rankine–Hugoniot 状态重新缩放，并由 L 和 a_l 遵循各自的规则。对于 BGK 和 Shakhov 模型，序列为 $5 \to 7 \to 8 \to 10 \to 12 \to 15 \to 20$ ；对于氮气，序列为$5 \to 7 \to 8 \to 10 \to 12 \to 15$。单原子序列从一开始就采用了这一程序；氮气序列在马赫数8时达到该阶段，而其马赫数5和7的解包含更早的阶段，这些阶段的权重后来发生了变化（补充材料第 S8.10节）。在马赫数8处从头开始使用 Adam，以及在马赫数上跨越较大步长使用 Adam，均会失败（第 6.6节）。

3.7. 无参考值的验收测试

三项测试不使用参考解。(a) 质量、动量和能量通量相对于其上游值的最大相对偏差 e_F 小于 10^{-3}；该偏差在整个计算域内以 0.05（氮气为 0.025）的间距选取的位置上进行评估，采用步长为 0.25 的均匀速度规则。(b) 在最终解的包络下，测试点处 r_{rel} 与 $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$ 训练点处相应值的比值，至多为 10。(c) 使用更精细且更宽的速度规则计算矩时，各场相对于其下游尺度的变化小于 10^{-3} 。对于每一族运行，(b) 和 (c) 的点及速度规则见补充章节 S8.6。

对于每一族运行，决定某次运行是否被验收的测试均已预先固定。对于单原子序列（第 5 节）、从头开始的氮气运行以及以马赫数作为输入的网络（第 6 节），测试 (a) 和 (b) 在任何训练开始前就已固定，而测试 (c) 则予以记录。对于氮气序列，仅按规定评估了测试 (a)：测试 (b) 在马赫数 12 的运行结束后才被写下，而在马赫数 15 时虽已规定，却因评估脚本中的遗漏而未被评估。对于三维速度空间的计算，三项测试均已预先固定。任何一次运行只要未通过其中一项测试，就不会被验收，无论其与参考值的距离如何；在它出现的每张表中均会如此标注：马赫数 15 的 Shakhov运行未通过 (a)，第二次马赫数 3 的玻尔兹曼运行未通过 (c)。表 1 列出了每项结果的状态。

这些测试是必要条件，但不是充分条件。一次马赫数20的 Shakhov 运行通过了 (a) 和 (b)，但偏差达46%，详见 Δ （第5节）；而一次表现良好的运行也可能因某个

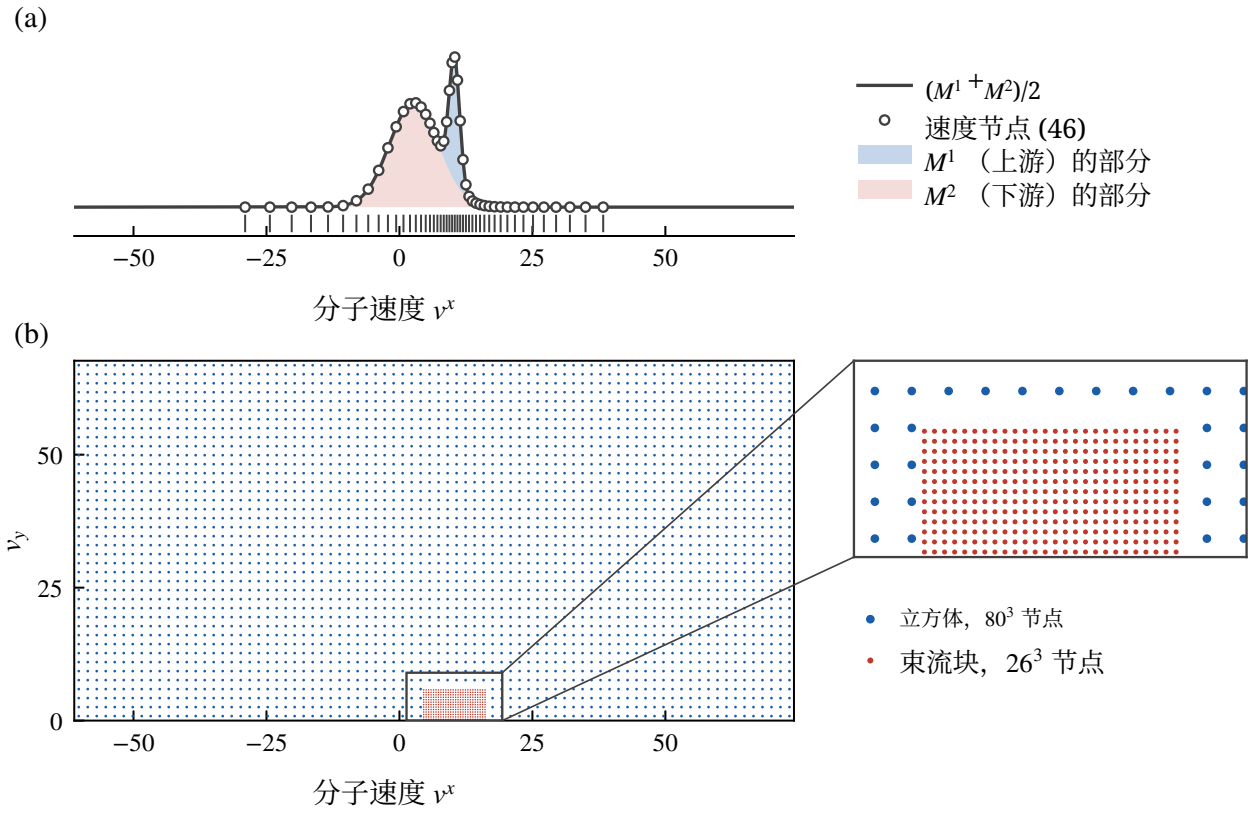

图9：马赫数8时采用单一速度尺度的速度节点。(a) 弛豫模型：拉伸的一维求积规则（单原子气体使用46个节点），绘制在混合物$(\mathcal{M}_1+\mathcal{M}_2)/2$上，其中来自 $\mathcal{M}_1$ 和 $\mathcal{M}_2$ 的部分以阴影标出，节点则以刻度线重复显示。(b) 位于 v_z 恒定平面上的双尺度三维节点：热气体使用由 80^3 个节点组成的均匀立方体，上游束流周围则有由 26^3 个节点组成的块，右侧为放大图；总计529 576个节点。这些节点用于马赫数8和10条件下的玻尔兹曼方程（第7.5节）。

紧邻流入边界的配点而未通过 (b)（第6.4节）；无论运行表现好坏，(b) 的比值都接近1。该问题的典型失败情形（激波在两个配点之间坍缩、求积对束流而言过于粗糙、计算域太短，无法容纳向上游运动的分子）在查阅任何参考值之前，就能通过这些测试检测出来。马赫数 30 至 50 的 Shakhov 运行也通过了这三项测试，但热流偏差为4%至18%（第5.5节）。精确应力平衡和热流平衡的残差具有更好的区分能力（第5.2 节和第5.5节）；这些残差是在单原子运行结束后评估的，并未纳入预先固定的测试中。

3.8. 其他碰撞模型

形式(18)、(29)中的六项以及优化器对四种碰撞模型都是相同的；不同之处在于碰撞项所需的内容。BGK目标分布需要 ρ、 u 和 T；Shakhov目标分布还需要 q，且在高速尾部为负值。两者都使用三个约化分布和五个残差矩。氮气模型增加了分布函数 h、温度T_{rot}、热流 q_{rot}、第二个弛豫时间 Z_τ、能量通量中的转动焓，以及 $\mathcal{L}_{\mathrm{mom}}$中的两个转动平衡方程。对于这三种模型，大约五十个速度节点就足够了（图9a）。

玻尔兹曼在　　积分需要 f 本身在三维速度空间中（附录 C）。未

知量为 $f(x, v, r)$，形式如式 (18)；网络将 r^2/v_s^2作为第七个输入，并返回第四个系数，该系数乘以式 (17) 中的 r^2/v_s^2。残差 $v\,\partial_x f - Q(f, f)$在一个速度节点立方体上进行配置， Q 在该立方体上通过快速谱方法 [37]（补充材料第 S6 节）求值。损失函数保留六项，其中三维热运动速度$|\boldsymbol{c}|^2 = (v-u)^2 + r^2$ 出现在尾部权重和五个 P_k 中（补充材料第 S8.9 节）；权重为 $\lambda_T = 0.1$ ，默认 λ_F、 λ_P和 λ_0，并且没有被动分布，也没有最终阶段。均匀立方体在任意马赫数下都需要约 0.73 的步长，而束流与热气体碰撞所需的方向数随马赫数的平方增长。因此，我们采用两种方法将冷束移出速度网格。在马赫数 3 和 5 时，将束流分离出来，表示为上游麦克斯韦分布乘以一个多项式，并以闭式计算其碰撞（马赫数 $3, 64^3$时使用 48^3 个节点和 12×24 个方向，马赫数 5 时使用 16×32 个节点和 $f =$ 个方向）。对于更强激波，节点分布在双尺度上（图 9b）：一个立方体用于热气体部分，另一个块体围绕束流；并且 $f = (1-s)\mathcal{M}_1\mathcal{F}_b + s\,\mathcal{M}_2\mathcal{F}_h$，其中$\mathcal{M}_1$和 $\mathcal{M}_2$为末态麦克斯韦分布，每个因子 $\mathcal{F}$均具有 $1 + \chi$ sinh N_θ的形式，并各自使用一个网络（总计 15 177 个参数）。

每个玻尔兹曼阶段之前，都会在相同的速度节点上进行一个 Shakhov 阶段。该阶段用于将离散化结果与同一模型的 DVM 解进行比较；此外，采用第 2.2 节的硬球黏度，可为相同长度单位下的玻尔兹曼阶段提供初始点。第 7 节报告了马赫数为 2、3 和 5 时的玻尔兹曼解，马赫数为 8 和 10 时双尺度节点上的 Shakhov 解，以及以这些解为初始点的玻尔兹曼解；马赫数高于 10 的阶段未予报告（第 7.7 节）。

4. 参考解与比较

每个网络都与采用常规方法计算的同一动理学模型的解进行比较：弛豫模型采用 DVM 解，硬球模型则采用 DSMC。本节总结参考解，定义差异度量，并说明方法开发期间何时获得了参考解。

4.1. 激波的离散速度参考值

离散速度求解器、其算法及收敛记录详见补充材料第S5节；此处仅总结其准确度。对于 BGK 和 Shakhov 激波，参考值来自约化方程（12）的稳态求解器。该求解器对宏观场进行迭代；给定场后，沿 x 在光学深度方向上对每个速度进行精确积分，空间步长 Δx下具有四阶精度。此处采用的解满足 $\Delta x = 0.025$，速度步长为 0.25，计算域从马赫数5时的 $[-190, 80]$到马赫数20时的 $[-710, 260]$，再到马赫数100时的 $[-3530, 1260]$。其通量保持恒定，精度达到 2.5×10^{-10} 或更高；估计的数值误差在 2×10^{-10} 至 4×10^{-8} 之间（度量见（31）。

对于氮气，第6 节的所有比较都采用另一个四阶求解器来求解四个约化分布。该求解器是针对马赫数10和15的测试独立编写的，随后用于氮表中的所有马赫数（$\Delta x = 0.025$，或者在马赫数 2、5和7时取0.05）。其估计误差在马赫数8至15之间为 10^{-9}至 3×10^{-8}，在马赫数2、5和7时，其最细的两个网格之间的差异至多为 6×10^{-6}。该方法是在马赫数2、5、7、8和12下，以首个伪时间求解器为参照开发的；后者的误差更大，热流、应力和高阶矩的误差最高可达 5×10^{-4}；只有方法开发过程中报告的差异（第6.4节至6.6节）是相对于该求解器而言的。四阶参考解的误差（包括插值到

评估点的误差，相对于所报告的每一项网络差异都可以忽略不计（补充材料第S8.12节）。

4.2. 硬球的蒙特卡罗参考值

对于硬球，本文将神经网络与本研究所做的 DSMC 计算进行比较 [3]（补充材料第S6节）：采用无时间计数法，网格单元大小为 $\lambda_1/160$，每个网格单元模拟 16 000 个分子 λ_1，并使用 48 个相互独立的系综来计算标准误差。在马赫数 2、3、5 和 8 时，通量的守恒精度为 7×10^{-5}，8×10^{-5}，5×10^{-5} 和 4×10^{-5}。马赫数 10 时，参考值来自将网格单元和时间步长减半、并使用 24 个系综的计算；在激波范围内，该结果与采用标准网格单元的计算结果之差小于跃变的 10^{-3}。剖面与 Ohwada 的三位小数表格 [121] 在马赫数 1.1 时的结果相差不超过 1.3×10^{-3}，与 Dodulad 和 Tcheremissine 的表格 [31] 在马赫数 3 和 8 时的下游值相差 2×10^{-4} 至1.5×10^{-3}；在马赫数 5 时将网格单元和时间步长减半，所得结果变化小于其尺度的 10^{-3}。马赫数 5 时，各场的标准误差约为其尺度的 10^{-4}；马赫数 2 时，2×10^{-3} 的标准误差达到 m_{xxx}，因此，第7节报告的每一项差异都包含参考值的统计误差。

4.3. 差异度量

对于场 a，网络 a_θ 与参考值 a_{ref} 之间的差异为相对 L^2 范数

$$\varepsilon_a=\left[\frac{\sum_{x_i\in I}\big(a_\theta(x_i)-a_{\mathrm{ref}}(x_i)\big)^2}{\sum_{x_i\in I}b_{\mathrm{ref}}(x_i)^2}\right]^{1/2},\tag{31}$$

其中 $b_{\mathrm{ref}}=a_{\mathrm{ref}}-a_{\mathrm{ref},\,1}$ 对于 ρ，u，T，T_{tr} 以及 T_{rot}，其中 $a_{\mathrm{ref},\,1}$ 为上游值，而 $b_{\mathrm{ref}}=a_{\mathrm{ref}}$ 适用于所有其他场。求和遍历窗口 I内以 0.05（氮气为 0.025）均匀间隔分布的评估点，并将参考值线性插值到这些点上。因此，对于密度、速度和温度，差异是相对于激波两侧场的变化来度量的，这比前一篇论文中所使用的场范数更为严格 [8]；其他场在平衡态下为零，因此以其自身范数作为参照进行度量。第 δ_ρ 2.4 节中的密度厚度 ρ 由各个解在评估点上的最大中心差商构成（对于四阶氮气参考解，则使用通过五个节点的四次多项式的最大斜率）。

参考剖面经过平移，使其密度中点 $(\rho_1+\rho_2)/2$ 位于 $x=0$，即式（28）对网络施加的原点；在三维速度空间的计算中，网络的剖面也按同一规则平移。不进行位移或振幅拟合。窗口为 $|x|\le\min(2L/3,40)$；对于氮气，在马赫数2、5及以上时分别为20、33.3和40。对于 BGK 和 Shakhov 激波，窗口取参考密度与两个端态的差值均超过跃变量 10^{-4} 的区间，并向两侧各延伸10，因此涵盖前驱区。在三维速度空间的计算中，窗口为 $|x|\le40$；硬球在马赫数2、5、8和10时例外，窗口分别为 $|x|\le20$、18、17和 $18\,\lambda_1$，与直接模拟蒙特卡罗剖面的范围一致。氮气窗口排除了远前驱区的大部分区域，而网络在该区域的精度最低（第6.7节）；因此，氮气的差异不能与单原子气体的差异直接比较，而且这种窗口选择有利于网络。

当差异与参考值的误差相当时，例如马赫数2下硬球模型的宏观场（第 7.2节），它并不能衡量网络的误差。

4.4. 开发过程中参考值的使用

本文所有计算中，参考值都不会用于损失函数、点的选择、优化器步的验收或停止规则。所有报告的结果，都是在迭代次数或时间限制预先固定的某个阶段结束时的状态，而非与参考值最接近的状态。不过，在两种情形下，参考值影响了所报告运行的选择：马赫数20下的 Shakhov 延拓之所以启动，是因为比较结果表明其前序结果有误（第 5.2节）；马赫数 15 下的 Shakhov 运行则是在比较之后保留下来的（第 5.1节）。有一种情形是在运行结束前查阅了参考值：马赫数10下的玻尔兹曼阶段在第 550 次迭代时进行了比较，随后仍按预先固定的 800 次迭代继续运行（第 7.5节）。表 1 列出了每项结果的参考值在开发期间是否可用、哪些内容是预先固定的，以及该结果在第 3.7节的测试中的表现；补充表 S12 还列出了每项结果所用的优化器。

氮气方法在马赫数2、5、7、8和12时进行开发；训练期间会打印与第一个 DVM 求解器的距离，并据此选定第 3.4 节中的三个权重。随后在马赫数10和15时对该方法进行测试，此时无法监控任何内容（第 6.3节）；在任何参考值出现之前，只有马赫数10的解被冻结。之后运行了单原子序列；在开始任何训练之前，训练过程、验收测试和比较规则都已固定，并记录了代码哈希值；其训练脚本不含读取参考值的代码，而且集群上也不存在参考值。每次运行都只在写入无参考评估结果后与相应参考值比较一次；每次后续尝试都只改动一项内容，该改动依据不使用参考值的诊断结果选定，并以新名称记录。三维速度空间下的计算遵循同一规则。只有两种例外：马赫数10时玻尔兹曼阶段的中期比较（第 7.5节），以及马赫数20以上被动分布的诊断，该诊断使用了 DVM 的分布函数（第 5.4节）。

5. 单原子激波

5.1. 运行与程序

单原子激波采用氮气激波（第6节）的训练过程，不作任何改动，适用于 BGK（普朗特数 $= 1$）和 Shakhov（普朗特数 $= 2/3$）模型，参数为 $\tau = 1/\rho$：损失函数（29），采用三个约化分布 g、k、l，残差的五个矩，包含 7834 个参数的网络，以及半长度 $L = 15M$。马赫数 5 从头开始训练，马赫数 7、8、10、12、15 和 20 则通过延拓获得（第 3.6节）。设置、第 3.7 节的测试 (a) 和 (b)，以及比较规则，均在提交任何作业之前预先固定（第 4.4 节；补充材料第 S9.1 节）；每次运行均在第 4.3节所述窗口内，与同一模型的 DVM 解比较一次。权重是在有参考值可用的氮气情形下选定的；表 2中的马赫数 20 Shakhov 解，则是在较早的尝试经过比较后获得的（表 1）。随后，从已接受的马赫数 12 运行出发，采用预先固定的设置重新求解了马赫数 15 和 20 的 Shakhov 激波（第 5.5节），并将 BGK 延拓扩展至马赫数 70（第 5.4节）。

表 2 列出了测试以及与离散速度法的差异，图10 展示了马赫数20时的剖面，补充图 S1 绘制了相对于马赫数的差异。所有BGK模拟和马赫数12以内的Shakhov运行均通过测试 (a) 和 (b)，并在三阶以内以0.3百分比的误差再现各场。随着马赫数增大，误差转移至四阶矩：对于BGK R_{xx} 和 Δ 在马赫数12以内保持在0.7百分比之内，并达到3.8和5.7百分比

表1：每项结果的状态。参考可用性：同一情形的参考值是否会影响训练过程、权重或所报告运行的选择。测试：第3.7节中的无参考测试；n.e.，未评估。

结果	参考可用性	预先固定	测试
BGK，$\tau = 1/\rho$ 和 $\tau = 1$，马赫数5–20；Shakhov ，马赫数 5–12	否（权重基于氮气选取）	程序、测试、比较	(a)、(b) 通过
BGK、$\tau = 1/\rho$、马赫 30、40	在 L时进行检查，输入和宽度已选定	四项更改、测试、比较	（a）、（b）已通过
BGK、$\tau = 1/\rho$、马赫数50	否；预测在……之前已进行哈希参考值已读取	四项更改、测试、比较	（a）、（b）通过
BGK，$\tau = 1/\rho$，马赫数70，$a_l = (T_1/T_2)^2$	参考值，非盲测	延拓、测试、比较	(a)、(b)已通过
BGK、$\tau = 1/\rho$、马赫数100，$a_l = (T_1/T_2)^2$	否；在已读取参考值	延拓、测试，比较	(a)、(b) 通过
BGK、$\tau = 1/\rho$、马赫数60、两个权重，1100 次和 2100 次迭代	否；参考值在此之后计算四个预测已进行哈希处理	四次运行、测试、比较	(a)、(b) 已通过
BGK，$\tau = 1/\rho$，权重（32）、马赫数 20–100	是：在马赫数20下测试的权重与参考值比较；参考值之前检查	规则（32），每次运行、测试、比较	(a)、(b) 均通过
BGK、$\tau = 1/\rho$、有界形式、马赫数 5–12	no	唯一的改动（形式）、测试、比较	(a)、(b) 均通过
Shakhov、马赫数 15	在比较后保留	程序、测试、比较	（a）未命中
Shakhov，马赫数20（尝试C）	在比较……后开始尝试B	每次尝试	(a)、(b)通过
Shakhov，马赫数 15 和 20，从马赫数 12 延拓	与先前参考值比较runs	设置、测试、比较	(a)、(b)、(c) 已通过
Shakhov，马赫数 30 至 50，两种权重（方法的局限）	马赫 30、40：此前已检查；马赫数50：使用该第一种权重此前已哈希已读取参考值	设置、测试、比较	(a)、(b)、(c) 已通过；远离参考值
氮气、马赫数2、5、7、8、12	是，首次打印的离散速度法位于训练	无	(a) 已通过；(b) 不适用。
氮气，马赫数10	不存在参考值	解已冻结并进行哈希处理在参考值之前	（a）已通过；（b）不适用。
氮气，马赫数 15	在此前观察到的参考峰作业已结束	程序和命令；预测 哈希	(a) 通过；(b) 不适用
氮气、马赫数5消融和运行从头开始	no	每次运行	参见表 S4
氮气，一个网络适用于马赫数 2–8	no	运行、测试、冻结	(a)、(b) 通过
玻尔兹曼、马赫数2（两次运行）	no	每次运行	(a)、(b)、(c) 通过
玻尔兹曼，马赫数 3，第一次运行	no	该运行	(a)、(b)、(c) 已通过；线搜索失败；由……继续第二次运行
玻尔兹曼，马赫数 3，第二次运行	no	唯一的变化	（c）遗漏；时间限制
玻尔兹曼，马赫数5	否；与……比较过一次三项测试之后的直接模拟蒙特卡罗	唯一的更改（算子）	(a)、(b)、(c)均已通过
Shakhov、双尺度节点、马赫数8、10	马赫数8的离散速度法与先前的运行	每次运行	(a)、(b)、(c) 均已通过
玻尔兹曼，马赫数8	否；与……比较过一次在三项测试后进行直接模拟蒙特卡罗	运行，800 次迭代，测试	(a)、(b)、(c) 均已通过
玻尔兹曼，马赫数10	第 550 次迭代时的中期比较共 800 次；比较最终状态once	该运行，800 次迭代，测试	(a)、(b)、(c) 已通过

表 2：单原子激波，$\tau = 1/\rho$：无参考测试及相对 L^2 差异（31），即网络与同一模型的 DVM 解之间的差异，单位为百分比。e_F：最大通量误差，测试 (a)，限值为 10^{-3}；r_{rel}：测试 (b) 的比值，限值为 10；通过：该运行通过预先固定的测试（马赫数 15 下的 Shakhov 运行未通过测试 (a)，因此不予接受）。马赫数 20 下的 Shakhov 项是表3中的尝试 C。马赫数 12 及以上的四阶项存在不确定性，最大约为两倍：在马赫数 20 下，通过测试的基准变动会使这些项变化 5% 至 80%（第5.2节）。所有运行的密度厚度、最小热通量和最大应力：补充表S3。

模型	M	$10^4 e_F$	r_{rel}	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ	通过
BGK	5	0.069	1.00	0.0026	0.0015	0.0019	0.012	0.016	0.047	0.052	0.066 a	, b
	7	0.13	1.00	0.0030	0.0027	0.0017	0.015	0.024	0.048	0.18	0.26 a	, b
	8	0.18	1.00	0.0022	0.0014	0.0021	0.017	0.0099	0.042	0.21	0.33 a	, b
	10	0.40	1.00	0.015	0.0047	0.0029	0.048	0.061	0.12	0.42	0.59 a	, b
	12	0.53	1.00	0.024	0.0067	0.0041	0.068	0.11	0.14	0.45	0.64 a	, b
	15	0.39	1.00	0.020	0.0095	0.0091	0.059	0.079	0.089	2.2	3.4 a	, b
	20	0.95	1.00	0.066	0.018	0.014	0.18	0.27	0.29	3.8	5.7 a	, b
Shakhov 5		0.52	1.00	0.0029	0.0016	0.0017	0.010	0.020	0.037	0.060	0.11 a	, b
	7	2.3	1.00	0.011	0.0083	0.0092	0.045	0.073	0.17	0.61	0.78 a	, b
	8	2.3	1.00	0.0091	0.0074	0.0084	0.034	0.067	0.17	0.55	0.77 a	, b
	10	3.3	1.00	0.012	0.010	0.012	0.049	0.090	0.16	1.6	2.2 a	, b
	12	8.6	1.01	0.016	0.014	0.020	0.086	0.084	0.17	3.5	5.0 a	, b
	15	19	1.04	0.049	0.058	0.11	0.41	0.24	0.86	4.7	6.7 b	
	20	0.82	0.94	0.021	0.018	0.038	0.13	0.11	0.24	2.3	3.5 a	, b

马赫数 20 时为百分比，而 Shakhov 在马赫数 12 时分别达到 3.5 和 5.0 百分比。马赫数 15 时的 Shakhov 运行未通过测试 (a)（$e_F = 1.9 \times 10^{-3}$），因此不予接受；这里列出它，是因为比较后仍予以保留（第 4.4 节）。在更精细、更宽的速度规则下进行测试（c）时，所有场的变化都不超过其下游尺度的 2.6×10^{-4}。法向温度的最大值 T_{xx}，由质量通量和动量通量守恒确定为密度的函数（Yen [122]），在每次运行中都能以其数值的 4×10^{-5} 精度重现；因此，这种超调并不能检验碰撞模型（补充材料第 S9.2 节）。

BGK 激波与 Shakhov 激波之间的差异取决于碰撞模型，而网络能够重现这一差异。马赫数 20 时，Shakhov 激波更厚（$\delta_\rho = 25.2$，而 19.6），热流更大、应力更小，其温度比下游值高出 1.6 百分比（网络的最大值为 127.95，离散速度法（DVM）的最大值为 127.96，$T_2 = 125.87$）；相比之下，DVM 的 BGK 温度单调变化，而网络的温度仅在远下游处超过 T_2，且超出幅度只有1.1×10^{-4}。在所有通过测试的运行中，网络的厚度与 DVM 数值相差不超过 0.25 百分比；马赫数 15 时的 Shakhov 运行则低了 0.36 百分比（补充表 S3）。哪个模型更接近玻尔兹曼方程是另一个问题；与麦克斯韦分子的直接模拟蒙特卡罗（DSMC）结果相比，Shakhov 激波的厚度更接近，但其超调幅度过大，为实际值的两到七倍（第 8 节）。

5.2. 马赫数20下的 Shakhov激波

预先固定设置时，马赫数20下的Shakhov激波并未求解成功，表3中的尝试展示了无参考测试能检测到什么、又会漏掉什么；完整说明见补充材料第S10.2 节。计划步长和尝试A未通过测试 (a)，而不借助参考值进行诊断时，定位到冷束中的通量误差。尝试B采用$\Delta v = 0.25$，通过了测试 (a) 和 (b)，但在 q 中与离散速度法相差2.5个百分点，在 Δ中相差46个百分点，这表明这些测试并不充分；其损失函数仍在下降，而

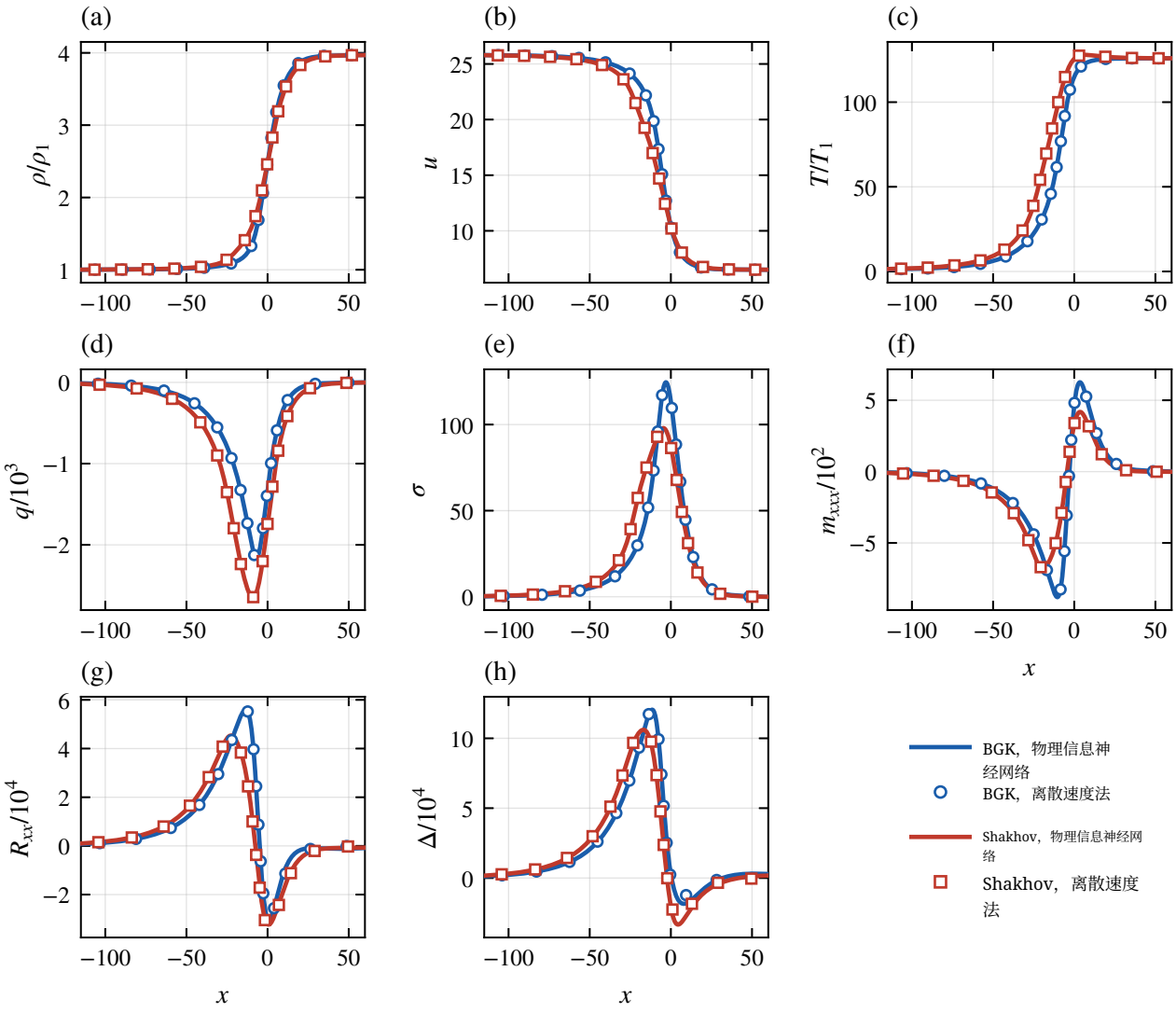

图 10：单原子气体，马赫数20，BGK（蓝色）和 Shakhov（红色）：(a) ρ，(b) u，(c) T，(d) q，(e) σ，(f) m_{xxx}，(g) R_{xx}，(h) Δ。线条：物理信息神经网络；符号：相同模型的离散速度法。

其剖面上的精确应力平衡和热流平衡残差分别为 1.4×10^{-2} 和 1.5×10^{-2}。尝试C在尝试B的基础上继续迭代4000次，得到本文报告的结果（在 q 和 σ中为0.13个百分点，在 R_{xx} 和 Δ中为2.3和3.5个百分点，平衡残差为 2.1×10^{-3} 和 1.4×10^{-3}），但这并非盲测：之所以启动该尝试，是因为比较已表明尝试B有误。尝试D是在尝试B的基础上使用更宽的网络，在场的三阶量上复现了尝试B（ q中为2.4个百分点）。

在马赫数 20 下也尝试了三种基准（19），但最终均未采用（补充材料第S1节）。这些结果表明，四阶项的确定性很低：加入第三个麦克斯韦分布后，其训练所得权重仍微不足道，却使 R_{xx} 和 Δ 分别变化了 25%（Shakhov）和 5%（BGK）；前体基底也通过了测试，使它们分别变化了 50%（Shakhov）和 80%（BGK）。将报告中的 BGK 模拟继续迭代 1300 次后，ρ、q 和 σ 的误差降低了三至五倍，但 R_{xx} 和Δ 的误差没有变化（补充表S1），因此它们的误差并非单纯源于优化未完成；其原因——被动分布 ι的权重——将在第5.4节中说明。另一次 BGK

表 3：马赫数20（$\tau = 1/\rho$）下改变程序的运行，各项均为预先固定，并进行无参考测试，结果与离散速度法的差异以百分比表示。A：减小马赫数步长；B： $\Delta v = 0.25$；C：在 B 的基础上分别继续进行 2000 次和 4000 次拟牛顿迭代；D：B 使用宽度为 64 的网络；每个模型最后两次运行改变了基底（19）。报告的结果标记为 $*$。两次运行中，基底宽度沿每个分子的自由路径变化（碰撞历史基底），结果均崩溃（$e_F = 0.20$ 以及 0.31，厚度为 0.2），因此未列出；所报告的 BGK 模拟的延拓见补充表 S1。

模型	Run	$10^4 e_F$	r_{rel}	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
Shakhov	计划值，$15 \to 20$	21	1.03	0.26	0.37	0.80	2.7	1.6	5.9	26	39
	A, $15 \to 17 \to 20$	21	1.03	0.20	0.21	0.46	1.6	0.94	3.5	17	24
	B	2.6	0.96	0.24	0.33	0.71	2.5	1.4	5.4	31	46
	C, 2000	1.2	0.99	0.045	0.031	0.063	0.23	0.17	0.47	8.7	13
	C, 4000 $*$	0.82	0.94	0.021	0.018	0.038	0.13	0.11	0.24	2.3	3.5
	D	2.7	0.95	0.21	0.33	0.71	2.4	1.4	5.3	20	29
	第三麦克斯韦分布	0.74	0.95	0.023	0.018	0.037	0.13	0.11	0.25	1.7	2.7
	前体基底	0.61	0.85	0.0072	0.011	0.022	0.078	0.050	0.17	1.2	1.7
BGK	计划值，$15 \to 20$ $*$	0.95	1.00	0.066	0.018	0.014	0.18	0.27	0.29	3.8	5.7
	第三麦克斯韦分布	1.1	1.00	0.071	0.020	0.018	0.19	0.29	0.34	3.6	5.4
	前体基底	0.66	1.00	0.043	0.012	0.012	0.11	0.19	0.29	6.9	10

表 4：采用恒定碰撞时间 $\tau = 1$ 的 BGK模型， [8] 的 BGK计算约定：与同一模型的离散速度法解相比的相对L^2差异（百分比），以及密度厚度。全部七次运行均通过测试 (a) 和 (b)。

								δ_ρ	
M	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ物理信息神经网络	离散速度法
5	0.0056	0.0022	0.0039	0.049	0.032	0.12	0.28	0.69	11.206	11.198
7	0.020	0.0068	0.0082	0.13	0.085	0.23	0.78	1.7	14.995	14.989
8	0.023	0.0064	0.0080	0.13	0.10	0.14	0.97	2.0	16.934	16.947
10	0.054	0.015	0.011	0.24	0.26	0.74	1.5	2.2	20.928	20.922
12	0.078	0.020	0.013	0.27	0.48	1.1	3.1	5.1	24.940	24.939
15	0.11	0.029	0.037	0.34	0.87	1.8	6.6	10	30.982	31.005
20	0.14	0.035	0.049	0.64	0.75	1.8	18	29	41.076	41.166

延拓使用另一个随机种子进行，仅比较了一次；在马赫数 20 下， R_{xx} 和 Δ 的误差分别为 6.8% 和 10%，而此前分别为 3.8% 和 5.7%，所有低阶场的差异均在首个结果的 1.5 倍以内。结合下文的恒定碰撞时间计算，这些结果表明，当权重$a_l = (T_1/T_2)^2$, 时，马赫数 12 及以上的四阶项存在不确定性，误差最多约为两倍。

5.3. 恒定碰撞时间

前一篇论文中马赫数 7、8 和 12 的 BGK激波采用了恒定碰撞时间，$\tau = 1$，并且在马赫数 8 和 12 [8]处需要进行特征修正。第三次延拓从马赫数 5 到 20，只有 $\tau = 1$ 发生了变化（目标值和因子 χ），从而得到了同类比较（表4）。七次运行均通过测试 (a) 和 (b)，其中 e_F 介于 10^{-5} 和 6×10^{-5} 之间，而 $r_{\text{rel}} = 1.00$为。在没有任何修正的情况下，网络给出的热流和应力在马赫数 8 时与离散速度法的结果相差不超过 0.13%，在马赫数 12 时分别相差不超过 0.27% 和 0.48%（表 4）；宏观场在马赫数 20 以内相差不超过 0.14%；未与

表 5：BGK模型，$\tau = 1/\rho$，从马赫数20延拓至50：无参考测试，以及与同一模型的离散速度法解相比的相对 L^2 差异（百分比）。三次运行均通过测试 (a) 和 (b)。马赫数50的预测在读取任何马赫数50参考文件之前已保存并进行哈希处理；在选择计算域、输入和基宽时，已检查过马赫数30和40的参考值。

M	$10^4 e_F$	r_{rel}	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
30	1.2	1.00	0.076	0.023	0.032	0.24	0.26	0.34	6.6	10
40	1.6	1.00	0.093	0.030	0.044	0.30	0.32	0.41	8.9	13
50	2.5	1.01	0.10	0.035	0.053	0.34	0.31	0.47	14	21

前一篇论文的参考文件进行比较。四阶矩比使用$\tau = 1/\rho$ 时在每个马赫数下都更差，在马赫数 12 、 15 和 20 时， Δ 分别为 5% 、 10% 和 29%，尽管测试均已通过；未进行重试。

5.4. BGK 延拓至马赫数*100*及被动分布的权重

BGK 延拓从马赫数20扩展至30、40和50，期间预先固定了四项设置：半长度 $L = 20M$、输入的尺度 双曲正切(x/a) 乘以 $M/20$、基宽在每一步开始时重置为 $0.723M$ 随后进行训练，以及从上一步沿用的参数。每一步进行了800次和300次拟牛顿迭代，三个步骤共耗费一个处理器核心5.2小时。三次运行均通过测试 (a) 和 (b)，而测试（c）中没有任何场的变化超过其下游尺度的 2.2×10^{-4} （表 5）。在马赫数50时，盲测比较显示，宏观场与离散速度法的结果相差不到0.1%， q、 σ 和m_{xxx} 相差不到0.5%，而 R_{xx} 和 Δ 则相差14%和21%。图 11 展示了激波中的分子，并比较了网络的约化分布与离散速度法各场在三个位置处的分布：在分布值超过其最大值 10^{-3} 的速度范围内，两者的相对差异分别为0.7%、0.5%和0.2%（相对 L^2），对应 $x = -60$ 、 -20 和 0；网络中向上游运动的分子占比分别为 2.12% 、 11.3% 和22.5%，离散速度法各场的对应占比分别为2.11%、11.3%和22.5%。补充视频 5 对相同数据进行了动画展示（https://www.youtube.com/watch?v=_u03dhZOFhA）。

原因。 R_{xx} 和 Δ 是被动分布函数 l 所贡献的唯一场，且二者关于 l均为线性。在激波内及激波后的三个位置处，使用离散速度法的 l 代替网络自身的结果，重新计算了网络的两个矩；该诊断采用参考值。在马赫数50下，位于密度中点后方半个厚度处， Δ 的误差为 -1.079×10^6，其中 -1.080×10^6 来自 l；在马赫数20以及其他位置处也同样如此（补充章节 S10.1）。损失函数几乎无法约束 l：当 $a_l = (T_1/T_2)^2$ 时，其在训练点上对 $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$的贡献，在马赫数20下为 g 的10百分比，在马赫数50下为1.7百分比；这一数值无需参考值。由于 l在远上游处的残差（章节 3.4），该权重此前被设得很小；但在激波后，它太小了。

马赫数*20*处的测试和规则。在马赫数20处测试了权重，方法是继续已报告的 BGK 模拟；每次运行均预先指定，并进行一次比较。将权重增大十倍 a_l ，在300次迭代中没有任何变化。将权重增大一百倍 $a_l(6.3 \times 10^{-3})$，再进行1300次迭代后， R_{xx} 和 Δ 的差异从3.8%和5.7%降至0.65%和1.1%；使用原始权重进行相同的1300次迭代后，差异仍为3.8%和5.8%。满足了预先固定的判据（测试通过；R_{xx} 和 Δ 至多为已报告运行值和第二个随机种子对应值的一半；低阶场的表现不会差超过1.5倍）。较大的权重在低阶上会带来少许代价：与

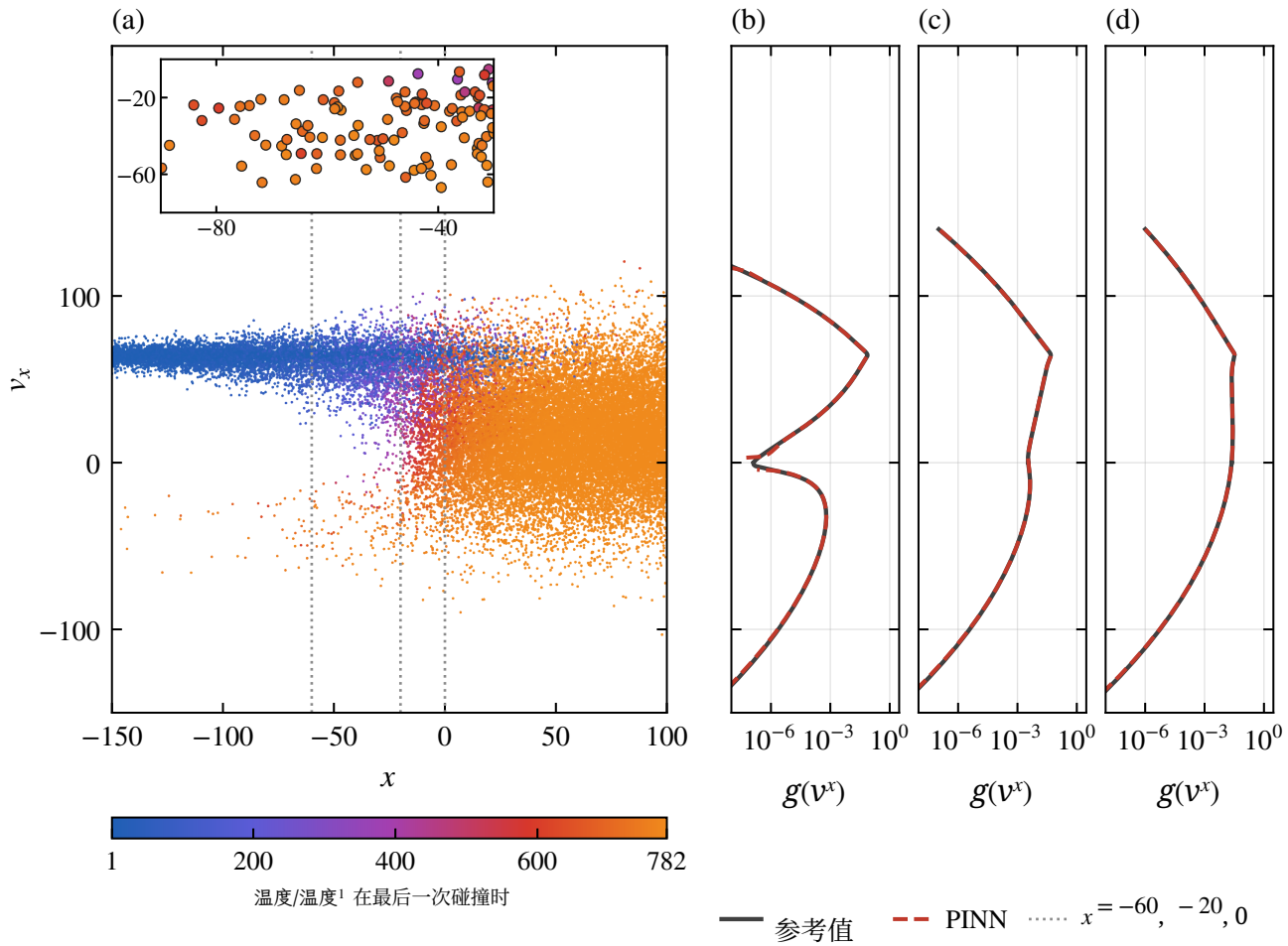

图 11：马赫数50时的BGK激波，$\tau = 1/\rho$。（a）位置 x 与速度 v_x构成的平面内的分子：对 DVM 场稳态分布函数的 30 000 个样本，按每个分子最后一次碰撞时所在位置的气体温度着色；框选插图放大显示激波前方 $-90 < x < -30, -80 < v_x < 0$区域，其中向上游运动的分子以较大尺寸绘制；散点图以每英寸 400 点栅格化。（b）、（c）、（d）分别为 $x = -60, -20$ 和 0 处的约化分布函数 $g(v_x)$，对应（a）中的虚线，纵轴为 v_x，与（a）相同。实线：DVM 场的 BGK 分布；虚线：物理信息神经网络（表 5 的盲预测，$a_l = (T_1/T_2)^2$）。两条曲线仅在（b）子图中 $v_x = 0$ 附近的极小值处明显分开，其中$g < 10^{-6}$。长度以密度中点为基准，单位为 ℓ_0；速度单位为 $\sqrt{RT_1}$。补充视频 5 展示了这些数据的动态效果（https://www.youtube.com/watch?v=_u03dhZOFhA）。

使用原始权重并进行相同迭代次数的运行相比，T 和 m_{xxx} 的差异分别大1.3倍和1.9倍。对于更高的马赫数，该规则

$$a_l = 6.3 \times 10^{-3} \frac{T_2(20)}{T_2(M)}, \qquad T_2(20) = 125.87, \tag{32}$$

在各次运行前已固定，因为 l 的未加权残差与 g 之比会随着T_2 增大（在马赫数20时为1600，在马赫数50时为 10 800，其中 T_2 分别为126和782）。这使得在马赫 30、40、50、70和100时分别取 $a_l = 2.8 \times 10^{-3}$、1.6×10^{-3}、1.0×10^{-3}、5.2×10^{-4} 和 2.5×10^{-4}。因此，该规则的参考可用性选为马赫数20，与损失函数的其他权重相同（表1）。

马赫数 30 至 70。 从马赫数20运行开始，采用更大的权重，并结合第一次延拓的四项变更以及（32）重复进行延拓；每一步均进行800次拟牛顿迭代

表6：BGK模型，$\tau = 1/\rho$，马赫数20至100：无参考测试，最大残差 b_q，即网络剖面上精确热流平衡的最大残差（作为其最大项的分数），以及相对于 L^2 同一模型的离散速度法解的相对差异，以百分比表示。前几行：表 $a_l = (T_1/T_2)^2$ 5中的权重，延续至马赫数70和100。其他行：权重（32）；在马赫数20以上，这些运行每步还进行2100次而非1100次拟牛顿迭代。所有运行均通过测试 (a) 和 (b)。除马赫数100且权重为 $a_l = (T_1/T_2)^2$, 的运行外，这些比较均非盲测；该运行的预测结果在读取参考值之前已进行哈希处理；而权重为（32）的马赫数100运行是在打开该参考值之后进行比较的。

a_l	M	$10^4 e_F$	r_{rel}	$10^3 b_q$	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
$(T_1/T_2)^2$	70	5.3	1.01	6.8	0.12	0.081	0.16	0.67	0.43	1.2	39	60
	100	6.4	1.00	26	0.17	0.23	0.46	1.8	0.80	3.1	53	81
(32)	20	0.45	1.00	0.48	0.014	0.0070	0.012	0.067	0.058	0.17	0.65	1.1
	30	0.79	1.00	0.64	0.018	0.0082	0.013	0.081	0.057	0.13	0.76	1.2
	40	1.9	1.00	0.94	0.024	0.011	0.017	0.11	0.071	0.15	0.96	1.6
	50	2.3	1.01	1.0	0.019	0.0095	0.016	0.091	0.057	0.15	1.7	2.7
	70	4.3	1.01	2.2	0.029	0.017	0.030	0.15	0.085	0.24	2.0	3.2
	100	5.2	1.00	4.1	0.041	0.034	0.073	0.32	0.16	0.46	4.3	7.1

随后使用最终阶段的权重进行1300次迭代，以2100次取代1100次；四个步骤耗时约14个处理器核心小时，其中包括评估时间。所有运行均通过测试 (a) 和 (b)（表 6），测试（c）使各场的变化均不超过其下游尺度的 3.1×10^{-5}。在 R_{xx} 和 Δ 方面，差异缩小了8至20倍：在马赫数70时，分别为2.0%和3.2%，而不是39%和60%（图 12）；在马赫数50时，分别为1.7%和2.7%，而不是14%和21%（表6，图 13a）。这些运行与第一次延拓有两点不同：权重不同，以及每一步的迭代次数不同（2100次而不是1100次）。在马赫数20处将这两项因素分离；在那里，使用原权重进行相同的额外迭代后，R_{xx}和 Δ 保持不变；在马赫数60处也观察到这一点（见下文）。低阶场同样得到改善，改善幅度为2.5至5倍；每一步更长时间的优化可能是部分原因。在马赫数70时，宏观场的差异小于0.03%，q 和 σ 的差异小于0.15%，而 m_{xxx} 的差异小于0.24%；密度厚度为67.86，而离散速度法的结果为67.93（图12）。四阶矩中残留的误差随马赫数缓慢增大。这些比较并非盲测；本文针对BGK模型的盲测结果是采用第一种权重得到的马赫数50预测结果，以及下文马赫数60处的四次运行。

马赫数100。 从马赫数70到100的步进在两次延拓中均采用其下方各步的设置（$L = 2000$；在第二次延拓中 $a_l = 2.5 \times 10^{-4}$ 通过（32）完成）。采用第一个权重时，马赫数100的预测结果在读取其参考值之前已被哈希；它通过了测试（a）、（b）和（c），但 R_{xx} 和 Δ 分别与离散速度法相差53%和81%，而 q 1相差0.8%，其热流平衡残差 2.6×10^{-2}是第 5.5 节（表 6）中水平的五倍。采用权重（32）时，该步首次尝试便通过了三项测试（测试（c） 2.8×10^{-6}；包括评估在内耗时9.0小时、使用一个核心），宏观场与离散速度法的差异在0.073%以内，q，σ 且m_{xxx} 在0.46%以内，R_{xx} 并且 Δ 在4.3%和7.1%以内；密度厚度为96.87，而参考值为97.00，热流平衡残差为 4.1×10^{-3}。这一比较并非盲测：在采用第一个权重的运行中打开马赫数100的参考值之后才进行比较，尽管此后没有据此选择该运行中的任何内容。

*在马赫数60处将权重和迭代次数分开考察。*马赫数20以上、采用该权重（32）的运行同时改变了两项因素。两项因素都在马赫数60处进行了调整；该马赫数没有参考值

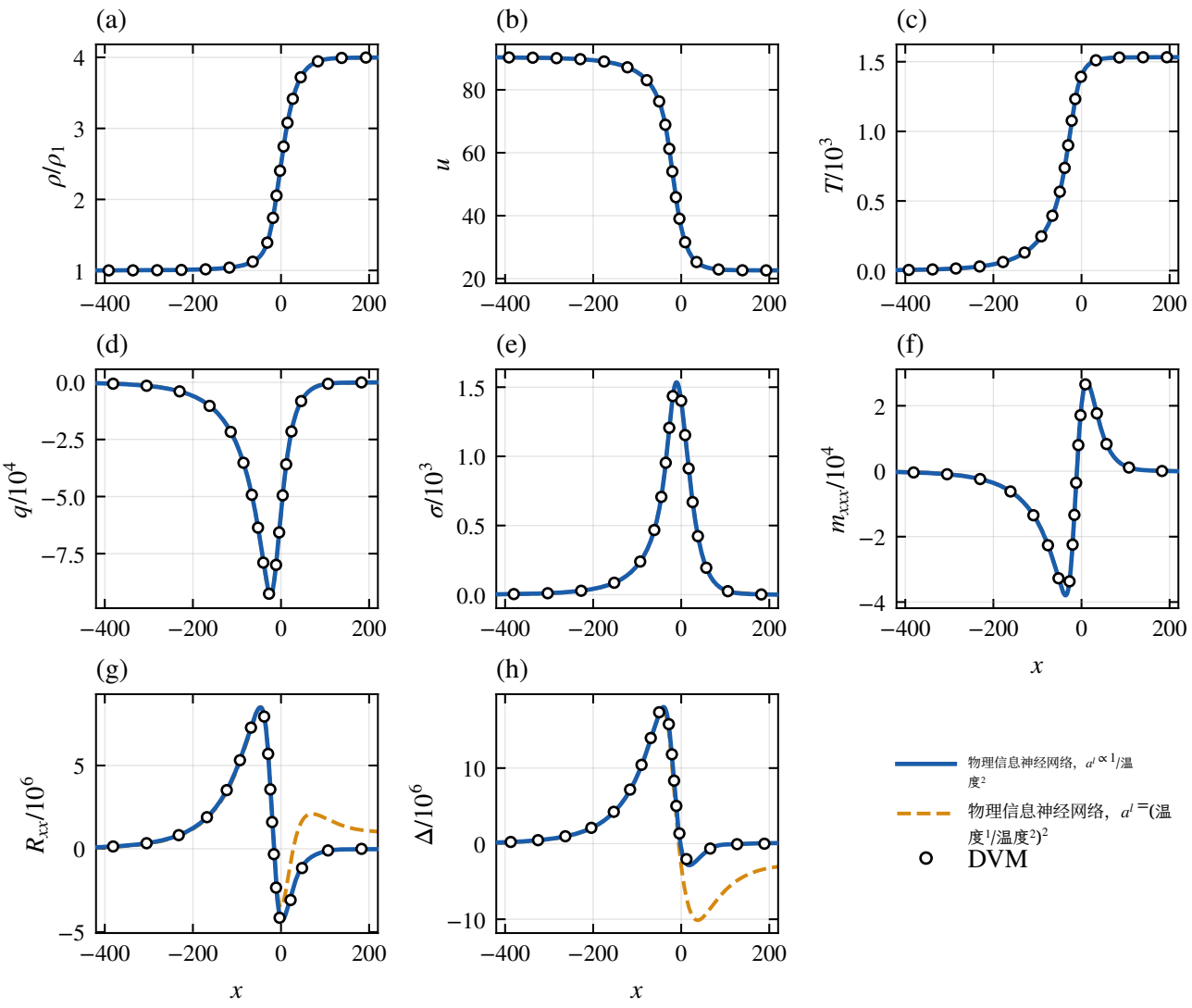

图12：BGK模型，马赫数70：(a) ρ，(b) u，(c) T，(d) q，(e) σ，(f) m_{xxx}，(g) R_{xx}，(h) Δ。实线：采用被动分布权重（32）的物理信息神经网络；虚线：采用 $a_l = (T_1/T_2)^2$ 的物理信息神经网络；符号：离散速度法。两个网络仅在激波后方的 R_{xx} 和 Δ 存在明显差异。坐标 x 的单位为 ℓ_0。

当时，进行了四次预先固定的运行，每次都从表5中的马赫数50网络出发：$a_l = (T_1/T_2)^2 = 7.9 \times 10^{-7}$ 或 $a_l = 7.0 \times 10^{-4}$ 采用（32），每次先进行800次和300次迭代（共1100次，即第一次延拓），再进行1000次迭代（共2100次，即第二次延拓）。在计算马赫数60处的DVM解之前，四种预测均已在集群上进行哈希处理，并且各自只比较了一次。四种方案均通过了测试（a）、（b）和（c）（表7）。在迭代次数相同的情况下，权重使 R_{xx} 和 Δ 的差异分别缩小了2.1倍（1100次迭代）和2.4至2.5倍（2100次迭代）；在权重相同的情况下，额外进行的1000次迭代使差异缩小了1.6至1.7倍（采用第一种权重）和2.0倍（采用权重（32））。两种效果几乎相乘：二者共同使 R_{xx} 和 Δ 4分别改善了.1倍，从23%和35%降至5.6%和8.6%；按对数尺度计算，这一增益约有60%来自权重，40%来自迭代次数。它们对其他场的影响则有所不同：在迭代次数相同的情况下，单独使用权重会使 u、 T、 q 和 m_{xxx} 1恶化1.4至2.0倍，与马赫数20处的情况相同；而增加迭代次数则能在采用任一权重时改善所有场。马赫数60处的综合增益小于第二次延拓过程中的增益（在 Δ中，马赫数50处为7.8倍，马赫数70处为19倍），而第二次延拓过程

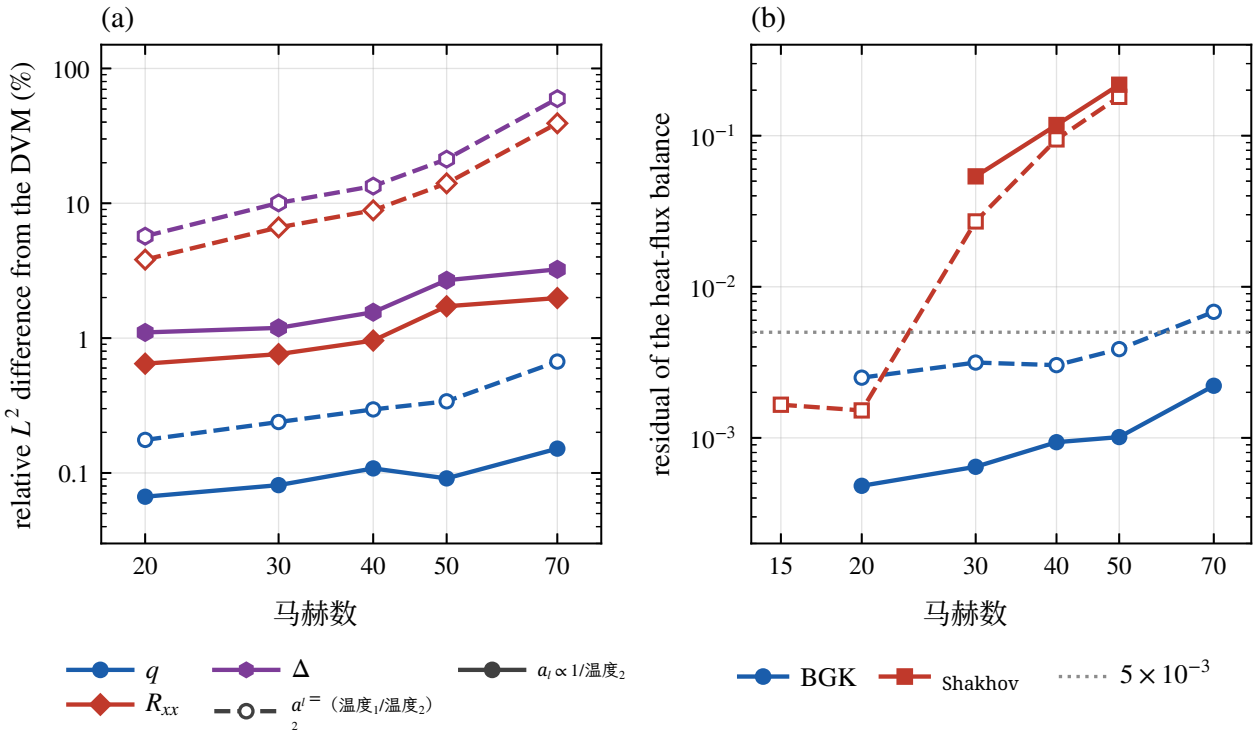

图 13：马赫数 20 以上的单原子弛豫模型，$\tau = 1/\rho$。空心符号和虚线：$a_l = (T_1/T_2)^2$；实心符号和实线：权重（32），在两个面板中均如此。（a）BGK：相对于 DVM 的 L^2 差异 q、R_{xx} 和Δ。（b）在网络剖面上评估的精确热流平衡的最大残差，占其最大项的比例；对应于（a）中的 BGK 模拟和表8 中的 Shakhov 运行（马赫数 15 至 50）；未使用参考值。点线表示第 5×10^{-3} 节5.5的水平。

表7：BGK模型，$\tau = 1/\rho$，马赫数60，盲测：从表5的马赫数50网络进行四次运行，分别采用被动分布的两种权重和两种拟牛顿迭代次数。无参考测试，最大残差b_q 精确热流平衡的（如表6所示），相对于 L^2 DVM 解的差异百分比，以及密度厚度 δ_ρ（DVM：58.241）。四次运行均通过测试（a）、（b）和（c）；测试（c）对任何场的改变均不超过 7.8×10^{-6} 其下游尺度。计算参考值之前，预测结果已进行哈希处理。

a_l	迭代	$10^4 e_F$	r_{rel}	$10^3 b_q$	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ	δ_ρ
$(T_1/T_2)^2$	1100	4.0	1.01	4.3	0.11	0.047	0.078	0.41	0.35	0.63	23	35	58.116
	2100	5.9	1.01	1.8	0.043	0.017	0.027	0.16	0.13	0.20	14	21	58.215
(32)	1100	4.0	1.01	7.2	0.089	0.077	0.15	0.64	0.32	1.1	11	17	57.938
	2100	5.3	1.01	2.2	0.046	0.025	0.047	0.22	0.15	0.39	5.6	8.6	58.207

从马赫数20开始，使用较大的权重携带了 l；而马赫数60的四次运行均从一个网络开始，该网络的 l 是使用第一个权重训练的；这一解释未经单独检验。

在新的马赫数下进行优化所带来的变化。按下游状态进行缩放后，强激波几乎具有相似性，因此，从一个马赫数延拓到下一个马赫数的网络在进行任何优化之前可能已经足够准确。我们针对从马赫数50到马赫数70的步骤进行了检查。马赫数50的网络被严格按照延拓开始时的方式置于马赫数70的形式中（新的端态、半长度和输入尺度，基宽重置，参数不变），并且未进行任何迭代便对其进行了评估。它与离散速度法的差异分别为4.7、2.9、2.8、15、16、20、18和16百分

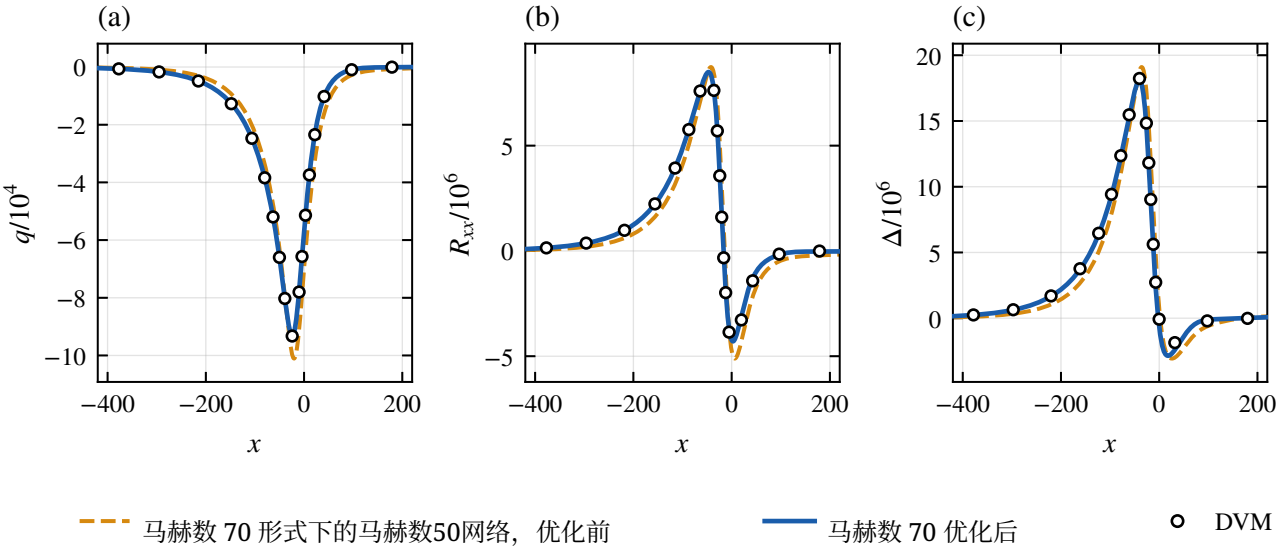

图 14：BGK模型，马赫数70：(a) q，(b) R_{xx}，(c) Δ。虚线：置于马赫数70形式下的马赫数50网络，在马赫数70下进行任何优化之前；实线：马赫数70优化后的网络（权重（32））；符号：离散速度法。坐标 x 的单位为 ℓ_0 各解的密度中点。

表8：Shakhov模型，$\tau = 1/\rho$，从已接受的马赫数 12 运行继续，设置预先固定：无参考测试、精确热流平衡的最大残差 b_q（如表6所示）、与同一模型的 DVM 解之间的相对 L^2 差异（百分比）以及密度厚度。所有八次运行均通过测试 (a)、(b) 和 (c)。马赫数 30 至 50 下的运行并非解：之所以列出，是因为它们通过了测试，但未达到参考值。采用第一种权重的马赫数50预测，在读取其参考值之前已进行哈希处理。

													δ_ρ	
a_l	M	$10^4 e_F$	r_{rel}	$10^3 b_q$	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ	物理信息神经网络	离散速度法
$(T_1/T_2)^2$	15	0.40 0.99		1.7	0.039	0.012	0.014	0.079	0.20	0.34	2.5	3.5	19.06	19.05
	20	0.96 1.02		1.5	0.027	0.015	0.029	0.11	0.15	0.29	3.8	5.4	25.21	25.21
	30	2.8 1.03		27	0.26	0.53	1.2	3.9	1.9	8.6	25	36	37.04	37.60
	40	5.5 1.00		94	0.79	1.8	3.7	12	7.0	25	38	45	46.99	50.04
	50	7.0 1.00		181	1.2	2.5	5.0	16	9.8	33	42	53	56.01	62.49
(32)	30	4.0 0.99		54	0.41	0.99	2.1	7.1	3.8	15	18	14	36.73	37.60
	40	5.5 0.99		118	0.98	2.3	4.6	15	9.0	31	33	25	46.10	50.04
	50	7.4 0.97		217	1.3	2.9	5.7	18	11	36	38	30	55.45	62.49

比，分别为 ρ、u、T、q、σ、m_{xxx}、R_{xx} 和 Δ；其密度厚度为66.20，而离散速度法为67.93；经过该步骤的2100次迭代后，它们分别为0.029、0.017、0.030、0.15、0.085、0.24、2.0和3.2百分比（图 14）。因此，转移后的网络只是一个起点，而不是一个解：所报告场的准确度是通过在新的马赫数下最小化残差获得的。

5.5. *Sh* 阿霍夫激波：马赫数*20*，设置预先固定，以及其上的极限

表 2 中被接受的 Shakhov 运行止于马赫数 12，而第 5.2 节中的马赫数 20 解来自一次未通过测试 (a) 的运行。因此，我们从被接受的马赫数 12 运行重新进行 Shakhov 延拓，并在提交任何作业之前固定设置。设置取自上述马赫数 20 以上的 BGK 延拓，以及第 5.2 节的诊断结果：$L = 20M$，输入的尺度乘以 $M/20$，每一步都将基宽重置为 $0.912M$，束流处为 $\Delta v = 0.25$

（110 至 149 个节点），分四个阶段，每步进行 3100 次拟牛顿迭代。此前已检查过马赫数 15 至 40 时的参考值，因此这些比较并非盲测。

从首次尝试起，马赫数 15 和马赫数20 的步均通过测试 (a)、(b) 和 (c)（表 8；使用一个核心分别耗时 3.2 和 3.4 小时）。在马赫数 15 时，通量误差为 4.0×10^{-5}，而此前一次运行的误差为1.9×10^{-3}，且每个场都比此前的运行更接近离散速度法。在马赫数20 时，宏观场的误差在 0.03 百分比以内，q 和 σ 在 0.15 百分比以内，m_{xxx} 在 0.3 百分比以内，而 R_{xx} 和 Δ分别在 3.8 和 5.4 百分比以内；厚度为 25.213，而对照值为 25.207。直到三阶，该次运行的结果与表 3 中的尝试C 相差不超过 1.4 倍；对于 R_{xx} 和 Δ，其与离散速度法的差距约为 1.6 倍，但仍在上文所述这些场的不确定性范围内。因此，Shakhov激波已在预先固定设置的情况下求解至马赫数20。

马赫数20以上程序会失效，而验收测试无法显示这一点。马赫 30、40和50的步骤均通过了三项测试，但热流相对于离散速度法的偏差分别为3.9%、12%和16%，激波厚度则分别薄了1.5%、6%和10%（在马赫数50时为56.0，而参考值为62.5）。马赫数50这一步是一次盲测：在读取参考值之前，其预测结果已被保存并进行哈希处理。在权重（32）不变且迭代次数不变的情况下重复这三步并没有改善结果：热流的偏差分别为7.1%、15%和18%，马赫数50时的厚度为55.5。因而，马赫数20以上Shakhov模型的误差并不在被动分布中，其原因也尚未找到。本文未解决马赫数20以上的Shakhov激波问题。

按照第 5.2 节的方法，在网络的剖面上评估精确热流平衡的残差，可在没有参考值的情况下区分这些运行（图 13b）。在马赫数 15 和 20 时，残差分别为平衡中最大项的 1.7×10^{-3} 和 1.5×10^{-3}；对于采用权重 (32) 的 BGK 模拟，从马赫数 30 到 70，残差介于 5×10^{-4} 和 2.2×10^{-3} 之间（马赫数 100 时为 4.1×10^{-3}）；而马赫数 30、40 和 50 时的 Shakhov 运行，残差分别为 0.027、0.094 和 0.18，采用权重 (32) 时则分别为 0.054、0.12 和 0.22。在采用第一种权重的马赫数 30 和 40 的 Shakhov 运行完成比较后、采用权重 (32) 的运行以及马赫数 50 的盲测比较进行之前，曾提出一个 5×10^{-3} 的水平；上述所有残差均至少高出该水平十倍。这个诊断指标并非四阶矩的检验：采用 $a_l=(T_1/T_2)^2$ 的马赫数 50 BGK 模拟，其残差为 3.9×10^{-3}，而 Δ 偏差达 21%。这个水平也并非界限分明：采用该权重的马赫数 70 BGK 模拟的残差为 6.8×10^{-3}，高于该水平，但 q 与离散速度法的结果相差不到 0.7%（而采用权重 (32)、迭代 1100 次的马赫数 60 模拟，7.2×10^{-3}，其中 q 与离散速度法的结果相差不到 0.64%）；相比之下，马赫数 30 至 50 的 Shakhov 运行的残差则超出该水平 5 至 43 倍。建议将该残差作为第四种无参考值检验；对于这些运行，它指出了错误的热流和厚度，而测试 (a) 至 (c) 未能发现这些问题。

5.6. 单原子结果总结

采用第 3.4 节的损失函数，在训练中不使用参考值，并结合 $\tau=1/\rho$，网络本身能够求解马赫数 100 的 BGK激波和马赫数20的 Shakhov激波；在表2和表5中通过测试的运行结果，以及表8中截至马赫数20的运行结果中，三阶以内的场与离散速度法结果相差均不超过 0.5%，而使用权重 (32) 时可达到马赫数100。四阶矩 R_{xx} 和 Δ 是要求最高的场：使用权重 $a_l=(T_1/T_2)^2$, 时，通过测试的运行结果与参考值的差异在 Δ 中最大可达 81%（表3、表4和表6）。对于 BGK模型，其原因在于被动分布 l，其残差所携带的权重为 $a_l=(T_1/T_2)^2$；使用权重 (32)，并将每步迭代次数从 1100 增加到 2100 后，R_{xx} 和 Δ 在马赫数70以内的误差不超过 3.2%，在马赫数100时不超过 7.1%；在马赫数60时，约 60% 的增益来自该权重。对于 Shakhov模型，马赫数20以上至马赫数50的运行结果，无论使用哪种权重，都能通过测试但与参考值不一致；热流平衡无需参考值即可表明这一点。

表9：氮气激波：最大通量误差 e_F (测试 (a)，上限 10^{-3}) 以及相对 L^2 差异（31）——网络与同一模型的离散速度法解之间的差异，以百分比表示；马赫数2时，随机种子以括号标出。窗口$|x| < 20$ （马赫数2）、33。3 （马赫数5）和 40 （马赫数 7 至 15 ）。参考值：每个马赫数下的四阶 DVM 解（ $\Delta x = 0.05$ 马赫数 2 、 5 和 7 时， $\Delta x = 0.025$ 马赫数8至15时）。通过：每次运行均通过测试 (a)；本表中的任何运行均未评估测试 (b)（第 3.7 节）。 †：在该马赫数的任何离散速度法解出现之前，预测已被固定。 ‡：程序预先固定，比较前预测已进行哈希处理。马赫数12和15处的四阶项带有第 5.2 节所讨论的不确定性；随机种子间的离散程度仅在马赫数2和5处测量。峰值和厚度：补充表 S5。

M	$10^4 e_F$	ρ	u	T_{tr}	T_{rot}	q_{tr}	q_{rot}	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ 通过
2 (101)	0.13	0.0067	0.0048	0.012	0.0085	0.059	0.088	0.036	0.11	0.12	0.13 a
2 (202)	0.22	0.0071	0.0049	0.0057	0.0094	0.074	0.14	0.043	0.12	0.16	0.15 a
5	0.72	0.0043	0.0068	0.015	0.025	0.054	0.054	0.060	0.087	0.10	0.14 a
7	0.84	0.0066	0.015	0.028	0.033	0.10	0.13	0.15	0.35	0.29	0.36 a
8	1.4	0.010	0.026	0.049	0.059	0.19	0.28	0.23	0.75	0.66	0.58 a
10†	2.0	0.016	0.049	0.077	0.020	0.29	0.17	0.44	0.61	0.87	1.3 a
12	4.8	0.011	0.036	0.052	0.012	0.18	0.11	0.31	0.37	0.93	1.4 a
15‡	6.9	0.014	0.033	0.048	0.020	0.15	0.15	0.26	0.43	1.8	2.7 a

成本为使用一个处理器核心的成本：从马赫数5延拓BGK至马赫数20需要8.6小时，从20至50需要5.2小时；使用第一个权重从20至70约需14小时，使用权重（32）延拓至马赫数100还需9.0小时（第9.1节）。

6. 氮气激波至马赫数 15

6.1. 运行和参考值

对于氮气的 Rykov型模型， [56, 58]损失函数为（29），包含四个约化分布 g、 k、 h、 l 以及残差的七个矩（第3.8节），通过第3.6节的各阶段进行最小化。每个马赫数下的参考值，均为使用相同常数的同一模型的四阶 DVM 解（第4.1节）。训练过程在此问题上开发：在马赫数2、5、7、8和12下，训练期间会输出与 DVM 解之间的距离，并在参考可用的情况下选择第3.4节的三个权重（表1）。因此，这些马赫数下的结果来自针对它们调优的程序；马赫数10和15由于无法进行监测，用于测试该程序（第6.3节）。马赫数2采用宽度为32的网络（3789个参数）、默认权重、均匀速度规则和两个随机种子，从头开始训练。更强激波使用宽度为48（7981个参数）并进行延拓$5 \to 7 \to 8 \to 10 \to 12 \to 15$，每步耗时0.6至2.7小时，使用一个处理器核心（大多数步骤使用笔记本电脑处理器的一个线程；补充材料第S8.10节）。最终版本的程序仅运行了马赫数8、12和15对应的步骤（附录 B；补充材料第S9.3节）。

6.2. 与离散速度解的差异

表 9 和图 15 给出了结果，补充图 S2 绘出了误差随马赫数的变化。与单原子气体一样，误差随矩的阶数增加而增大。从马赫数 2 至 15，密度、速度和两个温度与离散速度法的差异在 0.08 百分比以内，两个热流和应力的差异在 0.45 百分比以内， m_{xxx} 的差异在 0.8 百分比以内； R_{xx} 和 Δ 在马赫数 12 及以下时的差异在 1.4 百分比以内，而在马赫数 15 时分别为 1.8 和 2.7 百分比。每个马赫数下， T_{tr} 的最大值与参考值相差不超过 0.02 百分比；从马赫数 2 至 12，网络的密度厚度比离散速度法低 0.05 至 0.18 百分比，而

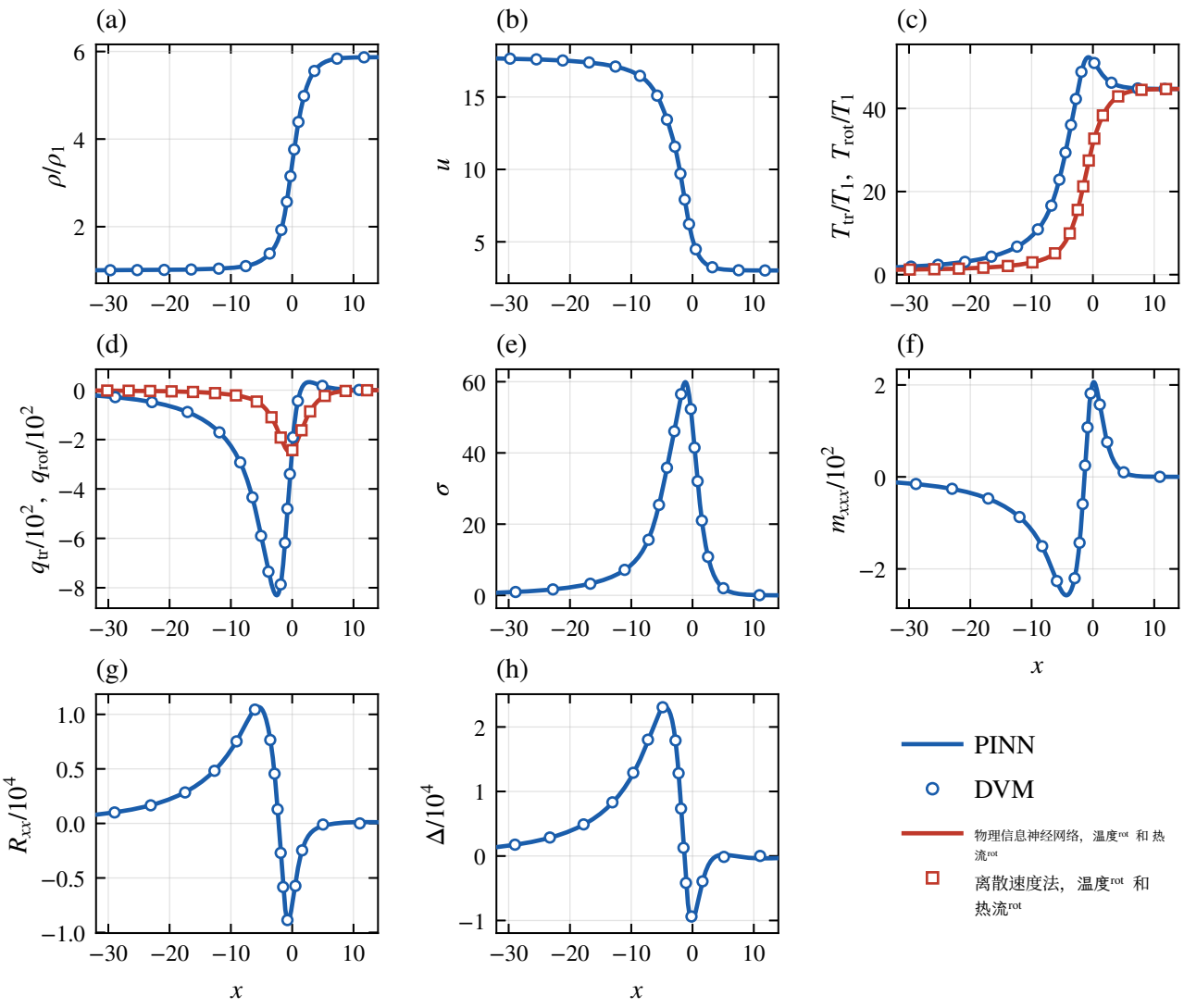

图15：氮气（Rykov型模型），马赫数 15：（a） ρ，（b） u，（c）平动温度（蓝色）和转动温度（红色），（d）平动热流和转动热流，（e） σ，（f） m_{xxx}，（g） R_{xx}，（h） Δ。曲线：物理信息神经网络；符号：独立离散速度法。

在马赫数 15 时低 0.03 百分比（补充表 S5）。这些是网络的误差：参考值的误差至少比表中任何一项小 80 倍（第 4.1 节），而网络的 e_F 在马赫数 2 时为 10^{-5}，到马赫数 15 时为 7×10^{-4}；在马赫数 12 及以下，转动能平衡的误差为最大 q_{rot} 的 0.2 至 0.6 百分比（更多说明见补充材料第 S9.3 节）。每次运行均通过测试 (a)；采用更精细的速度规则时，在马赫数 12 及以下，各场的变化小于其下游尺度的 3×10^{-5}，在马赫数 15 时则为 7×10^{-5}；这些运行未进行测试 (b)（第 3.7 节）。

作为量级参照，该模型与氮气粒子模拟结果的差异，大于网络与模型之间的差异：在马赫数5、8和12时，DVM 解的密度厚度比 DSMC计算（采用变硬球模型和Larsen–Borgnakke转动能交换，补充材料第 S6 节）低 8.7% 至 9.0%。与测量结果相比，该模型能够再现氮气激波的密度剖面；但由于采用恒定碰撞数，冷激波的转动升温位置比实际情况靠近密度上升位置约三分之一（第 8 节）。

6.3. 马赫数*10*和*15*的测试

这两项测试用于检验该程序在马赫 2 至 12 范围内调校后，能否适用于无法进行监测的情况。只有第一项属于盲测，即预测经哈希处理时尚无参考值；完整方案见补充材料第 S9.4 节。

马赫数*10*。 马赫数10的解是通过逐步推进至马赫数 12 得到的。在马赫数10的确定性模型解出现之前，该解在没有参考值的情况下进行了评估、哈希处理并赋予预期准确度，其差异处于马赫数8和马赫数 12 的范围内。随后，根据模型方程编写了第二个 DVM 求解器，在编写过程中无法访问预测结果（补充章节 S9.4），并在马赫数8和马赫数 12 下与第一个求解器进行验证，之后在预先固定设置的情况下运行一次。与现用作参考值的四阶解（表 9）相比， T_{rot}、 q_{rot}、 m_{xxx}、 R_{xx} 和 Δ 均落在预期范围内，而 ρ、 u、 T_{tr}、 q_{tr} 和 σ 高于其上限的1.4至1.5倍；极值的最大差异为3.0百分比，出现在 Δ的极小值处。这一超差可能源于此次运行的历史：它从一个在引入第二个权重之前已经失稳的马赫数8解开始；这一点尚未经过测试。因此，对于一半的场，预期得以满足，其准确度与马赫数8和马赫数 12 时处于同一量级；马赫数10位于监测范围内，而该测试并未表明这一程序可以在没有 DVM 的情况下开发出来。

马赫数 *15*。马赫数 15 超出了该范围。在开始预测之前、且尚无马赫数 15 的参考值时，一项方案预先固定了命令（从马赫数 12 延拓一步，设置为：800 和 300 次迭代， $a_l = (T_1/T_2)^2 = 5.0 \times 10^{-4}$, $L = 120$）、验收标准和预期：每个场的偏差均在马赫数 8、10 和 12 时最大偏差的约两倍以内。参考计算已完成，且其峰值也已观察到，而预测任务在二十分钟后才结束；因此，这是一次在比较之前预先固定程序并进行哈希的预测，而非盲测。所有三阶及以下的场都不超过预期范围的上限； R_{xx} 和 Δ分别为 1.8 和 2.7 百分比，约为马赫数 12 时数值的两倍，处于预期范围的边缘； T_{tr} 的最大值相差 0.016 百分比，厚度相差 0.03 百分比， Δ 的极小值相差 6.2 百分比，而 $e_F = 6.9 \times 10^{-4}$ 是延拓中最大的。由此，该程序将计算延伸到所调优所依据的马赫数之外一步，四阶矩与参考值的偏差则扩大了一倍。氮气延续计算的任何一次运行均未评估测试 (b)。未进行马赫数 15 以上的氮气计算。

6.4. 损失项与权重

本小节及接下来两个小节的实验针对马赫数2至8范围内的氮气进行。开发过程中报告的差异（在训练期间打印）是相对于第一个 DVM 求解器而言的；消融实验的差异则是相对于四阶求解器而言的。

图 16的消融在运行前就已确定：采用第 3.4节的默认权重（宽度 32）从头开始训练马赫数 5 激波，并进行七次每次只改变一个因素的运行，每次均与离散速度法（补充表 S4）比较一次。在使用完整损失的三个随机种子中，有两个在十个场上与离散速度法的差异处于 0.014% 至 0.47% 之间；第三个运行失稳，其损失函数的 90% 集中在尾项中，与离散速度法相差 0.11% 至 2.3%，并未通过通量检验（$e_F = 1.8 \times 10^{-3}$）。去除通量项后，网络收敛到一个不同且更薄的激波（厚度为 2.37，而不是 3.33，峰值低 T_{tr} 7 %），与离散速度法相差 3% 至 35%；去除通量项、矩项和尾项后，差异为 1% 至 13%。两种失败都表明，在没有参考值的情况下，通量的变化分别为 16% 和 5%。单独去除矩项或尾项，其影响不超过两个随机种子之间的差异。消融结果表明

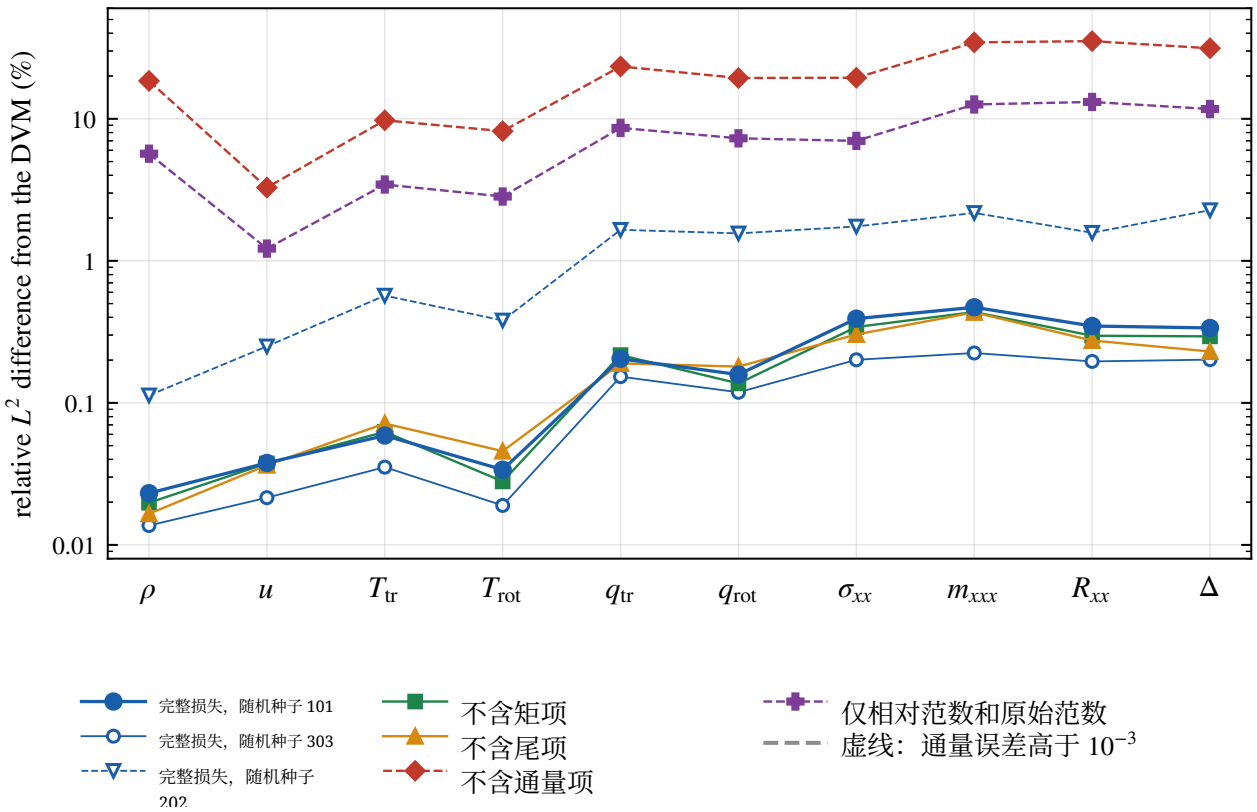

图 16：氮气，马赫数5，从头开始训练：完整损失（三个随机种子）下，以及移除一项（通量、矩或尾项）后，和移除通量、矩与尾项全部项后（保留相对范数、原始范数和固定点），逐场与四阶DVM的差异。虚线表示最大通量误差超过10^{-3}，因此未通过无参考通量测试的运行。细线仅连接同一次运行的符号。数值见补充表S4。

在使用默认权重时，马赫数 5 需要通量项。这并不能说明需要矩项和尾项，也不能解释为什么单独去除通量项比同时去除三个项造成的损害更大。它还暴露了测试 (b) 的一个弱点：两个表现良好的运行因其字面规定而未通过该测试（$r_{\mathrm{rel}} = 265$ 和 220），因为流入边界旁的一个测试点占据了该项的 99.7%（去除该点后为 0.78 和 0.74）；判据未作更改。

关于尾项和矩项的证据涉及其权重，来自马赫数7（图17）。从马赫数5以默认权重进行延拓后，拟牛顿阶段在经过1200次 q_{tr} 3次迭代后，仍与离散速度法相差0.6百分比，并且尾项主要由远上游的少数高温分子主导。通过按位置、速度和分布函数分解损失函数（无需参考值）发现的三项改动消除了失稳：$\lambda_T = 0.1$（1.1百分比，并且在相同的1200次 $e_F = 1.0 \times 10^{-3}$ 次迭代后）；$a_l = (T_1/T_2)^2 = 0.01$，因为l 随后分别占据了 $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$ 和 $\mathcal{L}_{\mathrm{tail}}$的82%和83%，其远上游残差对高温分子的敏感度是 $(T_2/T_1)^2$ 的倍，而 g（0.19百分比，并且在 1.6×10^{-4} 进一步迭代400次后）；以及一个最终阶段，采用 $\lambda_P = 100$和 $\lambda_F = 3000$（0.12百分比，并且 8.4×10^{-5}），消除了沿激波累积的转动能守恒关系中的单一符号误差（在马赫数8时为 q_{rot} 的0.6%）。通量误差与离散速度法之间的差异以相同的步骤下降，因此无需参考值也能看到进展。然而，权重是在打印该差异时选定的，这正是马赫数10和15用于检验该程序的原因；由于一个

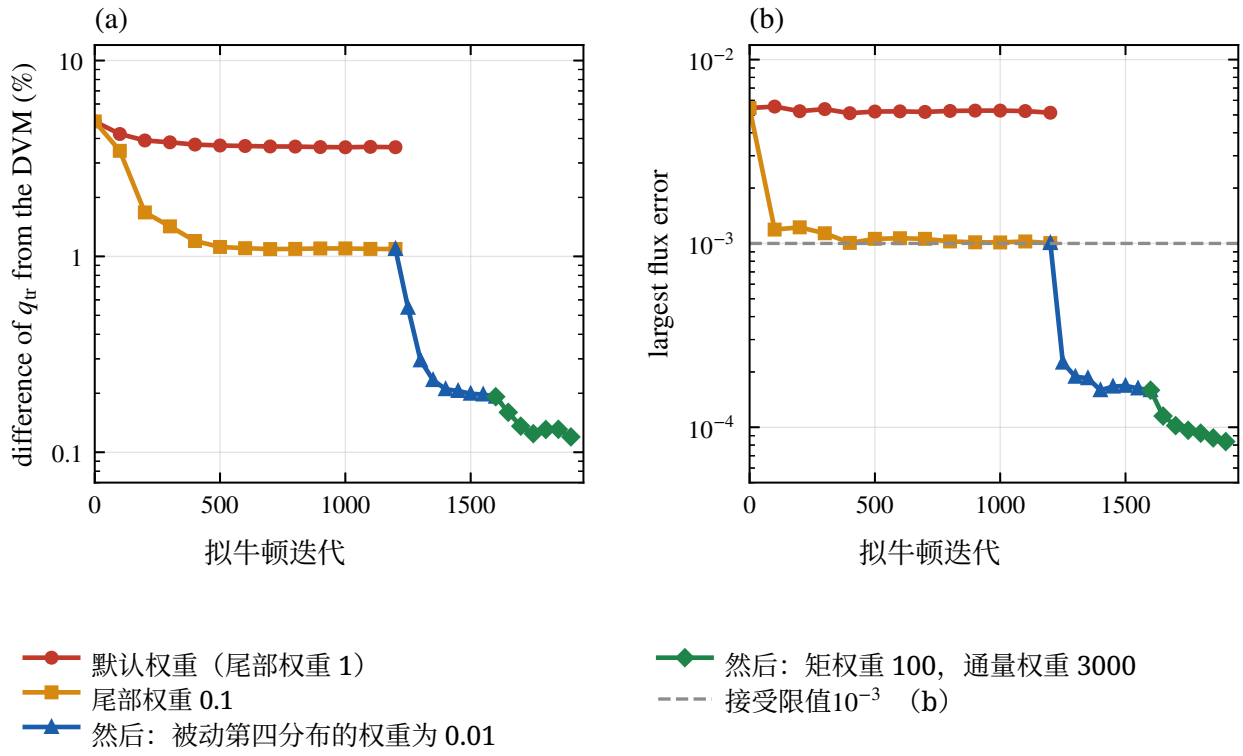

图17：氮气、马赫数7，从马赫数5延拓：采用默认权重以及连续三次更改权重后的拟牛顿阶段。（a）相对于第一个DVM求解器的平动热流差异（训练期间打印，但从未用于训练）。（b）质量、动量和能量通量的最大相对误差；虚线：接受限值 10^{-3}。

表 10：氮气，采用马赫数2设置（宽度32、默认权重、均匀速度规则）从头训练，不使用和使用激波层集合配点：最大通量误差、密度厚度，以及最小和最大的相对 L^2 相对于四阶DVM在表9 以外的九个场的 m_{xxx}差异。

			δ_ρ		
配点	M	$10^4 e_F$	PINN	DVM	差异（百分比）
马赫数2程序	5	1.2	3.328	3.328	0.02 至 0.36
	7	280	0.231	3.555	6 至 100
	8	1800	0.066	3.702	9 至 100
使用激波层集合	2	0.12	5.208	5.212	0.007 至 0.16
	5	2.2	3.320	3.328	0.02 至 0.39
	7	2.4	3.538	3.555	0.03 至 0.61
	8	2500	0.159	3.702	7 至 100

在马赫数7以默认权重从头开始运行，可达到0.03%至0.6%（第6.5节），因此失稳是由这种延拓造成的，而不是由马赫数造成的。

6.5. 激波层中的配置点

马赫数2设置在马赫数5、7和8下重复使用，仅改变马赫数；每次运行均预先指定，并进行一次比较（表 10）。马赫数5下计算成功。马赫数7下，激波塌缩为厚度为0.23的密度跃变（离散速度法：3.56），位于两个固定配点之间，间距为

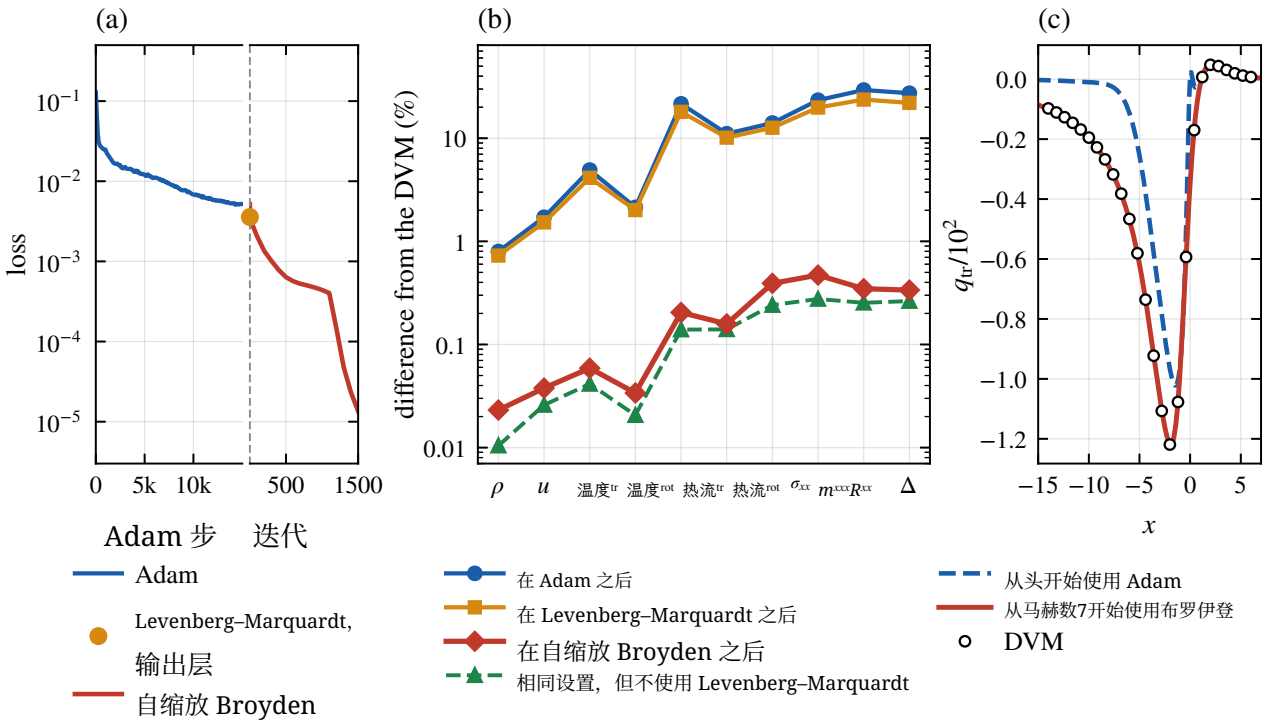

图18：优化器序列。(a) 氮气，马赫数5，从头开始：损失函数随 Adam 步数的变化（左侧，步数）以及随自缩放 Broyden 方法迭代次数的变化（右侧，迭代次数；两部分的刻度不同）；单个标记表示输出层经 Levenberg–Marquardt 求解后的损失函数。(b) 同一次运行：每个阶段结束后与四阶DVM的差异，以及未经过 Levenberg–Marquardt 阶段的运行结果；细线仅连接同一状态的符号。(c) 氮气，马赫数8：从头开始经 Adam 训练后，以及从马赫数7解出发进行600次拟牛顿迭代后得到的平动热流；符号表示DVM。

0.31（图 8b），与离散速度法相差6%至100%。损失函数未能揭示这种塌缩，最终为 2.0×10^{-6}，低于下文所述正确解的 3.5×10^{-5}；但测试揭示了这一点（$e_F = 2.8 \times 10^{-2}$，且 $\mathcal{L}_{\text{rel}}$ 在测试点处为训练值的500倍）。加入激波层集合中的配点后，在此计算域长度下，这会增加权重和随机点 $|x| < 10$，但不增加固定位置（补充材料第 S9.5节），马赫数2和5的结果保持不变，而马赫数7的结果变为正确（$e_F = 2.4 \times 10^{-4}$，$r_{\text{rel}} = 1.7$，厚度为3.538，差异为0.03%至0.6%）。马赫数8从头开始运行时，无论是否加入该集合都会发生塌缩（厚度分别为0.07和0.16，而正确值为3.70，$e_F = 0.18$ 和0.25）；通过延拓达到马赫数8（第 6.6节）。

结合消融结果来看，三个随机种子中有一个在马赫数5时失稳，这表明使用马赫数2设置从头训练的局限性：该方法可达到马赫数7，但对随机种子不够稳健；在马赫数5和7时，其结果在大多数场中与DVM的差距是表9 中延拓结果的两到六倍。马赫数7以上的结果依赖于延拓和三个权重。无参考测试检测出了本研究中记录的每一次崩溃；这些测试是必要条件，但并非充分条件（第3.7节）。

6.6. 优化器

图 18(a,b)沿用了消融实验的基线，并分为三个阶段。Adam 在 15 000 步内（单核运行 40 分钟）将损失函数降至 5.2×10^{-3}，但与 DVM 相比，仍有 q_{tr} 22 百分比的偏差，四阶矩的偏差为 27% 至 29%（$e_F = 1.1 \times 10^{-2}$）。对输出层进行 Levenberg– Marquardt 求解后，损失函数在 4 分钟内降至 3.6×10^{-3}，但未能改善

表 11：以马赫数为输入的单个网络，仅根据方程进行训练，适用于马赫数2至8的氮气；每个阶段均排除区间 $5.5 \le M \le 6.5$ ： 与四阶DVM 解的相对 L^2 差异（百分比）。在 49 个马赫数下通过测试 (a) 和 (b)。

M	ρ	u	T_{tr}	T_{rot}	q_{tr}	q_{rot}	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
2	0.13	0.085	0.15	0.22	0.65	1.5	0.56	3.5	2.5	5.2
3	0.023	0.021	0.067	0.091	0.29	0.61	0.21	0.51	0.51	0.51
4	0.029	0.038	0.057	0.042	0.25	0.24	0.32	0.67	0.63	0.63
5	0.026	0.040	0.058	0.034	0.21	0.28	0.37	0.60	0.73	0.63
6（留出）	0.030	0.046	0.066	0.032	0.22	0.28	0.43	0.57	0.69	0.73
7	0.031	0.050	0.086	0.037	0.35	0.28	0.51	0.64	0.72	0.96
8	0.032	0.068	0.13	0.041	0.62	0.30	0.64	1.0	1.0	1.8

各场（ q_{tr}中为 18%）。随后，自缩放 Broyden 方法经过 1500 次迭代（42 分钟），将损失函数降低了 260 倍，降至1.4×10^{-5}，并使每个场的偏差都在 0.5% 以内；若不经过 Levenberg–Marquardt 阶段，本次运行最终得到 5.9×10^{-6}，偏差为 0.010% 至 0.28%，处于两个随机种子之间的差异范围内。因此，准确度来自拟牛顿阶段，尽管本代码并未将该方法与 L-BFGS 进行比较，其部分增益可能来自固定的配点和冻结包络（另外两种替代方案：补充材料第 S2节）。

对于强激波，初始点起决定作用（图 18c）。在马赫数8时，从头开始使用 Adam，经过 25 000 步后与 DVM 解的误差仍为 ρ 2.8 百分比和 q_{tr} 42 百分比（$e_F = 3.7 \times 10^{-2}$）；而从头开始采用三阶段流程则会崩溃。单独使用拟牛顿法，从马赫数7解出发，经过 q_{tr} 次迭代后误差达到 7.1 百分比，经过 600 次迭代后降至 0.44 百分比。之所以能够迁移，是因为输入（16）和基准（19）遵循 Rankine–Hugoniot 状态（在马赫数7下评估马赫数5参数，训练前 ρ 的误差在 0.7 百分比以内，热流误差在 11 百分比以内），而 Adam 并未利用这一点：从马赫数8解出发，在马赫数12下进行 12 000 次 Adam 迭代后，误差仍为 24 百分比（ q_{tr}）；而从马赫数10解出发进行 800 次拟牛顿迭代，误差则达到 0.24 百分比。从马赫数7或8开始，第 5 节和6 节的所有解均通过延拓获得（通往同一马赫数的两条路径：补充材料第 S2 节）。

6.7. 远上游温升

损失函数以局部分布为参照衡量残差，并以下游单位衡量残差矩；当激波前方远处冷气体的温升低于约 $10^{-2}\,T_2$ 时，它便无法捕捉这种加热。对于马赫数 8 的解，温升 $T_{\mathrm{tr}} - T_1$ 在距激波上游 30 个长度以内与 DVM 的偏差不超过 3%，在 40 个长度处则低了 18%；距激波上游 30 个长度处，转动温度的升幅低了 42%，其值为 $0.018\,T_1$ (更多数值见补充材料第 S9.6节）；距激波上游 50 个长度处，网络的 $T_{\mathrm{rot}} - T_1$ 甚至符号都错了。无论是按下游状态归一化的剖面，还是表9中的数据，都没有显示出这一误差；因此，对于需要以相对量描述远前驱区的应用，当前损失函数并不适用。该模型在此处的物理合理性最差：在马赫数 7 和 10、 $T_1 = 300$K 时，密度中点上游的平动温度升幅是直接模拟蒙特卡罗和分子动力学结果的 1.6 至 3.5 倍；这是其与速度无关的弛豫时间 [58](补充材料第 S12.6节）所致。

6.8. 一个适用于一系列马赫数的网络

迄今所有结果均采用每个马赫数对应一个网络。预先指定的一次运行测试了单个网络能否表示马赫数 2 至 8 的范围：将马赫数作为第七个输入，单马赫数运行中的所有常数均随之变化；网络包含 8031 个参数，损失函数为各马赫数下（29）的平均值（补充材料第 S9.7节）。区间$5.5 \le M \le 6.5$ 在所有阶段均被排除。测试 (a) 和 (b) 在 49 个马赫数下均通过，包括该区间（$e_F \le 2.0 \times 10^{-4}$，$r_{\mathrm{rel}} \le 1.09$）。在留出的马赫数 6 处，宏观场与 DVM 的偏差不超过 0.07%，热流和应力的偏差不超过 0.43%，高阶矩的偏差不超过 0.73%；且没有任何一项超出马赫数 5 和 7 时相邻两项中较大的值（表 11）：未发现排除区间内准确度下降。覆盖整个范围会牺牲准确度：在马赫数 5、7 和 8 处，误差是同等规模单马赫数网络的 0.7 至 7 倍。马赫数 2 处表现最弱，误差是单马赫数网络的 10 至 40 倍，m_{xxx} 最高达 3.5%，而 Δ最高达 5.2%；两个测试（$e_F = 1.7 \times 10^{-4}$ 和 $r_{\mathrm{rel}} = 0.90$，针对马赫数 2）均未将其标出；原因尚未调查。这是一次采用一个随机种子的单次运行，且只有马赫数 6 对排除区间进行了测试。

7. 硬球玻尔兹曼方程

弛豫模型需要分布函数的少数几个矩；碰撞积分（3）则需要三维速度空间中的分布函数本身。 的形式、损失函数的六个项以及优化器均与第 3 节相同，但采用了第 3.8节所述的改动；附录 C 概述了碰撞积分的评估方法，补充材料第 S6 节给出了评估结果、测试以及蒙特卡罗参考值。损失函数包含玻尔兹曼方程、解析终态和守恒条件。下文中的每个玻尔兹曼方程解，都是通过拟牛顿法最小化该损失函数得到的，初始值取自同一组三维速度变量下 Shakhov 模型的网络解；集群上没有参考值，并且每次运行只在通过验收测试后进行一次比较；唯一的例外是在马赫数10下进行的一次临时比较，详见第 7.5节。报告了马赫数2、3、5、8和10下的解。

7.1. 碰撞积分的评估

图 19 展示了两种碰撞项各自的一个优化步骤。每种情形中都只有一个未知量，即网络：快速谱方法并非一个独立的玻尔兹曼方程求解器，而是用于在残差中评估网络所给分布函数的碰撞积分的规则。在每一步中，网络先给出配点处和速度节点处的指数 N_θ（步骤 1），再由此得到分布函数（18），以及其在 x中的精确导数（步骤 2）。对于弛豫模型，碰撞项只需要在一维速度节点集上计算 f的几个矩（步骤 3a）。对于玻尔兹曼方程，速度节点立方体上的f值被传递给快速谱方法，该方法返回相同节点处的 $Q(f,\ f)$（步骤 3b）。随后以相同方式构造残差和损失函数（步骤 4），通过对所有步骤进行反向模式自动微分，得到损失函数相对于参数的梯度（步骤 5），最后由优化器更新参数（步骤 6）。

残差 $\mathcal{R} = v\,\partial_x f - Q(f,\ f)$在一个包含 N_v^3个速度节点的立方体上进行配点，并由快速谱方法 Q进行评估 [37]：对于每个 $M_\theta \times M_\varphi$ 方向，通过对 f 进行两次傅里叶逆变换获得线积分和平面积分，并在节点处将二者相乘。网络包含7637个参数，拟牛顿阶段使用160个预先固定的配点（补充材料第S9.8节），第3.7 节的三项测试也预先固定，用于

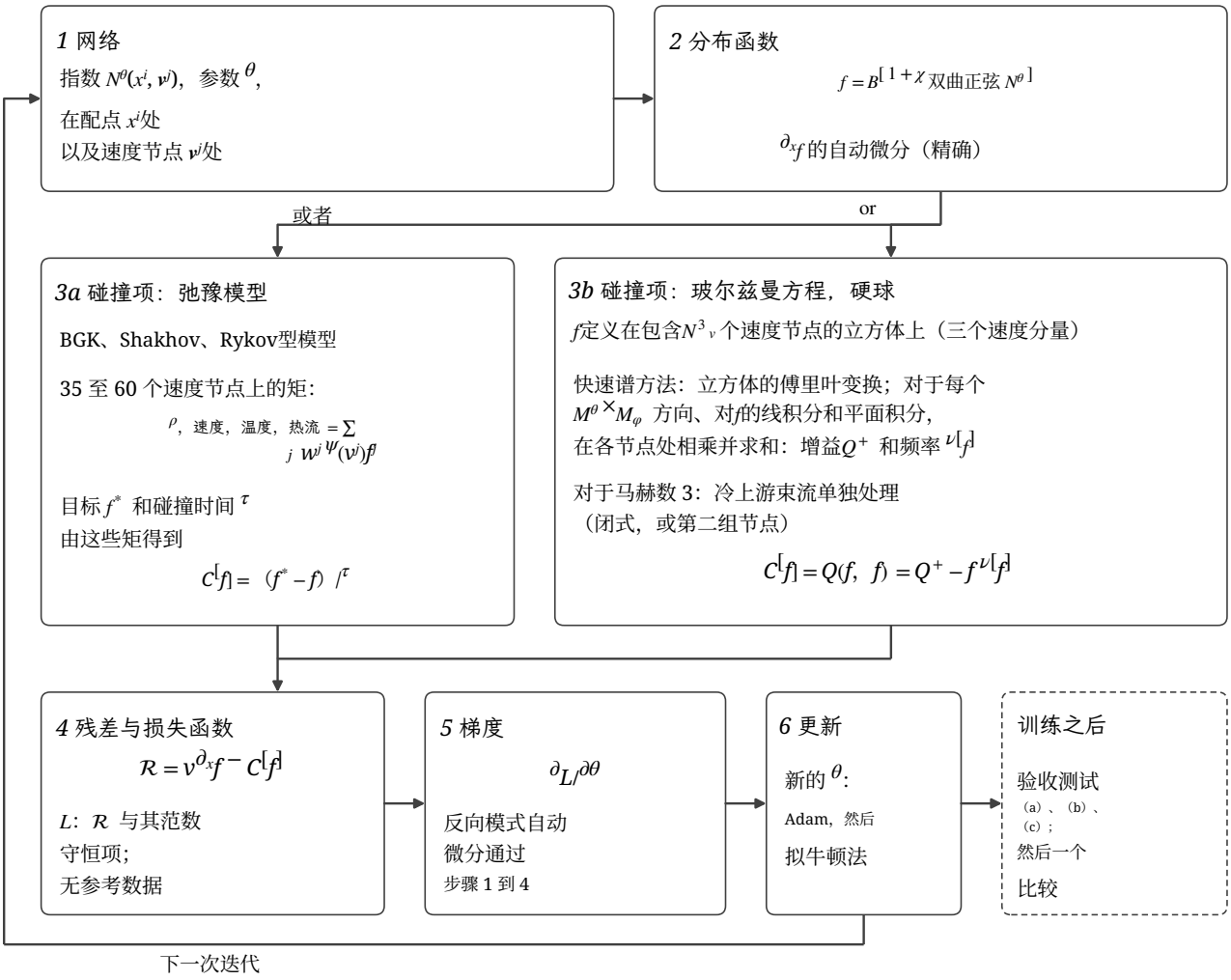

图 19：一次优化步骤。步骤 1 和 2 以及步骤 4 至 6 对所有模型都相同；碰撞项 $C[f]$ 要么根据 f 的少数几个矩进行评估（3a，弛豫模型），要么通过快速谱方法在速度节点立方体上进行计算（3b，硬球的玻尔兹曼方程）。步骤 5 的梯度会经过所有较早的步骤，包括步骤 3b 的傅里叶变换。验收测试以及与参考值（虚线框）的比较在最后一次迭代之后进行，不属于损失函数。

每次运行。我们尝试了五种碰撞项离散化方案。均匀算子在马赫数2下使用，但在马赫数5下失败（第7.3节）；在马赫数 3和5下使用了将冷束分离出来并以闭式计算其碰撞的算子；基于双尺度节点的算子通过了从马赫数8到20的算子测试，在马赫数2下的训练中得到验证，并用于马赫数8和10（第7.5节）；另外两个算子未通过算子测试，因此从未用于产生结果（补充材料第S6节）。

7.2. 马赫数2、3和5的结果

马赫数2解在 48^3 个节点上分三个阶段得到，使用了 $L = 30$：从头开始的 Shakhov模型（$\tau = 1/\rho$）、采用硬球黏度的 Shakhov模型，以及包含 8×16 个方向的玻尔兹曼方程（1500次迭代）。两个 Shakhov阶段的结果与各自模型的DVM 解相差分别在0.001至0.03%和0.002至0.07%之间。马赫数 3解从一个在 64^3 个节点上通过马赫数2延拓得到的沙霍夫解开始，

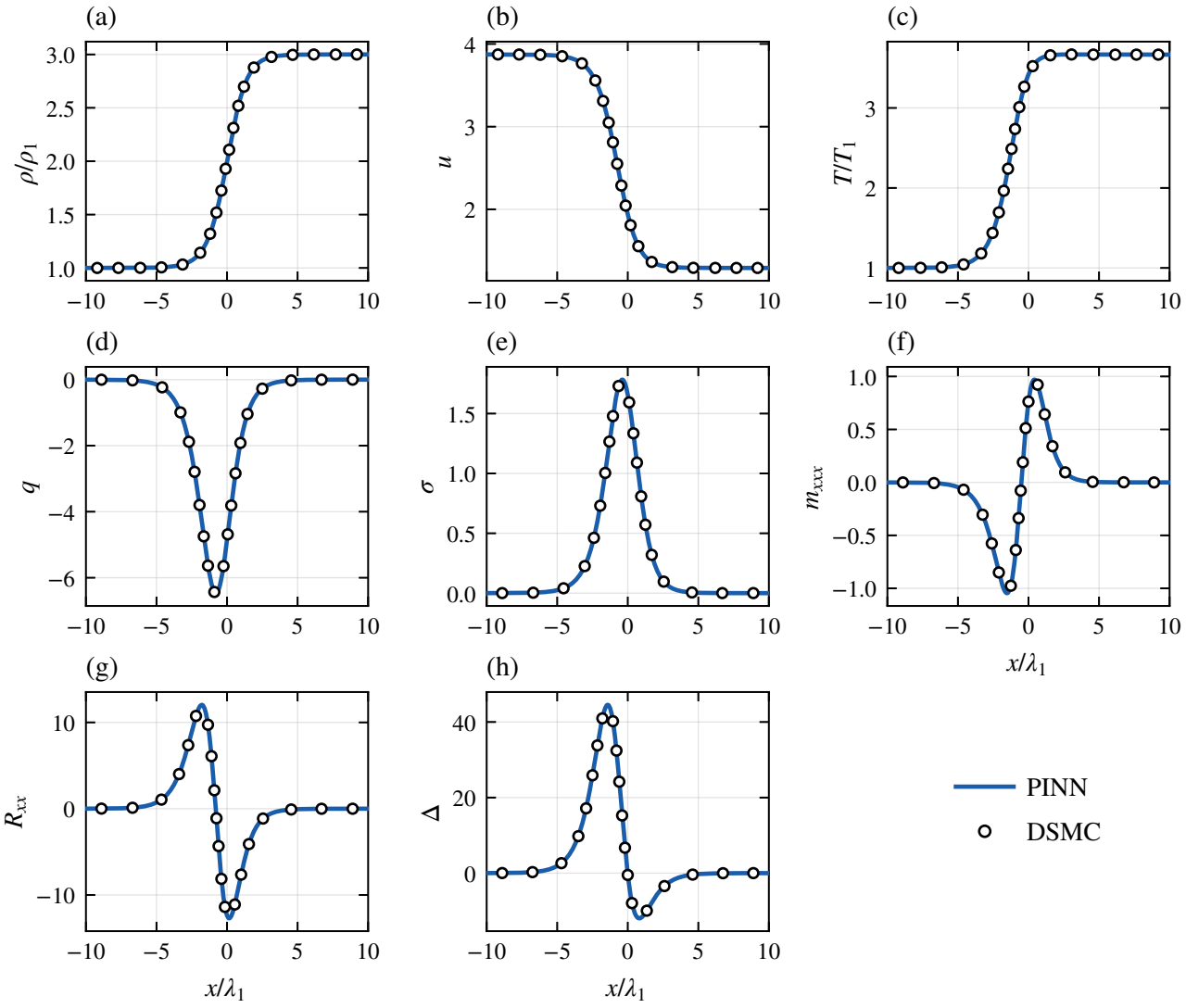

图20：硬球玻尔兹曼方程，马赫数 3，表12 的第二次运行（未接受：遗漏测试（c））：（a） ρ，（b） u，（c） T，（d） q，（e） σ，（f） m_{xxx}，（g） R_{xx}，（h） Δ。线条：物理信息神经网络；符号：直接模拟蒙特卡罗。坐标 x 以上游平均自由程为单位。

并在 48^3 个节点、步长为1.0的网格上使用了分裂算子，包含 12×24 个方向和 $L = 40$。第一次运行因线搜索失败，在第377次迭代（共1500次）时结束；它通过了三项测试，并按照规定进行了比较。其原因是梯度遗漏了损失函数对束多项式的依赖，这一点在没有参考值的情况下被发现（补充材料第S6.3节）。第二次运行仅作了这一项修改，从第一次运行的最终模型开始，但在第1408次迭代时因时间限制而停止。马赫数5解从马赫数5时采用 $\tau = 1/\rho$ 得到的沙霍夫解开始，该解位于 64^3 个节点上（半宽度37.6，步长1.18），并在同一立方体上使用分裂算子，包含16×32 个方向和 $L = 50$。设置在提交作业前已固定；与第7.3节失败运行相比，唯一的改动是碰撞算子。该运行在一块 A100 显卡上用时29.7小时完成了1500次拟牛顿迭代；期间分十次分配任务，集群在各次任务之间抢占了该作业（补充材料第S9.10节）。一次带梯度的损失评估耗时21至25秒（单卡上为32秒），而马赫数 3时为5.0秒；这一耗时大致与节点数和方向数的乘积成正比，二者分别是马赫数 3时的2.4倍和1.8倍。

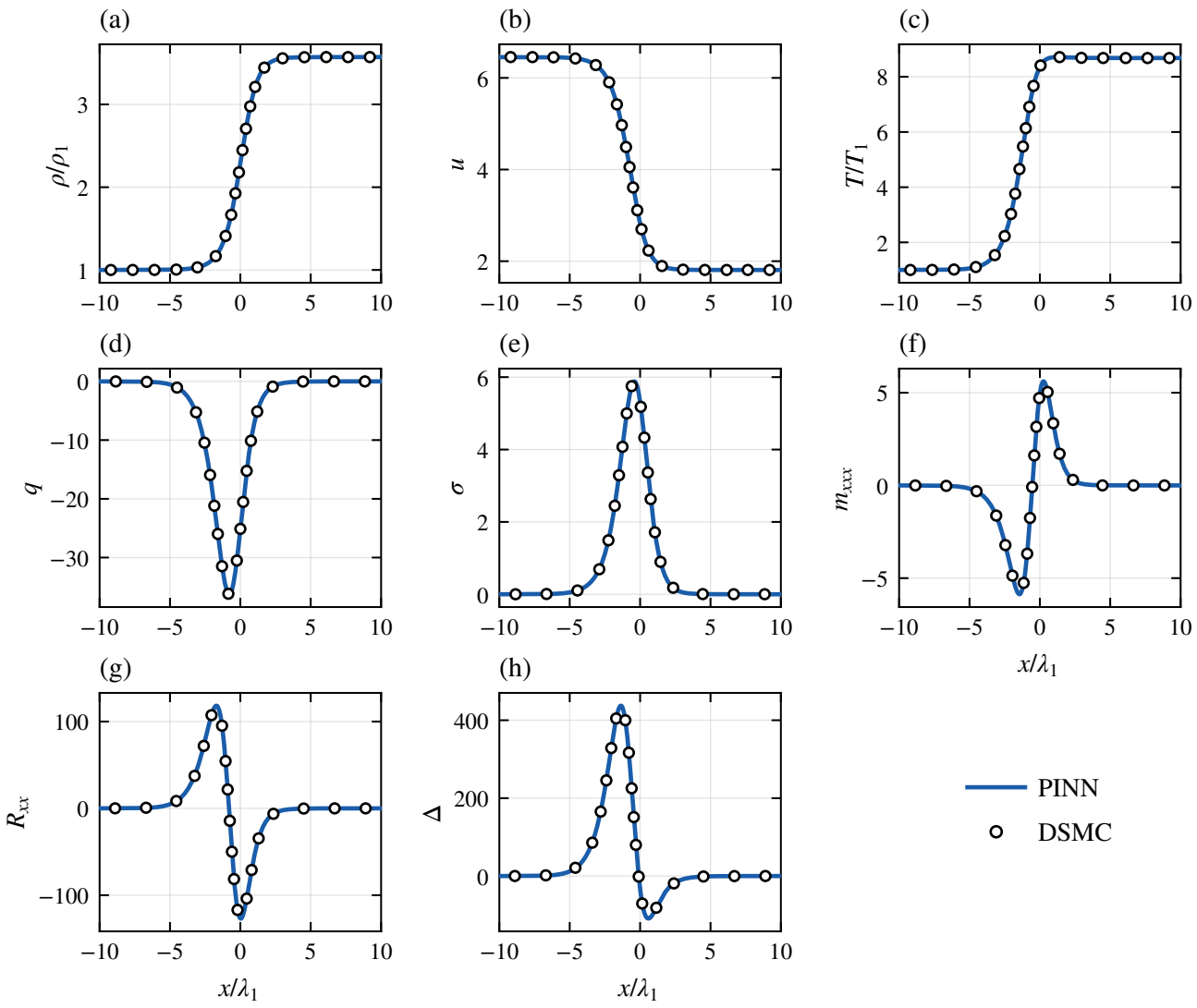

图21：硬球玻尔兹曼方程，马赫数5，采用分裂算子， 16×32 方向，使用 64^3 个速度节点（表12）：（a） ρ，（b） u，（c） T，（d） q，（e） σ，（f） m_{xxx}，（g） R_{xx}，（h） Δ。实线：物理信息神经网络；符号：直接模拟蒙特卡罗。坐标 x 以上游平均自由程为单位。

表12 给出了按度量（31）计算的与直接模拟蒙特卡罗的差异，图20 和21展示了马赫数3和5时的八个场。马赫数2时，比较受参考值散点图的限制。均匀立方体在七个场中的均方根（r.m.s.）差异为直接模拟蒙特卡罗标准误差的1.1至1.8倍；双尺度节点在全部八个场中的差异为1.1至1.6倍；在 ρ至R_{xx} 中，两个网络彼此间的差异比各自与直接模拟蒙特卡罗的差异小三至七倍，而 m_{xxx} 中的0.5%是小场中直接模拟蒙特卡罗散点图的相对大小。在 Δ 中，均匀立方体自身带有0.4%的误差（6.8个标准误差），双尺度节点消除了这一误差。密度厚度为 $3.922\,\lambda_1$，而直接模拟蒙特卡罗的结果为3.902（采用补充材料第S12.2节的拟合时为3.912），因此网络的厚度大0.3%至0.5%；直接模拟蒙特卡罗结果的厚度本身受拟合影响，幅度最高达0.4%。与Ohwada确定性解的表格相比，[30] 网络在 5.6×10^{-4}、 3.4×10^{-4} 和 7.2×10^{-4}中跃变的 ρ、 u 和 T（均方根）方面存在差异，直接模拟蒙特卡罗也如此（第8节）。

在马赫数 3 下，第二次运行在 ρ、 u 和 T 中与直接模拟蒙特卡罗的差异为 0.003% 至 0.006%，0.07

表12：硬球：通量误差 e_F 测试 (a) 的结果、预先固定的三项测试的状态，以及相对 L^2差异（31）：网络与直接模拟蒙特卡罗之间的差异，以百分比表示。标记为 s.e. 的行给出了与直接模拟蒙特卡罗的均方根（r.m.s.）差异，以其标准误差（s.e.）为单位；该标准误差是在马赫数2、5、8和10处计算的。窗口：$|x| \le 20$，在马赫数2、3、5、8和10处分别为40、18、17和 $18\,\lambda_1$；在马赫数 3 处，在其剖面范围之外使用直接模拟蒙特卡罗的端值，$-28 \le x \le 23$。最后两行给出了用于尺度比较的 Shakhov 和 BGK模型的离散速度模型解：采用硬球黏度，并与同一直接模拟蒙特卡罗结果进行对比。

解	$10^5 e_F$	测试	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
马赫数2										
均匀立方体，48_3，8×16	1.4	通过	0.014	0.012	0.015	0.13	0.11	0.55	0.27	0.47
相同 , s.e.			1.3	1.3	1.3	1.7	1.1	1.1	1.8	6.8
双尺度节点，$64^3 + 18^3$	0.68	通过	0.014	0.013	0.015	0.14	0.11	0.55	0.26	0.31
相同 , s.e.			1.4	1.4	1.3	1.6	1.1	1.1	1.5	1.6
双尺度与均匀方法对比			0.003	0.003	0.003	0.05	0.03	0.08	0.09	0.38
马赫数 3，分裂算子，48_3，12×24										
第一次运行（377 次迭代）	14	已通过	0.039	0.031	0.041	0.36	0.37	0.93	0.80	0.76
第二次运行（1408 次迭代）	0.81	（c）遗漏	0.006	0.003	0.005	0.07	0.07	0.26	0.13	0.18
马赫数5，分裂算子，64_3，16×32										
1500 次迭代	8.4	通过	0.0087	0.017	0.035	0.20	0.12	0.26	0.31	0.39
相同 , s.e.			4.4	17	38	31	18	14	26	30
马赫数8、双尺度节点，$80^3 + 26^3$，8×16（第7.5节）										
800 次迭代	4.3	通过	0.0093	0.0077	0.013	0.054	0.051	0.19	0.14	0.10
相同 , s.e.			3.3	8.8	22	6.5	3.9	5.0	19	14
马赫数10、双尺度节点，$80^3 + 26^3$，8×16（第 7.5节；比较非盲测）										
800 次迭代	8.8	通过	0.011	0.015	0.024	0.15	0.14	0.34	0.30	0.26
相同 , s.e.			4.9	24	89	44	16	15	72	200
马赫数2下弛豫模型与直接模拟蒙特卡罗的对比										
Shakhov			0.75	1.1	1.6	10	8.8	61	54	20
BGK			2.2	2.5	4.2	27	14	89	62	24

q 和 σ 中为 0.07%，高阶矩中为 0.13% 至 0.26%（厚度为 2.808，而 $2.806\,\lambda_1$）；其中有多少是统计因素所致尚未评估。与 Dodulad和Tcheremissine 的表格 [31]，在其 37 个点上的结果相比，该网络在密度、温度和纵向温度方面的差异（均方根）分别为 0.0011、0.0020 和 0.0046，而直接模拟蒙特卡罗分别为 0.0012、0.0021 和 0.0046，因此表格保留的三位小数限制了这种比较；与 Ohwada 的表格[30] 相比，在 ρ、u 和 T 中的跃变差异分别为 2.2×10^{-4}、1.6×10^{-4} 和 3.0×10^{-4}，直接模拟蒙特卡罗的结果也相同。利用第一次运行检查了分布函数；与报告的运行相比，第一次运行在各阶矩上与直接模拟蒙特卡罗的偏差大 3.6 至 9.0 倍，因此该检查仅具有定性意义。第一次运行在三个位置和四个径向速度处复现了 Ohwada 的 f，误差为上游最大值的 0.006，即其图中的读数误差；报告的网络在同一比较中的误差为 0.009，差异出现在束流处，因为网络是在步长为 1.0 的速度节点之间进行评估的，其边缘分布平均而言与直接模拟蒙特卡罗的结果相差 2×10^{-4}。第一次运行的边缘分布 $\int f \,\mathrm{d}v_y \mathrm{d}v_z$ 在 29 个位置处与直接模拟蒙特卡罗一致，误差为其最大值的 3×10^{-4}（马赫数2网络为 2×10^{-4}）（第8节；补充材料S12.2节）。根据第 3.7 节的规则，第二次运行不予接受：它在时间限制到达时结束，尽管它通过了测试

(a)和(b)（$e_F = 8.1 \times 10^{-6}$， $r_{\mathrm{rel}} = 1.01$）均通过，但在 Δ处未通过测试（c）；在更细的立方体上，其变化量为下游尺度的 1.12×10^{-3}，超过了 10^{-3} 的限值（其他场最多为 8.1×10^{-4}）。第一次运行通过了全部三项测试（测试（c）为 5.7×10^{-5}），但最终因线搜索失败而终止，且梯度与其目标函数不一致，因此继续运行而未予报告；它与直接模拟蒙特卡罗的差距是第二次运行的3.6至9.0倍。因此，第二次运行的矩已达到步长为1.0的立方体所能积分的极限。

在马赫数5下，运行通过了三项测试： $e_F = 8.4 \times 10^{-5}$，测试点处的动能项是其训练值的1.01倍，而在更细的立方体上，各场的变化不超过其下游尺度的 9.3×10^{-4}，位于 Δ。最大通量误差位于激波内部，距流入边界五个单位处 $T - 1 = 2.1 \times 10^{-4}$，因此计算域中没有出现类似于马赫数10下Shakhov模型的边界层；在马赫数10下，这种超量为0.70（第7.4节）。与直接模拟蒙特卡罗相比， ρ、 u 和 T的差异为0.009至0.035个百分点， σ 和q的差异为0.12和0.20个百分点，三阶和四阶矩的差异则为0.26至0.39个百分点。密度厚度为$2.387\,\lambda_1$，而直接模拟蒙特卡罗的结果为2.389（-0.068 个百分点）；两种解中温度的最大值均位于密度中点后方，比 T_2高0.40%，且二者在该值上精确到五位数字； $1.2\,\lambda_1$ 的极值与 q、 σ、 R_{xx} 和 Δ 的极值之间的差异在0.02至0.12个百分点以内。

这些差异超过了 DSMC 的统计散布（按均方根计算，为其标准误差的 4 至 38 倍；标准误差约为场尺度的 10^{-4} ）。除密度场外，这些差异在各场中均具有系统性，并且在密度中点上游 3 至 6 个平均自由程处最大；此处温度差异达到 T_2 的 9×10^{-4}，速度差异达到 $\rho_2 T_2^2$ 的 5×10^{-3}（补充图 S4）。这些差异是网络在更细立方体上的变化量的 1.3 至 8 倍，也是 DSMC 将网格单元和时间步减半时变化量的 0.8 至 2.3 倍（第 4.2 节），即与参考值的离散误差同量级。DSMC 的计算域起始位置比网络域更靠近激波，位于 $-30\,\lambda_1$，而网络域位于$L = 50\,\lambda_1$；已知上游计算域过短会使前驱区变形（第 7.4 节），因此我们又进行了第二次 DSMC 计算，将流入边界设在$-60\,\lambda_1$ 以检验这一点。第二次计算与第一次相差 0.5 至 1.7 个联合标准误差；网络与 DSMC 在前驱区的差异在两种计算中相同（温度的均方根差异为3.4×10^{-4} 的 T_2），因此 DSMC 的流入边界位置并非其原因。结合网络在远上游的温度超额（第 7.5 节），这表明前驱区差异源于网络。在远离激波、DSMC 的状态在其标准误差范围内等于上游状态处，网络也显示出微弱加热：在上游 28 至 12 个平均自由程之间，从 0.7×10^{-3} 增至 1.4×10^{-3} 的 T_1；这一变化低于 T_2的 2×10^{-4}，损失函数无法分辨它（第 6.7 节）。

因此，这里在马赫数 2 下求解玻尔兹曼方程，结果与直接模拟蒙特卡罗的散点图一致；在马赫数5下，各个场的相对误差均在 0.4 百分比以内 L^2，与参考值的差异处于离散误差的量级；在马赫数 3 下，表现最好的运行结果与直接模拟蒙特卡罗的差异在 0.3 百分比以内，但有一项预先固定的测试未通过，偏差达 12 百分比，且运行耗尽了时间限制。作为比较，表 12 最后两行显示了弛豫模型与硬球解的差距：在黏度相同的情况下，Shakhov模型和BGK模型在马赫数2下的热流与硬球结果分别相差 10 和 27 百分比，三阶和四阶矩相差 20 至 89 百分比，比网络与直接模拟蒙特卡罗之间的差异高两个数量级。

7.3. 为什么均匀立方体在马赫数*5*下失效

第一次马赫数 5 计算采用包含 64^3 个节点（步长为 1.18）的均匀立方体和 8×16 个方向，但未能收敛：经过 1500 次迭代后，损失函数停滞在 1.8×10^{-3}，且 $e_F = 4.9 \times 10^{-2}$，

表 13：双尺度速度节点上的 Shakhov模型：第 3.7 节（e_F：通量误差，限值 10^{-3}；r_{rel}：损失比，限值 10； c：更细的速度网格上场的最大变化，限值 10^{-3}），距流入边界 $\vartheta_5 = T - 1$ 五个单位处的超额温度，以及与离散速度法（31）的相对差异（以百分比表示）。序列 T： $64^3 + 18^3$ 个节点， $L = 40$，160 个配点。序列 F： $80^3 + 26^3$ 个节点， $L = 40$，160 个配点。序列 G：采用 F 的节点， $L = 15M$，320 个配点。短横线表示未进行比较的运行。通过：马赫数 3 和 5 下的 T，马赫数 8 下的 F，以及马赫数 8 和 10 下的 G。

序列	M	$10^5 e_F$	r_{rel}	$10^5 c$		ϑ_5	ρ	u	T	q	σ	m_{xxx}	R_{xx}	Δ
T	3	1.1	0.97	0.98			0.003	0.001	0.002	0.015	0.021	0.029	0.021	0.021
T	5	5.3	1.03	9.5	0.010		0.004	0.011	0.020	0.040	0.026	0.059	0.071	0.064
T	8	60	1.06	300	0.21		0.027	0.075	0.087	0.18	0.20	1.1	2.1	3.5
F	8	62	0.92	9.6	0.18		0.031	0.090	0.14	0.24	0.18	0.30	0.42	0.96
F	10	161	1.19	51	0.70		–	–	–	–	–	–	–	–
G	8	1.9	1.00	15	0.00006		0.002	0.005	0.007	0.023	0.034	0.050	0.030	0.033
G	10	4.4	1.00	39	0.00033		0.004	0.009	0.008	0.031	0.067	0.078	0.041	0.092

并且该次运行未与任何参考值进行比较。仅从算子本身就发现了两个原因。在该立方体上，冷上游麦克斯韦分布并非离散算子的平衡态：其碰撞项为 1.7×10^{-3}，而损失项为 2.8×10^{-6}；相比之下，在马赫数 2 的立方体上，损失函数有一个由速度网格决定的下限，网络会扭曲解以降低损失。此外， 8×16 个方向无法准确积分束流与热气体之间的碰撞：在足以解析束流的立方体上，其误差在马赫数 2 时为 9×10^{-6}，在马赫数 5 时为 2.6×10^{-3}。分裂算子消除了第一个原因，因为束流的窄麦克斯韦分布不会在粗网格立方体上经过变换；而 16×32 个方向则消除了第二个原因。两者结合后，便可在同一立方体上求解马赫数 5 激波（第 7.2 节）。在均匀立方体上，这两项要求意味着马赫数 5 时需要 104^3 个节点和 16×32 个方向；采用解析束流时，马赫数 8 下每次拟牛顿迭代预计耗时 5.6 分钟。双尺度节点消除了这两个数量随马赫数增加而增长的情况（图 9）。确定性求解器也面临相同要求：马赫数 8 时，均匀速度步长为 $1.5\sqrt{RT_1}$，Malkov 等人的离散速度解的节点 [32]对束流峰值的捕捉偏差达 11%；Dodulad和Tcheremissine 求解器的成本 [31] 则按 M^2增长，因此马赫数超过 10 时需要集群。

7.4. 双尺度节点与初步 *Shakhov*阶段

在马赫数下对双尺度节点应用玻尔兹曼算子之前，先在相同节点上求解带有 $\tau = 1/\rho$ 的 Shakhov模型：通过马赫数延拓，每步进行 1500 次拟牛顿迭代，并将结果与同一模型的 DVM 解进行一次比较（长度单位 ℓ_0）。表13 记录了所进行的三组运行序列。

序列 T 通过了马赫数5。在马赫数8时，它未通过测试（c），在 Δ中；按照规定，下一个马赫数未基于该结果予以接受；其马赫数10运行达到时间限制，并显示 $e_F = 1.2 \times 10^{-3}$。序列 F 采用了该测试中更精细的网格作为其训练网格。在马赫数8时，它通过了三项测试，其中 Δ 为0.96 %，而不是3.5%；在马赫数10时，它未通过测试 (a)，通量误差不再下降，因此未进行比较。原因是在没有参考值的情况下，从存储的剖面中发现的。最大通量误差位于紧邻流入边界的层中（1.61×10^{-3} 位于 $x = -39.8$处），而不在激波中；距该边界五个单位处，温度在马赫数10时仍比上游值高0.70，在马赫数8时高0.18（补充章节S9.9）。形式（18）在 $x = -L$处施加上游平衡，而 $L = 40$ 会截去向上游运行的高温分子；该截断表现为一个边界层

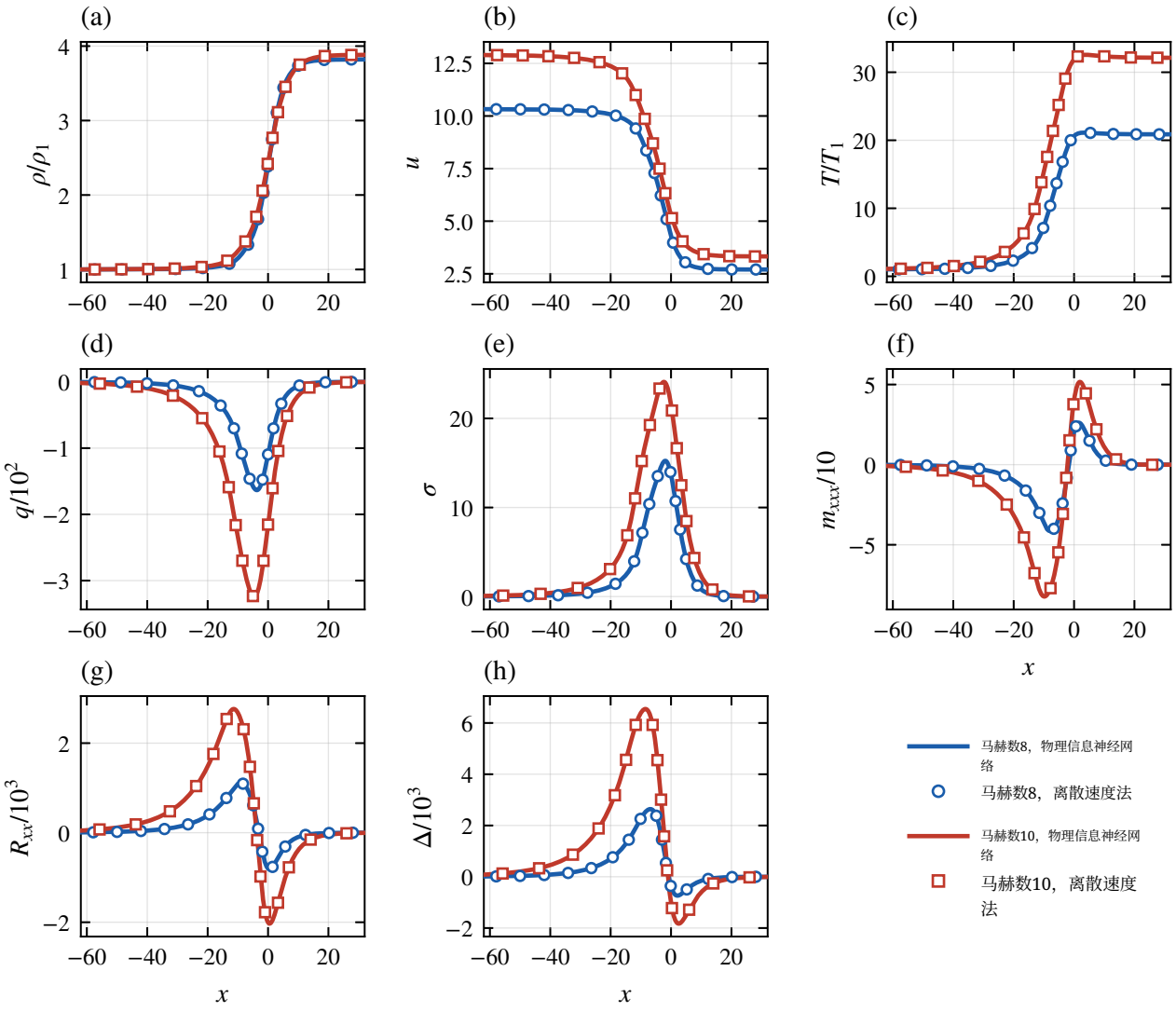

图 22：在双尺度三维速度节点上由物理信息神经网络求解的 Shakhov模型（表 13中的序列 G），马赫数8（蓝色）和马赫数10（红色）；各面板同图 10。线条：物理信息神经网络；符号：一维 Shakhov 离散速度法。

这是动理学方程所不允许的。速度网格不是原因，因为测试（c）已通过。补救措施是简化计算的规则 $L = 15M$，使用320个配点。

经过这一次修改，序列 G 在马赫数8和马赫数10下均获得认可（图 22）：最大通量误差位于激波内部，与离散速度法的差异在马赫数8下为0.002%至0.05%，在马赫数10下为0.004%至0.09%。在马赫数8下，这些误差比序列 F 小5至30倍，因此序列 F 的最大误差来自过短的计算域。参数数量翻倍（15 177），且每个配点使用约50万个速度节点，而不是50个；这些解在 Δ方面比第 5 节的简化计算更接近离散速度法（在相同窗口 $|x| \le 40$ 下，马赫数 8 和 10 时分别为 0.03% 和 0.09%，而简化 Shakhov 运行分别为0.77%和2.2%），每步使用1500至2000次拟牛顿迭代，而不是800次。

7.5. 马赫数*8*和*10*时的结果

马赫数8和10下的玻尔兹曼阶段均从序列 G 的 Shakhov 解开始，将其通过 x 的函数映射到平均自由程，并保留（$L = 95.5$ 和 $119.4\,\lambda_1$），使用相同的节点（$80^3 + 26^3$）、 8×16 个方向、320个配点以及包含15 177个参数的网络。损失函数包含玻尔兹曼方程、解析终态和守恒项，并通过800次拟牛顿迭代进行最小化；这一迭代次数是根据测得的成本预先固定的，每次迭代约需100秒（马赫数8时使用一张 A100 显卡需21.9小时）。设置和三项测试均在提交每个作业之前确定，且只有在马赫数8阶段通过测试后，马赫数10作业才能开始。两个阶段均通过：在马赫数 8 $e_F = 4.3 \times 10^{-5}$下，测试点处的动能项为其训练值的1.00倍，在更精细的节点上，各场相对于其下游尺度的变化最多为 4.5×10^{-6}；在马赫数10下，这三个数分别为 8.8×10^{-5}、1.01和 1.3×10^{-5}。

在马赫数8时，将网络与直接模拟蒙特卡罗比较了一次（表12；引言中的图2展示了剖面，并在每个剖面下方给出与直接模拟蒙特卡罗的差异及其标准误差；图23展示了马赫数10时的相同结果）。在 $|x| \le 10\,\lambda_1$，马赫数8时的逐点差异在 ρ、 u、 T、 q 和 σ 中至多为场的尺度的 0.6×10^{-3}，在三阶和四阶矩中至多为 2.0×10^{-3}；马赫数10时，这两个上限分别为 1.6×10^{-3} 和 3.9×10^{-3}。直接模拟蒙特卡罗的标准误差不超过 0.6×10^{-3}，且在大多数场中，最大差异出现在密度中点前方1至5个平均自由程处。马赫数8时， ρ、 u 和 T中的相对 L^2 差异为0.008至0.013百分比， q 和 σ 中为0.05百分比，三阶和四阶矩中为0.10至0.19百分比；密度厚度为 $2.2652\,\lambda_1$，而对照值为2.2650； q、 σ、 T 和 Δ 的极值相差不超过0.02百分比。与Dodulad和Tcheremissine的表 [31] 相比，网络在密度、温度和纵向温度跃变方面的差异分别为 2.8×10^{-4}、 7.5×10^{-4} 和 1.4×10^{-3} （对其37个点计算均方根），而直接模拟蒙特卡罗的差异分别为 2.8×10^{-4}、 8.5×10^{-4} 和 1.5×10^{-3}；网络与直接模拟蒙特卡罗之间的差异则约小六倍。

在马赫数10下，参考值是将网格单元和时间步长减半后的直接模拟蒙特卡罗计算（24 个系综）。这项比较并非盲测。在运行结束前，应作者要求，将其第 550 次迭代时的状态副本与直接模拟蒙特卡罗结果进行了比较，同时作业保持不变并继续运行；当时的差异为 0.014% 至 0.38%。预先固定的 800 次迭代完成后，对最终状态进行了一次比较： ρ、 u 和 T中的差异为 0.011% 至 0.024%， q 和 σ中的差异为 0.15% 和 0.14%，三阶和四阶矩中的差异为 0.26% 至 0.34%；厚度为$2.2384\,\lambda_1$，而参考值为 2.2363（$+0.09$ %）；温度的最大值比 T_2高 0.97%，且精确到五位数字一致。训练过程没有依赖这次中途查看，但该结果不能算作预测。

以直接模拟蒙特卡罗标准误差为单位，两种马赫数下的差异都可分辨（马赫数8时为3至22个标准误差，马赫数10时为5至200个；表12），与马赫数5时一样，这些差异具有系统性，且在前驱区最为明显。与之相伴的是，上游很远处温度缓慢偏高；从马赫数5开始，各网络都保留了这种现象，而直接模拟蒙特卡罗中则不存在。在密度中点上游28至18个平均自由程处， $T - T_1$ 为 0.7×10^{-3} 至 1.1×10^{-3} 的 T_1（马赫数5时）， 0.7×10^{-3} 至 0.8×10^{-3}（马赫数8时），以及 2.1×10^{-3} 至 2.8×10^{-3}（马赫数10时）；此处直接模拟蒙特卡罗与 4×10^{-5} 的 T_1相差在 1.4×10^{-4} 或以下，低于三项测试所能分辨的程度（下游尺度的 10^{-3} 上限）。一种可能的原因（尚未证实）是各阶段初始所用的沙霍夫解；其前驱区要长得多，因为它的黏度与 T成正比；当局部分布函数变为冷束后，损失函数对其残余部分赋予的权重较低。准确度

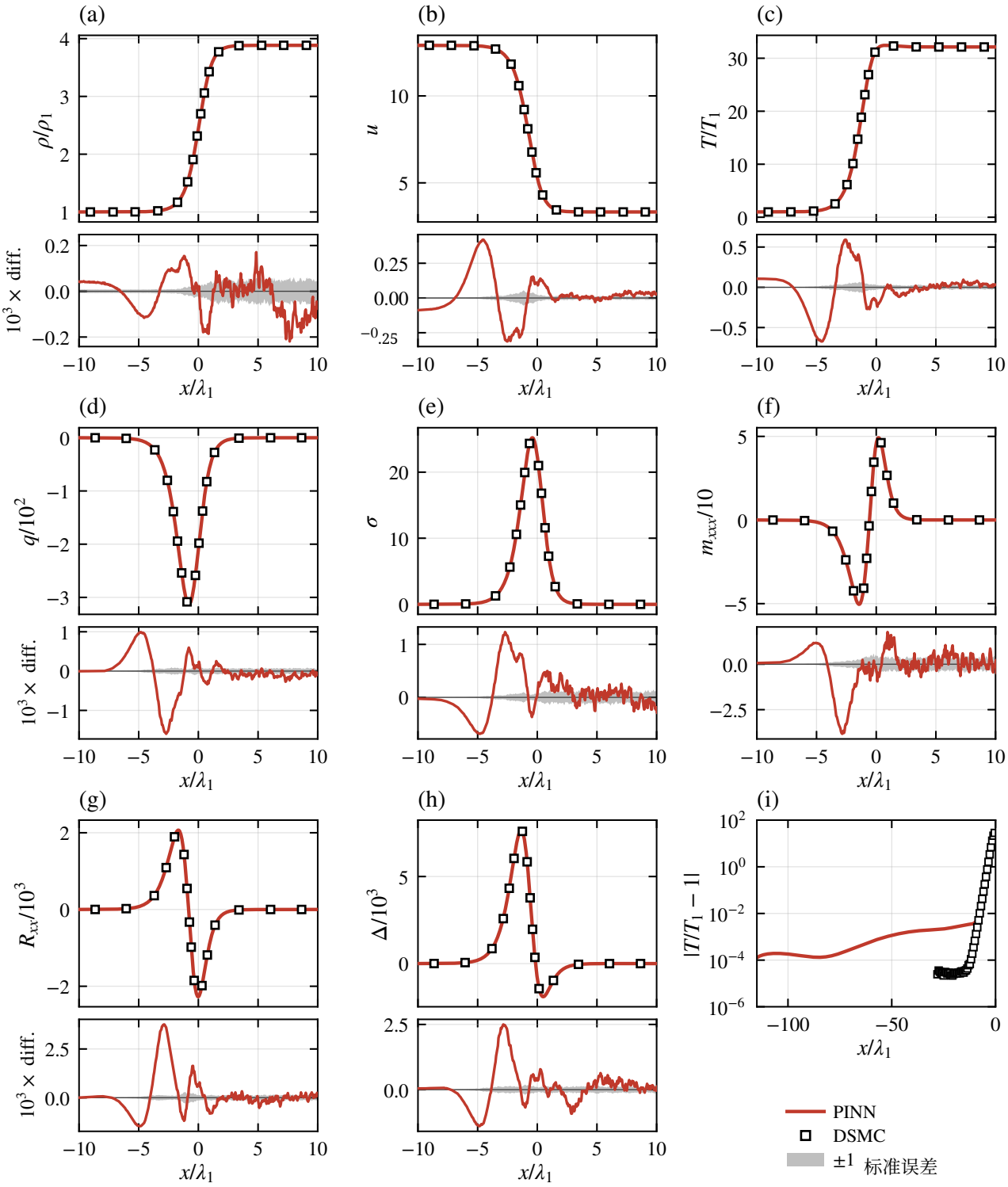

图23：马赫数10下硬球的玻尔兹曼方程（非盲测比较）：面板 (a) 至 (h) 以及差值面板与图 2相同；直接模拟蒙特卡罗采用了减半的网格单元和时间步长。(i) 远上游温度，$|T/T_1 - 1|$，在对数坐标轴上：网络在密度中点上游28至12个平均自由程处仍保留了 2×10^{-3} 至 3.5×10^{-3} 的过量，而直接模拟蒙特卡罗的偏差在 10^{-4} 以内， T_1；剖面 (a) 至 (h) 无法显示这一点。

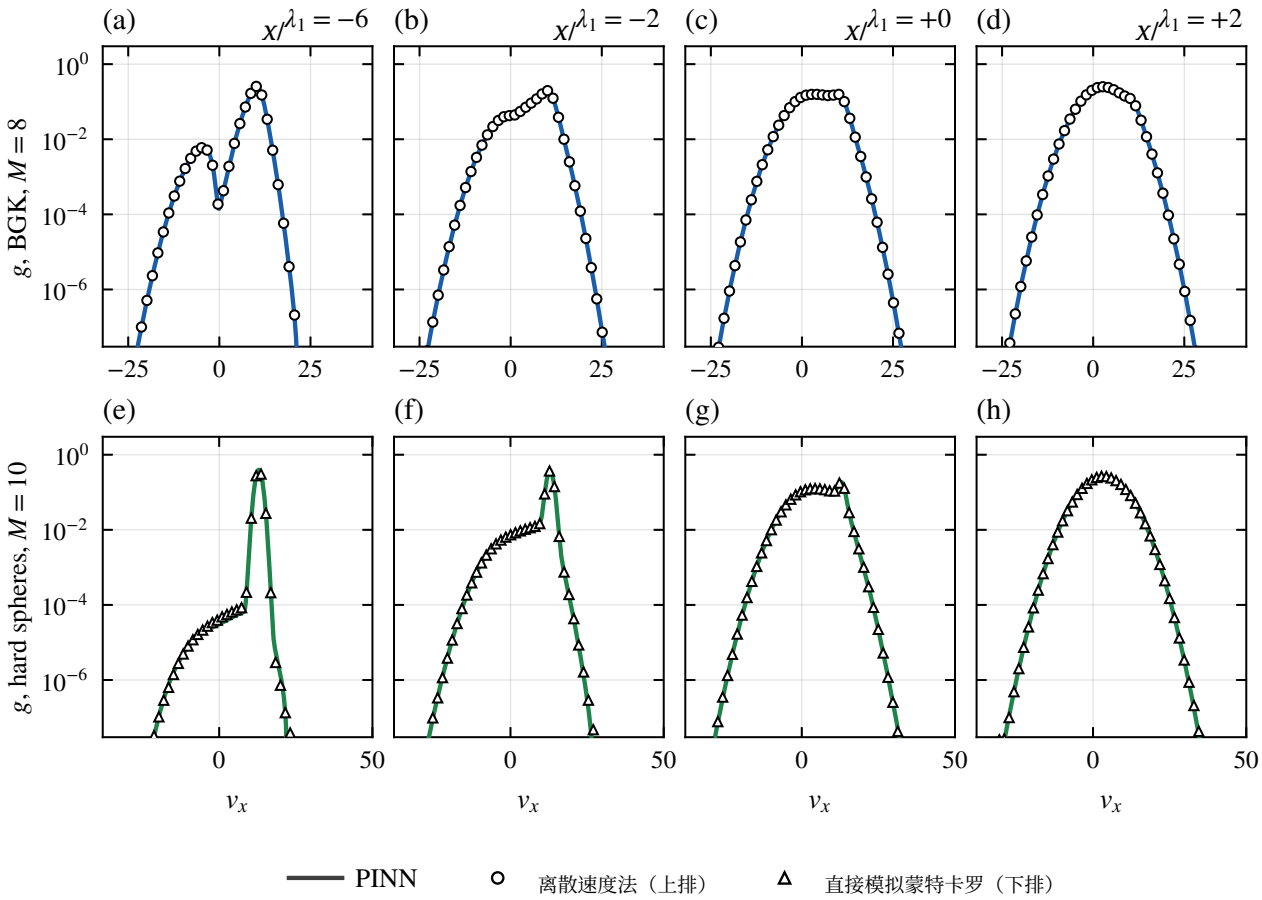

图24：约化分布函数 $g(v_x) = \int f \, \mathrm{d}v_y \mathrm{d}v_z$：网络（曲线）和参考值（符号）在距密度中点四个位置处的结果，位置标注在各列上方。(a–d) BGK模型，马赫数8，离散速度法；(e–h) 硬球，马赫数10，直接模拟蒙特卡罗。对于 BGK模型 x 通过 $\ell_0 = 0.795882\,\lambda_1$ （第 2.2 节）转换；对于硬球，网络结果按直接模拟蒙特卡罗的速度分箱取平均。Shakhov模型和马赫数8时的硬球结果见补充图S5。

因此，上述位置均指激波处；在远上游处，这些网络给出的温度准确度约为 $3.5 \times 10^{-3}\,T_1$。

对于马赫数10激波，F. G. Tcheremissine 通过其守恒投影法提供了解（私人通信 [123]）。此处不复现其数据，仅列出差异。网络的约化密度和温度与其结果相差跃变量的0.49%和0.68%（均方根），热流相差其峰值的0.51%，应力（由其密度和纵向温度计算）相差峰值的1.3%；对于直接模拟蒙特卡罗，这四个数值分别为0.49、0.68、0.49和1.3。分布函数 $f(v_x, v_r \approx 0)$ 在从流入边界到密度中点后方 $1.8\,\lambda_1$ 的四个位置处，与其结果相差峰值的0.6%至0.9%（均方根）（网络），直接模拟蒙特卡罗则相差0.6%至1.1%。因此，在马赫数8和马赫数10下，网络和直接模拟蒙特卡罗与第三种解的差异相同，而二者彼此之间的一致程度高于各自与第三种解的一致程度。

7.6. 分布函数

迄今比较的矩是分布函数的积分；图24和补充图S5 比较的是分布函数本身。网络在通过验收标准

并比较其矩之后，在激波中的四个位置对网络进行了评估，这些位置存有参考分布函数：马赫数8时 BGK 和 Shakhov 模型的 DVM 分布函数，以及马赫数8和10时硬球气体 DSMC 的 v_x 直方图。速度范围内的均方根差，以该位置参考值的最大值为单位，BGK模型为 0.5×10^{-4} 至6×10^{-4}（最大逐点差异为 2.1×10^{-3}），Shakhov模型为 0.9×10^{-4} 至 5×10^{-4}（2.0×10^{-3}），马赫数8时硬球气体为 0.7×10^{-4} 至 1.6×10^{-4}（8×10^{-4}），马赫数10时为 0.8×10^{-4} 至 1.8×10^{-4}（1.3×10^{-3}）。马赫数8时，吻合覆盖图中所示的六个数量级，其中包括在激波前方逆上游运动的分子：在上游六个平均自由程处，BGK网络中这类分子占3.24%，而DVM中为3.23%；Shakhov模型中为7.14%，而DVM中为7.12%；马赫数8时硬球气体中则为 2.66×10^{-4}，而参考值为 2.69×10^{-4}。马赫数10时，网络给出的结果为 2.25×10^{-4}，而DSMC为 2.60×10^{-4}；在统计上可分辨的 2×10^{-4} 密度粒子群中，两者相差13%（该位置的均方根为19个标准误差，其他位置为1至4个标准误差）。采用分裂算子的马赫数5网络对这类粒子群的预测精度较低：在上游六个平均自由程处，逆上游运动的分子占0.022%，而DSMC中为0.031%；在上游八个平均自由程处，网络给出的值约为DSMC的三分之一。因此，马赫数8时能够再现硬球气体中稀少的逆上游运动分子，马赫数10时误差在13%以内，而马赫数5时只能再现其数量级。

图 25 并列展示了马赫数8下的三种模型；它们采用的黏度定律不同，因此这种比较并非同类比较，而对这些模型的研究也超出了本文的范围。在归一化密度相同的情况下（图 b 至 d），三种分布函数在高温部分几乎重合，而向上游运动的分子比例相差不超过一个百分点（三个位置分别为7%至8%、21%至22%和26.5%）。它们的差异体现在冷束上：硬球模型在密度中点处的冷束更尖锐；差异也体现在快速前向尾部上，Shakhov分布在该处变为负值。在距激波固定距离处（图 a），各模型的结果相差数个数量级：BGK和Shakhov模型中向上游运动的分子分别占3.2%和7.1%，而硬球模型中仅占0.027%；这是因为弛豫模型的激波在上游平均自由程尺度下分别厚2.9倍和3.7倍，且其 $\tau = 1/\rho$ 。图 26 通过分子展示了这三个解，并给出了两个位置处的参考值分布函数和网络分布函数；马赫数5下对应的图为补充图 S3。补充视频2和3展示了这些数据的动态变化（补充章节 S7）。

7.7. 更高马赫数

马赫数10以上的玻尔兹曼阶段并非本文的研究成果。在双尺度节点上，热立方体必须随着马赫数的增加而扩大（144^3 马赫数 15 时的节点），每个阶段的成本也会随之增加（第 9.1节）；因此，本文尚未涉及马赫数10以上的玻尔兹曼方程。

8. 与已发表的解和测量结果比较

第 5 至 7 节的解现与独立的已发表解进行比较；对于氮气，还与实验和分子模拟结果进行比较（补充材料第 S12 节）。网络与参考值在此处采用的每个量上都相差不超过 0.4 百分比，因此，与文献结果之间较大的差异源于模型方程或已发表的结果；远前驱区的网络精度较低（第 6.7 节），因此不予采用。

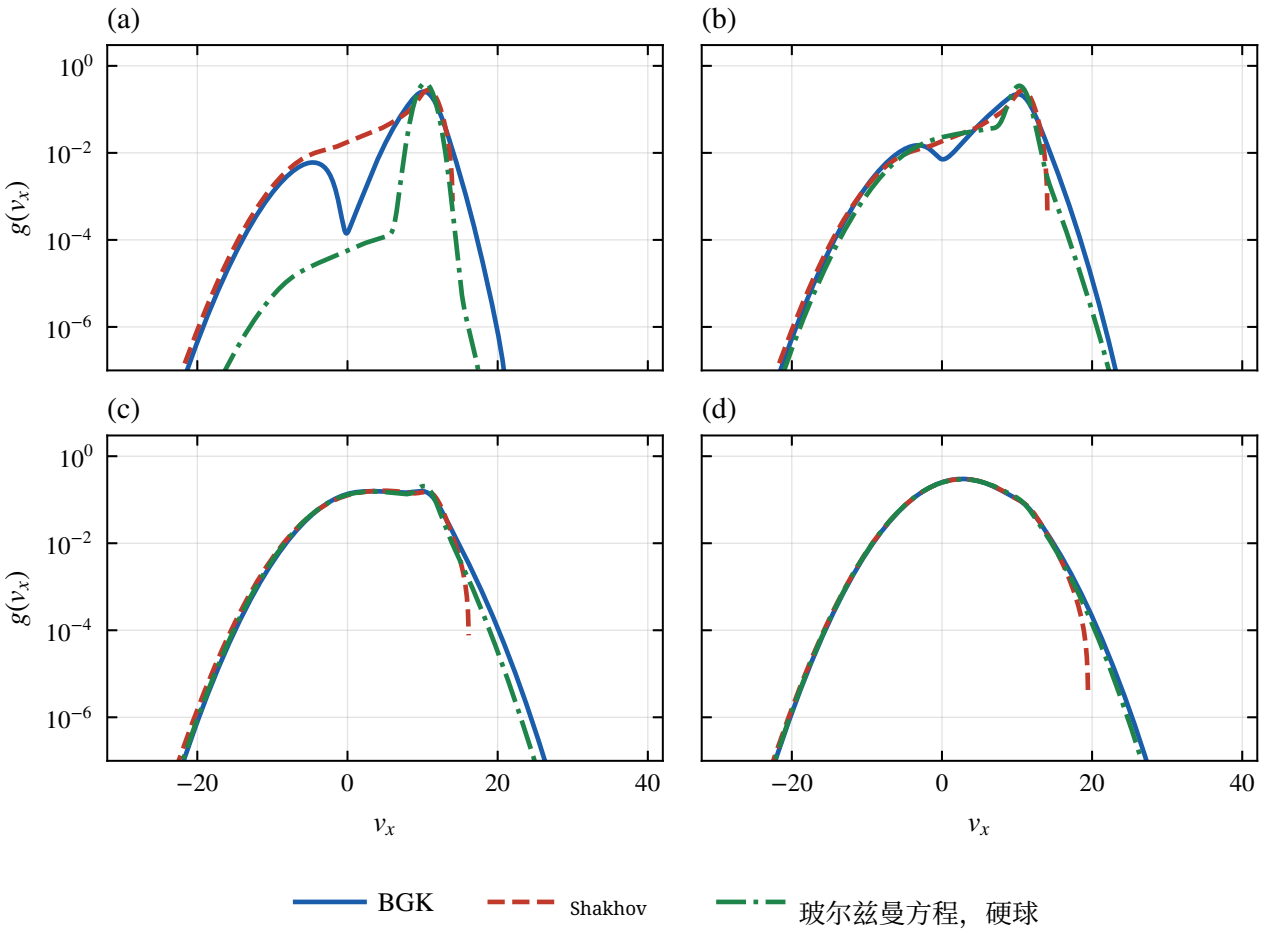

图25：马赫数8时，三种单原子模型的约化分布函数 $g(v_x)$，取自网络结果：BGK和Shakhov模型，其中 $\tau = 1/\rho$ （黏度与 T成正比）；以及硬球玻尔兹曼方程（黏度与 $T^{1/2}$成正比），且上游黏度相同。(a) 密度中点上游六个平均自由程处；(b)、(c)、(d) 分别为各解的归一化密度 $(\rho - \rho_1)/(\rho_2 - \rho_1)$为0.1、0.5和0.9处。图中未绘出Shakhov分布函数的负值。

硬球。 与 Ohwada的确定性解 [30] 在马赫数2和3下的表格结果相比，网络的差异与我们的直接模拟蒙特卡罗结果一样，源于表格的舍入（第 7.2 节）。首次马赫数 3 运行（第 7.2 节）对 Ohwada的 f 的复现误差为上游最大值的 0.006，这正是其图 9 的读数误差（图 27a）。

弛豫模型。Shakhov解在 $\mu \propto T$ [47] 马赫数2和5时与我们的结果相差不超过2.9%，但在马赫数10时，他的 $\sigma/(\rho T)$ 最大值高出5.4%（BGK）和7.8%（Shakhov）（图27c）；网络结果与离散速度法在此处相差不超过0.04%，差异的原因尚未确定。对于 $\tau = 1/\rho$ 黏度取麦克斯韦分子的黏度；Shakhov模型以玻尔兹曼速率弛豫其应力和热流，但 R_{xx} 和 Δ 在 p/μ而非$\frac{7}{6}\,p/\mu$ 和 $\frac{2}{3}\,p/\mu$ [6]。马赫数从5到20时，Shakhov激波比Lumpkin和Chapman的直接模拟蒙特卡罗结果窄3.5%至7.5% [28]（图27b），这一差异与不同直接模拟蒙特卡罗研究结果的离散范围（9.8%至 $11.2\,\ell_0$，马赫数为 8 [25, 27, 28]）大致相当；马赫数高于10时，其温度超调为 $T_2 - T_1$ 的1.4%至1.7%，是数字化直接模拟蒙特卡罗值的两到七倍；该值为 0.5 ± 0.3%，马赫数为 11 [28]。BGK激波窄25%至28%，且没有温度超调。

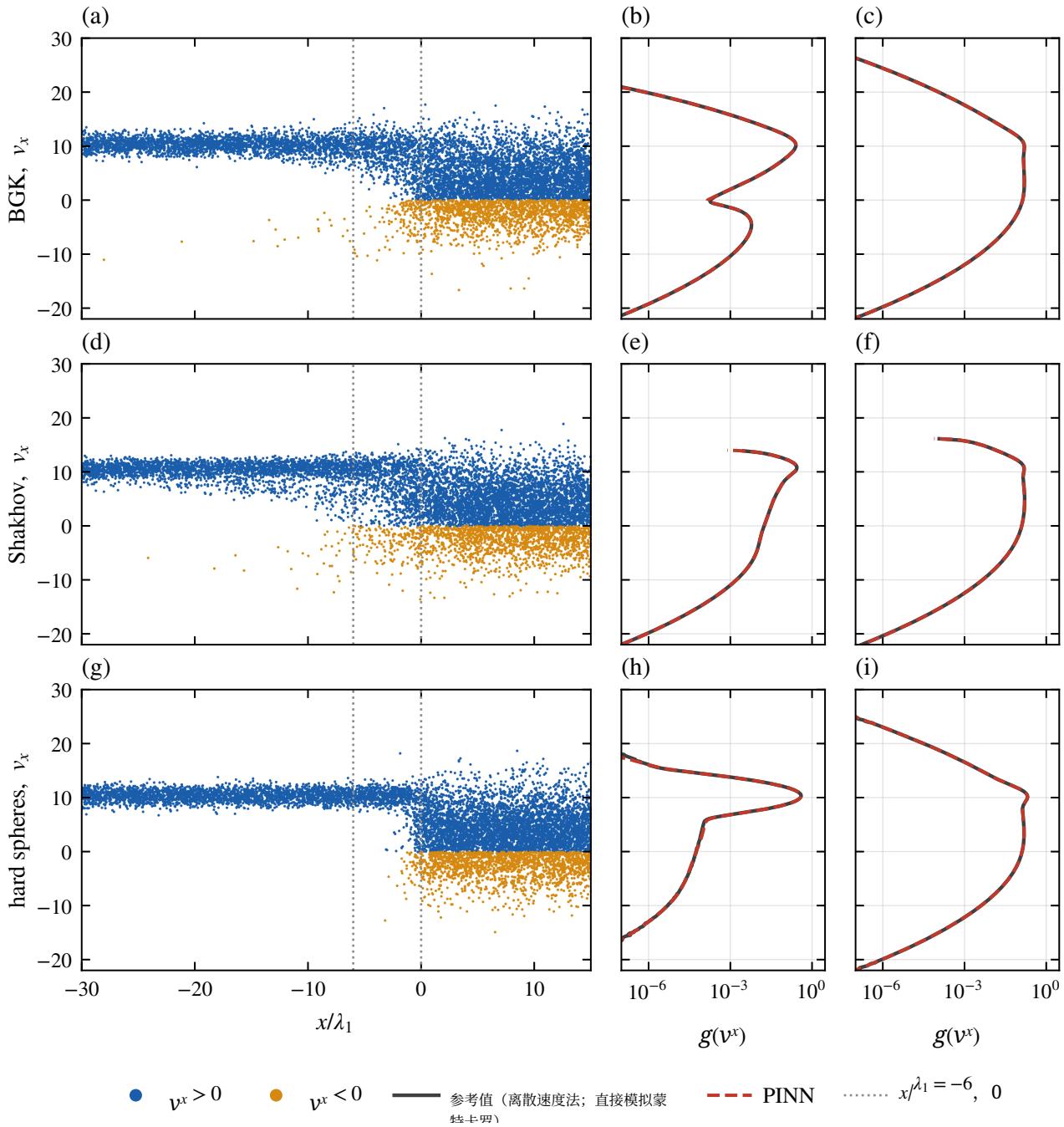

图26：相同上游黏度下马赫数8时的三种单原子模型：BGK（a–c）、Shakhov（d–f）、硬球玻尔兹曼方程（g–i）。左：位置与速度平面中的分子 v_x，图示窗口内每种模型存储分布函数的9000个样本（BGK和Shakhov采用DVM，硬球模型采用网络；Shakhov模型取其正部样本），蓝色表示 $v_x > 0$，橙色表示 $v_x < 0$；散点图以每英寸400点栅格化。中间和右侧：在 $g\,(v_x)$ 处 $x/\lambda_1 = -6$ 和0时的约化分布，对应左侧面板中的点线，纵轴为 v_x。实线：参考值（DVM；硬球模型采用DSMC）；虚线：PINN。在距密度中点上游六个平均自由程处，三种模型中分别有3.2、7.1和0.027百分比的分子向上游运动。Shakhov分布的负值未在对数坐标轴上绘出。速度范围为 $\sqrt{RT_1}$。补充视频3对这些数据进行了动画演示（https://www.youtube.com/watch?v=pMRke3ZgKbI）；补充视频2展示了马赫数5时的相同结果（https://www.youtube.com/watch?v=Zow8LDTRQ5M）。

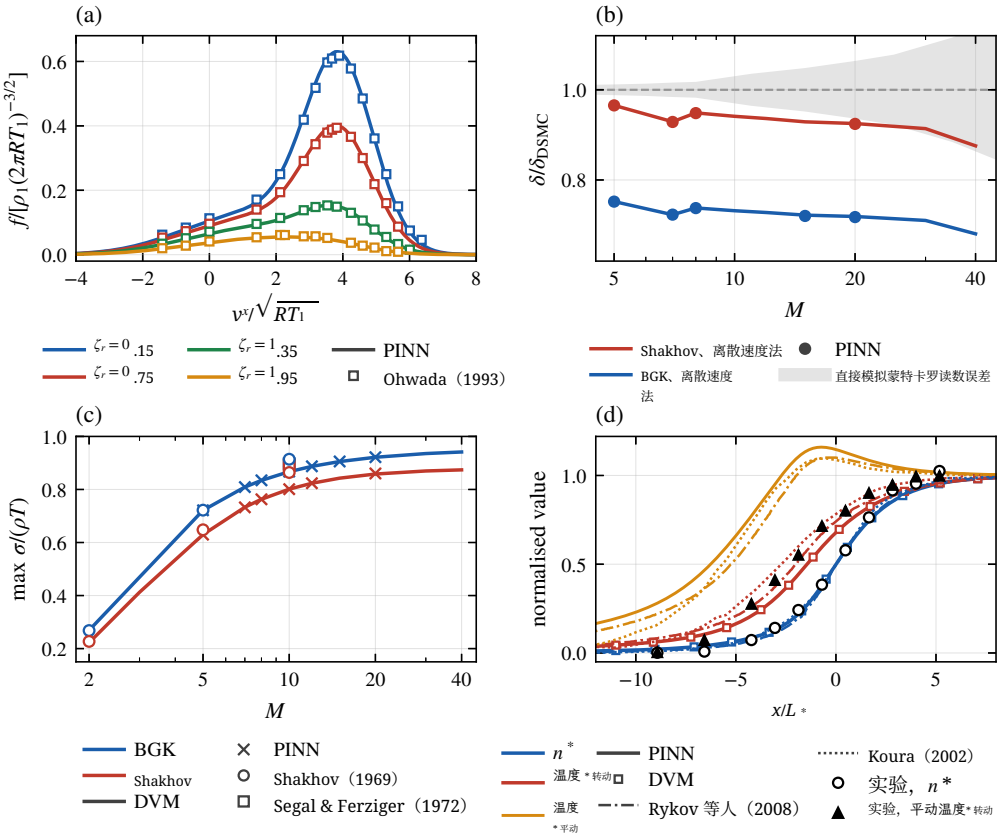

图27：(a) 硬球，马赫数 3： f 在 $x = -0.51\,\lambda_1$ 四种径向速度下 ζ_r (单位 $\sqrt{2RT_1}$)；方块：Ohwada[30]，图9。(b) $\tau = 1/\rho$: 相对于麦克斯韦分子直接模拟蒙特卡罗法的厚度 [28]，，在$\ln M$中插值；色带：读数误差。(c) $\sigma/(\rho T)$ 的最大值随 [47] (圆圈) 和 [49] (方块；补充材料第 S12.3 节) 变化。(d) 氮气在 [62] 的马赫数 7.0 条件下（符号）；点划线：R 模型，采用 $Z(T)$ [59]；点线：轨迹直接模拟蒙特卡罗法 [64]。马赫数 15 时的 Shakhov 网络未通过测试 (a)，故未绘出。

氮气。采用各实验的长度单位（补充材料第 S12.6 节），并将每个剖面拟合至 $0.17\,L^*$ 后平移 0.13，所得密度与实验相符：相对于$n^* = (\rho - \rho_1)/(\rho_2 - \rho_1)$的均方根差异，对于 Alsmeyer 的马赫数 10 激波管剖面为 0.016，对于 Robben 和 Talbot 的自由射流激波为 0.03 至 0.04（ [62] $T_1 \approx 28$ 和 9 K），与轨迹直接模拟蒙特卡罗法 [64] 及采用温度相关碰撞数的 R 模型 [59]的结果相当。转动升温则未能再现：在马赫数 7 和 12 至 15 时，转动温度分别领先密度 1.44 和 $1.6\,L^*$，$L^* = \mu(T^*)/(\rho_1 u_1)$（图27d）；而马赫数 7.0 和 12.9 时，根据测得的布居数，领先量分别为 2.31 和 $2.51\,L^*$；轨迹直接模拟蒙特卡罗法中为 2.4 至 $2.9\,L^*$，R 模型中为 2.0 和 $2.45\,L^*$。由于测得的领先量取决于提取方法（马赫数 7 时为 1.9 至 $2.7\,L^*$），模型的领先量约低 24% 至 47%。这归因于恒定的 Z，即 6.7 的转动碰撞数（第 2.1 节）；分子动力学在 1000 至 2000 K 时得到这一数值，但在这些激波开始弛豫时的 100 K 或更低温度下并非如此（100 K 时为 3.2 [65]）；在 $T_1 = 300$K 时，同一模型采用 $Z = 2.226$ [58] 后，结果更接近直接模拟蒙特卡罗法和分子动力学。远离上游处，该模型也使气体过早升温（第 6.7 节）。

因此，这些网络能够复现其方程的独立解，而与实验结果的差异源于模型；我们没有运行采用温度相关Z的氮气模型来检验这一归因。测得的分布函数 [22, 23]显示出与我们的结果相同的特征，但定量检验需要实验马赫数以及

气体（补充章节 S12.5）。

9. 讨论

9.1. 成本

成本最好通过每个配点的工作量进行比较，因为这与硬件无关。弛豫模型需要大约 50 个速度节点，以及由三个或四个矩构成的目标。玻尔兹曼残差在 48^3 个节点（马赫数2和3）或 64^3 个节点（马赫数5）上需要多出两千至五千倍的节点，并且对每个节点都要对数百个方向求和；这些方向通过每个配点上 $2M_\theta M_\varphi + 2$ 立方体的变换获得：马赫数2时为258个，马赫数 3时为578个，马赫数5时为1026个；马赫数8和10的双尺度节点包含50万个节点和258次变换。这就是为什么在显卡上玻尔兹曼结果只能达到马赫数10，而弛豫模型在一个处理器核心上可达到马赫数 15至70。表14 中的墙钟时间仅供参考，因为各行所使用的硬件不同（每次迭代的时间见补充材料第S11.1节）。稠密拟牛顿法需要存储一个大小等于参数向量的方阵（单原子激波网络的7834个参数占0.49 GB），这也是保持网络规模较小的原因之一。

网络的成本高于参考求解器：求解一个激波的 DVM 解需要几分钟，而马赫数70时需要数小时；网络则需要数小时。本研究的目的并非追求速度。研究表明，仅根据方程训练、无需数据的网络，能够达到表 2、6 和12 中强激波问题的精度要求，并揭示了网络所需的构成要素，以及如何在没有参考值的情况下确定每个解的有效范围。第 9.2 节将讨论可微、无网格表示的优势；此处展示了其中一种用途，即以马赫数作为输入的网络（第 6.8 节）。

9.2. 网络解提供了什么

离散速度解也包含分布函数，形式为位置和速度网格上的一张表；蒙特卡罗模拟则以样本的形式包含该分布函数。网络的独特之处在于其解的表示形式，而这一形式有四项后果，本文的结果为此提供了支持。

该解是位置和速度的闭式函数，(18)，对于约化方程，它由约八千个数字定义；对于玻尔兹曼方程，则由 15177 个数字定义（文件大小分别为 67 和 129 千字节）。它可以在任意点求值并进行精确微分，因此，动理学方程的每一项以及由此得到的残差，都可以在未用于求得该解的点上计算。第 3.7 节的测试 (b) 在 1523 个测试点上进行了这项检验；在表 2、5、6 和 8中通过测试的运行里，残差范数为训练点处取值的 0.94 至 1.03 倍。本文数据中还将提供相应参数，读者可据此在自行选择的点上重复检验。表格只能通过插值来检验；作为比较，马赫数 70 激波的参考数据是一张表，列出三个分布函数各自对应的 134001 个位置和 2663 个速度，约 10^9 个数字。

任意阶数的矩都可以在任意速度规则上形成。测试（c）采用了这一点：在更精细且更宽的规则上，同一表格中各次运行的最高四阶场变化幅度至多为其尺度的 3.1×10^{-4}，而在马赫数8和10的玻尔兹曼阶段，变化幅度至多为 1.3×10^{-5}。

该函数不存在统计噪声，这对于玻尔兹曼方程的分布尾部和高阶矩十分重要。直接模拟蒙特卡罗参考结果使用了24至48个系综，其标准误差约为 10^{-4} 马赫数5处各场尺度的4.2，并将分布表示为

表 14：记录的墙钟时间，仅供参考。“单核心”指集群中的一个处理器核心，“笔记本电脑”指一台笔记本电脑的一个线程（同时还有其他作业在运行），A100 指一张 NVIDIA A100 显卡。对于马赫数 5 的玻尔兹曼阶段，由于集群九次抢占了该作业，所列时间为其十次分配任务的总和（补充表 S13）。最后三行是参考求解器；未记录马赫数 20 和 50 时的 DVM 时间，以及马赫数 5 时的直接模拟蒙特卡罗时间。这里只列出了报告的运行：不包括失败和开发阶段的尝试（例如表3 中马赫数 20 时的 Shakhov 尝试，以及氮气权重的搜索），也不包括每个玻尔兹曼阶段之前的 Shakhov 阶段。

计算	参数	硬件	Time
BGK激波 ，从头开始计算马赫数 5	7834	一个核心	2.1 小时
BGK激波 ，每增加一个马赫数，直至 20	7834	一个核心	0.9 至 1.3 小时
BGK激波 ，总计马赫数5至20	7834	一个核心	8.6小时
BGK激波 ，总计马赫数20至50	7834	一个核心	5.2小时
BGK激波，马赫数20至70，权重（32），评估已包括	7834	一个核心	约14小时
BGK激波，马赫数70到100，权重（32），包含评估	7834	一个核心	9.0 小时
Shakhov激波，马赫数 12 到 15；15 到 20（第5.5节）	7834	一个核心	3.2 小时；3.4 小时
Shakhov激波 , 从马赫数5延拓至15	7834	一个核心	7.1 小时
Shakhov激波，马赫数20，$800 + 4000$ 次迭代，不含最终阶段	7834	一个核心	4.6 小时
氮气激波，马赫数5及其所有阶段	7981	笔记本电脑	2.7 小时
氮气激波，马赫数8；马赫数 12	7981	笔记本电脑	0.7 小时；0.9 小时
氮气激波，马赫数 15	7981	一个核心	1 h
玻尔兹曼阶段，马赫数2	7637	A100	1.9 小时
玻尔兹曼阶段，马赫数 3	7637	A100	2.4 小时和 6.9 小时
玻尔兹曼阶段，马赫数5	7637	A100	29.7 小时
双尺度节点上的 Shakhov，马赫数8；马赫数10	15 177	A100	3.9 小时；2.9 小时
玻尔兹曼阶段，马赫数8（800 次迭代）	15 177	A100	21.9 小时
玻尔兹曼阶段，马赫数10（800 次迭代，恢复于中断)	15 177	A100	未记录
离散速度法、Shakhov激波、马赫数 3		一个核心	每次运行不到 1 分钟
离散速度法，BGK激波，马赫数70，四个网格至 $\Delta x = 0.025$		一个核心	2.5 小时
直接模拟蒙特卡罗，硬球，马赫数 3		48 个成员	47 个核心小时

直方图；网络则在六个数量级范围内平滑地给出该分布（图24）。没有噪声并不意味着没有误差：网络的误差是系统性的，不带有误差条；其中有两类误差——高马赫数下弛豫模型的四阶矩，以及玻尔兹曼网络的远上游温度——只有通过与参考值比较才被发现。

最后，这种形式相对于物理模型给出了该解：因子 $1 + \chi \sinh N_\theta$ 表示分布函数偏离由两个末态麦克斯韦分布构成的混合物的程度，这正是 Mott-Smith 的假设 [16], ，适用于每个位置和速度（图 6）。

这些性质的准确度和成本如表中所述。网络与离散速度解之间的差异为 10^{-5} 几个百分比，其中单原子解已收敛至 4×10^{-8} 或更高准确度；对于马赫数5的硬球情况，其与直接模拟蒙特卡罗之间的差异，是直接模拟蒙特卡罗在将网格和时间步减半时变化量的1到2倍；其中一部分，即前驱区差异和远上游温度超额，属于网络。成本更高：在完成所有较低马赫数后，BGK延拓从马赫数50到马赫数70的一步计算耗费了单个核心4.5小时，而离散速度解耗费2.5小时

表15：本研究中遇到的失效模式：症状和情形、在没有参考值的情况下显示该失效模式的指标、原因和补救措施，以及对此进行描述的章节。补救措施是在表1 表明有参考值可用的情况下选定的。更完整的说明见补充章节S3。

症状（情形）	无参考值的指标	原因；补救措施	章节
激波在两者之间坍缩	$e_F = 0.028$ 至 0.25； $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$ 在测试点处其训练值的 500 倍	层欠采样；激波层点，延拓	6.5
配置点（氮气、马赫数 7、8、从头开始）			
入流处的边界层（Shakhov、双尺度节点、马赫数 10）	入流处的最大通量误差；$T - 1 = 0.70$ 距其五个单位	计算域截断了上游运动分子； $L = 15M$	7.4
Adam 远离解（氮气，马赫数8，12）	$e_F = 3.7 \times 10^{-2}$	强激波的 Adam；拟牛顿法延拓	6.6
线搜索失败（玻尔兹曼，马赫数 3，第一次运行）	方向导数小五倍比预测值	重新计算未包含其导数的量；对其求导	7.2
尾项失稳（氮气，马赫数5、7）	尾项占损失函数的90%，保持远上游	少量高温分子占主导； $\lambda_T = 0.1$	6.4
保持被动分布的损失函数（氮气，马赫数7）	l 保持 $\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$的82%	l 的残差过于敏感； $a_l = (T_1/T_2)^2$	6.4
单向带符号的转动能误差（氮气，马赫数8）	残差的 P_7 阶矩	矩采用较小权重；最终阶段	6.4
前驱区中的通量误差（Shakhov，马赫数20）	$e_F = 2.1 \times 10^{-3}$，前方67个长度	束流处的求积； $\Delta v = 0.25$	5.2
未完成的优化（Shakhov，马赫数20，B；通过测试）	损失函数下降；应力和热流平衡偏差为 1.5×10^{-2}	迭代次数不足；还需 4000 次	5.2
算子的损失下限（玻尔兹曼方程，马赫数5，均匀立方体）	损失函数停滞， $e_F = 4.9 \times 10^{-2}$；$Q(\mathcal{M}_1) \neq 0$	用于束流的粗立方体，方向较少；分束，双尺度节点	7.3
四阶矩错误	l 占 g 中该部分的 1.7 个百分比	权重 l 太小；（32）	5.4
激波后方（BGK、马赫数50，70；通过测试）	$\mathcal{L}_{\mathrm{rel}}$ 马赫数50		
热流和厚度错误（Shakhov，马赫数 30 至 50；通过测试）	热流平衡偏差为 0.03 至 0.22	未找到；无	5.5

马赫数70激波在其四个网格上的解，而马赫数8的玻尔兹曼阶段在其Shakhov阶段之后耗费了图形处理器21.9小时（表 14）。

9.3. 失效模式

表 15 按原因归纳了各种失效。配点、计算域和速度节点必须符合解的物理尺度，而测试点处的残差则用于检验。拟牛顿法需要固定函数的精确梯度。损失函数的权重决定了失稳的优化器会将精力放在哪里；通过按区域、分布函数和矩分解损失函数，定位了每次失稳，定位时无需参考值，但选择补救措施时参考值可用。此外，速度求积或离散碰撞算子必须能够解析冷束。每种失效都有一个无需参考值的指标；对于马赫数20下未完成的 Shakhov 运行、BGK模型的四阶矩，以及马赫数20以上的 Shakhov 运行，只有在比较显示运行结果有误后才读取该指标（第 5.2、5.4 和5.5 节），而最后一种情况的原因尚不清楚。若干补救措施（激波层配点、计算域长度、束流处理）也适用于其他通过最小化残差进行求解的动理学求解器。

9.4. 局限性与开放性问题

验收测试是必要条件，但并非充分条件。一次马赫数20的Shakhov运行通过了这些测试，但其结果与离散速度法相差46%，见 Δ；在该模型的剖面上评估其精确应力平衡和热流平衡时，残差均高于 10^{-2}，这表明可将它们作为进一步的测试。

马赫数 30 至 50 时的Shakhov运行是第二种情形：无论采用被动分布的哪种权重，它们都通过了三项测试；热流与离散速度法相差4%至18%（盲测中相差16%），热流平衡残差为0.03至0.22，而第二次BGK延拓中，采用权重(4.1×10^{-3} 或更小的权重时，见32)，可延拓至马赫数100；马赫数 15 和 20 时的Shakhov运行中， 1.7×10^{-3} 或更小。马赫数20以上的Shakhov模型是当前方法的极限，其原因尚未查明（第5.5节）。该方法的大部分内容是在参考值可用的情况下开发的（表1），因此，氮气在马赫数5至8时的结果并非预测。独立检验包括氮气在马赫数10和15时的测试（第6.3节），以及马赫数50、60和采用第一种权重时马赫数100的盲测BGK预测（第5.4节）；采用权重(32)时延拓至马赫数100的BGK结果（包括精确的马赫数100解），以及马赫数10时的玻尔兹曼结果，都不是盲测结果。

四阶矩是最不确定的场。大多数结果来自单次运行；在马赫数20下，通过测试的基准变更使 R_{xx} 和 Δ 变化了5%至80%（第 5.2 节）；在恒定碰撞时间下，同一程序通过了测试，但在马赫数20下， R_{xx} 和 Δ 分别偏差18%和29%（第5.3节）；在马赫数50、70和100下，使用权重 $a_l=(T_1/T_2)^2$ 时，它们分别偏差14%和21%、39%和60%、53%和81%（第 5.4 节）。使用该权重时，马赫数12及以上的四阶项存在最高约两倍的不确定性；在马赫数20下，使用第二个随机种子所得结果相差1.8倍。对于BGK模型，原因在于被动分布的权重较小：采用权重（32），并将每步迭代次数从1100提高到2100后， R_{xx} 和Δ 在马赫数70以内的偏差不超过3.2%，在马赫数100下不超过7.1%；这些比较不是盲测，且只使用了一个随机种子；两项变更在马赫数20下被分别考察，并且在使用一个随机种子的盲测中于马赫数60下被分别考察（第 5.4 节）。该规则未应用于马赫数20及以下的Shakhov运行，也未应用于氮气；对于氮气，其四阶项仍采用此前的权重。在马赫数20下，BGK网络测得f 为负值（节点的0.89%，第3.3节）；事后发现，马赫数8以内的玻尔兹曼网络也存在这种情况，其中负的 f 进入 $Q(f,f)$：最负值为同一位置处最大 f 的 7×10^{-8}，负值部分至多为局部密度的 3×10^{-6}（补充材料S10.3节）。对于在（v_x， v_r）网格上评估的马赫数10网络，这两个数分别为 9.5×10^{-8} 和 3.0×10^{-6}。远上游温度的微弱升高在相对意义上无法分辨（第 6.7 节）。这些模型本身也存在局限，网络继承了这些局限：在恒定碰撞数下，氮气模型将冷激波的转动升温位置放置得过于接近密度，距离约近了三分之一；而Shakhov模型将麦克斯韦分子的温度超调高估了2至7倍（第8节）。

对于玻尔兹曼方程，结果截至马赫数10（第7.5节）。从马赫数5开始的网络保留了 10^{-3} 至 $3.5\times10^{-3}\,T_1$ 的远上游温度超额，而直接模拟蒙特卡罗并不存在这种现象；在密度中点上游六个平均自由程处，其向上游运动的分子所占比例比直接模拟蒙特卡罗低1个百分点（马赫数8）、13个百分点（马赫数10）以及超过四分之一（马赫数5）（第7.6节）；离散算子的其余要点列于补充材料第S11.2节。正形式 $B\exp(\chi N_\theta)$在马赫数20的BGK模型中进行了测试，其中包含一个将残差除以 $|f|$的项。该形式通过了测试且没有负值，但在方程迭代次数相同、并对其初始因子进行拟合后，其精度低于带符号形式（在 R_{xx} 和 Δ 中分别为3.8和5.8，而不是4.3和6.6；在 m_{xxx}中为0.090个百分点，而不是0.14），因此保留带符号形式。最后，激波在空间上是一维的，而该形式依赖于分子来源位置的解析知识，即两个端态。壁面约束流动中，分子沿直线射线从可见壁面而来，这类流动不在本文讨论范围内，将另文报道。没有这种

结构、非定常流动，或壁面来源不明确的几何构型，也不属于本文所展示的范围。

10. 结论

通过最小化仅包含动理学方程、其解析边界数据以及由此导出的守恒关系的损失函数来训练的神经网络，能够求解强正激波，而且其解在宏观场 ρ、u 和 T之外仍保持准确。在马赫数 20 时，仅凭宏观场无法充分表征这类解：这些宏观场与离散速度解的差异在 0.1 百分比以内，而四阶矩的差异则达到几个百分点。因此，评估任何此类动理学求解器时，都应将三阶和四阶矩纳入考量。

分布函数的形式应体现已知的解析信息：端态和精确流入。此处留给网络的修正项带符号且无界；使用相同程序测试至马赫数 12 时，有界修正项也能被接受，但其四阶矩的准确度较低，因此，这种选择有依据，但并非必要。损失函数必须覆盖承载高阶矩的稀少高温分子；在进行的一项消融实验中，通量恒定性是移除后会导致解失效的那一项。配点必须能够分辨激波层；否则激波会在两个配点之间塌缩，这一点可由无参考测试揭示。在这些计算中，准确度是在拟牛顿阶段并通过马赫数延拓达到的，而非通过 Adam 达到的。

借助这些要素，仅用一个处理器核心且参数少于八千个，网络本身就将 BGK 激波求解到了马赫数100。在马赫数50时，在读取参考值之前保存的一次预测中，宏观场的误差在0.1 百分比以内，四阶矩的误差约为20 百分比；这一误差被追溯到损失函数中被动约化分布函数的权重。将该权重设为与下游温度成反比（在马赫数20时测试），并将每步迭代次数从1100提高到2100后，在非盲测的比较中，四阶矩在马赫数70以内的误差不超过3.2 百分比，在马赫数100时不超过7.1 百分比；马赫数60的盲测表明，增益中约60 百分比来自权重调整，40 百分比来自更长时间的优化。采用预先固定的设置，网络将 Shakhov激波求解到了马赫数20。马赫数20以上，Shakhov解超出了有效范围，尽管通过了三项验收测试（马赫数30至50时热流与参考值相差4至18 百分比；马赫数50的盲测中相差16 百分比）；无需参考值的精确热流平衡残差标示出这一边界：该残差至少是准确运行中最大值的12倍。氮气模型求解到了马赫数 15；在马赫数10的一项预先固定的测试中，有一半的场超出了根据马赫数8和12预期的误差范围。对于硬球玻尔兹曼方程，马赫数2、5、8和10时的解均通过所有测试；在马赫数5、8和10时，报告的八个场（包括两个四阶矩）相对于直接模拟蒙特卡罗的相对 L^2 范数误差均在0.4 百分比以内（马赫数8时为0.19 百分比，该比较仅进行了一次；马赫数10的比较不是盲测）。更强激波的求解受到三维速度空间中碰撞积分成本的限制。

这些求解器所需时间以小时计，而离散速度代码只需几分钟到几小时。它们的价值在于提供分布函数的可微、无网格表示：一种可在任意点计算其残差、并可在任意速度规则上形成其矩的闭式函数（第 9.2 节）；本文还展示了其另一种用途，即构建一个以马赫数为输入的网络，但准确度有所牺牲。损失函数的若干权重是在有参考值的情况下选定的（表 1）。马赫数20以上的Shakhov模型、Shakhov模型的四阶矩以及

氮气模型、远上游温升、高马赫数下的玻尔兹曼方程以及多维流动仍有待研究（第 9 节）。

竞争性利益声明

作者声明，不存在可能影响本文所报告工作的竞争性经济利益或个人关系。

数据可用性

本研究结果所依据的数据可根据合理请求向作者索取。文章验收后，训练网络、参考解以及用于生成图表的脚本将在 GitHub代码仓库中公开。

致谢

计算工作在 Unity研究计算平台上完成；作者感谢 Unity团队提供计算资源。作者感谢马萨诸塞大学阿默斯特分校机械与工业工程系提供经费支持。

稿件撰写过程中使用生成式人工智能和人工智能辅助技术的声明

在准备本文的过程中，作者使用 Claude（Anthropic）协助开发和检查计算机代码，以及制作图表和撰写文本。使用该工具后，作者根据需要审阅并编辑了内容，并对已发表文章的内容承担全部责任。

补充材料

与本文相关的补充材料包含五段视频，以及更多关于激波计算的图表、失败情况说明、每次运行的设置和时间、离散速度参考求解器、使用蒙特卡罗参考结果评估硬球碰撞积分的内容，以及与已发表的解和测量结果进行比较所用的数据、单位和表格。补充视频1、3和5将图 3、图 26 和图 11中的数据制作成动画；视频2呈现补充图 S3中的数据；视频4展示马赫数5时的氮气激波；相关说明见补充材料第 S7节。公开视频副本位于 https://www.youtube.com/watch?v=9hSQn6-cPD8（视频1，马赫数20时的BGK激波，慢动作版本）、https://www.youtube.com/watch?v=Zow8LDTRQ5M （视频2，马赫数5时的三种碰撞模型）、https://www.youtube.com/watch?v=pMRke3ZgKbI（视频3，马赫数8时的三种碰撞模型）、https://www.youtube.com/watch?v=VJcGbaIG-d0 （视频4，马赫数5时的氮气）以及https://www.youtube.com/watch?v=_u03dhZOFhA（视频5，马赫数50时的BGK激波，离散速度解与网络同时展示）。

附录 A. 约化方程与矩

本附录给出了约化方程（12）的目标值，以及网络代码和参考求解器中所采用的矩公式。全文中，$c = v - u$和

$$M_1(\Theta) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi\Theta}} \exp\Big(-\frac{c^2}{2\Theta}\Big) \tag{A.1}$$

是密度为 ρ、速度为 u 、温度为 Θ 的麦克斯韦分布在横向平面上的积分。下文使用的横向麦克斯韦分布的矩为 $\langle r^2\rangle = 2\Theta$、 $\langle r^4\rangle = 8\Theta^2$ 和$\langle r^6\rangle = 48\Theta^3$。

***BGK* 和 *Shakhov* 模型。**给定 $a = (1-\mathrm{Pr})\; q\, c/(5\rho T^3)$，对（6）积分可得$g$、 k 和 l的目标值，

$$\begin{gathered} g^* = M_1(T)\big[1 + a\,(c^2 - 3T)\big], \qquad k^* = 2T\, M_1(T)\big[1 + a\,(c^2 - T)\big], \\ l^* = 8T^2 M_1(T)\big[1 + a\,(c^2 + T)\big], \end{gathered} \tag{A.2}$$

以及 $\tau = T^{\omega-1}/\rho$ ，其中 $\omega = 1$。$\mathbf{Pr} = 1$ 给出 BGK 模型。

氮气模型。给定 $M_t = M_1(T_{\mathrm{tr}})$， $M_r = M_1(T)$， $T = (3T_{\mathrm{tr}} + 2T_{\mathrm{rot}})/5$， $a_t = q_{\mathrm{tr}}\, c/(15\rho T_{\mathrm{tr}}^3)$ 以及 $a_r = \omega_0\, q_{\mathrm{tr}}\, c/(15\rho T^3)$，对（10）积分可得

$$\begin{aligned} g_t &= M_t\big[1 + a_t(c^2 - 3T_{\mathrm{tr}})\big], & g_r &= M_r\big[1 + a_r(c^2 - 3T)\big], \\ k_t &= 2T_{\mathrm{tr}} M_t\big[1 + a_t(c^2 - T_{\mathrm{tr}})\big], & k_r &= 2T\, M_r\big[1 + a_r(c^2 - T)\big], \\ l_t &= 8T_{\mathrm{tr}}^2 M_t\big[1 + a_t(c^2 + T_{\mathrm{tr}})\big], & l_r &= 8T^2 M_r\big[1 + a_r(c^2 + T)\big], \\ h_t &= T_{\mathrm{rot}}\, g_t + (1-\delta_{\mathrm{R}})\frac{q_{\mathrm{rot}}\, c}{\rho T_{\mathrm{tr}}} M_t, & h_r &= T\, g_r + \omega_1(1-\delta_{\mathrm{R}})\frac{q_{\mathrm{rot}}\, c}{\rho T} M_r, \end{aligned} \tag{A.3}$$

且每个约化分布函数的目标为

$$\varphi^* = \varphi_t + \frac{\varphi_r - \varphi_t}{Z}, \qquad \varphi \in \{g, k, h, l\}, \qquad \tau = \frac{T_{\mathrm{tr}}^{\omega-1}}{\rho}. \tag{A.4}$$

端态和包络。 状态 (ρ, u, T) 的平衡分布函数（它们用于两个 Rankine–Hugoniot 状态的基准 (19)）为 $(g, k, h, l) = M_1(T)\,(1,\; 2T,\; T,\; 8T^2)$。包络 (22) 的局部部分为 $M^{\mathrm{loc}} = M_1(T_{\mathrm{tr}})\,(1,\; 2T_{\mathrm{tr}},\; T_{\mathrm{rot}},\; 8T^2{}_{\mathrm{tr}})$，其中使用网络当前的 ρ, u, T_{tr}和T_{rot}。对于单原子气体， h 不存在，且 $T_{\mathrm{tr}} = T$。

矩。 所有关于 v 的积分均使用第 3.5 节的速度规则计算。对于 $e = c^2 g + k$,

$$\begin{gathered} \rho = \int g\,\mathrm{d}v, \qquad \rho u = \int v\, g\,\mathrm{d}v, \qquad 3\rho T_{\mathrm{tr}} = \int e\,\mathrm{d}v, \qquad \rho T_{\mathrm{rot}} = \int h\,\mathrm{d}v, \\ q_{\mathrm{tr}} = \frac{1}{2}\int c\, e\,\mathrm{d}v, \qquad q_{\mathrm{rot}} = \int c\, h\,\mathrm{d}v, \qquad \sigma = \int\Big(c^2 g - \frac{e}{3}\Big)\mathrm{d}v, \end{gathered} \tag{A.5}$$

以及三阶和四阶矩（15）为

$$\begin{gathered} m_{xxx} = \int c^3 g\,\mathrm{d}v - \frac{6}{5}\, q_{\mathrm{tr}}, \qquad \Delta = \int\big(c^4 g + 2c^2 k + l\big)\,\mathrm{d}v - 15\rho T_{\mathrm{tr}}^2, \\ R_{xx} = \int\Big(\frac{2}{3}c^4 g + \frac{1}{3}c^2 k - \frac{1}{3}l\Big)\mathrm{d}v - 7T_{\mathrm{tr}}\sigma. \end{gathered} \tag{A.6}$$

通　　式（26）中的质量、动量和能量守恒量及其上游值为

$$J_1 = \int v\, g \,\mathrm{d}v, \qquad J_2 = \int v^2 g \,\mathrm{d}v, \qquad J_3 = \int v\Big[\frac{1}{2}\big(v^2 g + k\big) + h\Big]\mathrm{d}v,$$
$$\big(J_1^{\mathrm{RH}}, J_2^{\mathrm{RH}}, J_3^{\mathrm{RH}}\big) = \Big(u_1,\ u_1^2 + 1,\ u_1\Big[\frac{u_1^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\Big]\Big), \tag{A.7}$$

对于单原子气体使用 $\gamma/(\gamma-1) = 5/2$，对于氮气使用 $7/2$。

残差的矩。令 $\mathcal{R}_g$、$\mathcal{R}_k$、$\mathcal{R}_h$ 为（21）中 g、k、h 和 $e_{\mathcal{R}} = c^2\mathcal{R}_g + \mathcal{R}_k$的残差。（$P_k$ 27）中的量为

$$P_1 = \frac{\int \mathcal{R}_g \,\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^{1/2}}, \qquad P_2 = \frac{\int v\, \mathcal{R}_g \,\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^{1/2} u_1}, \qquad P_3 = \frac{\int \big[\frac{1}{2}(v^2\mathcal{R}_g + \mathcal{R}_k) + \mathcal{R}_h\big]\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^{1/2} u_1^2},$$
$$P_4 = \frac{\int \big(c^2\mathcal{R}_g - e_{\mathcal{R}}/3\big)\,\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^{3/2}}, \qquad P_5 = \frac{\int c\, e_{\mathcal{R}} \,\mathrm{d}v}{2\rho_2 T_2^2}, \tag{A.8}$$
$$P_6 = \frac{\int c\, \mathcal{R}_h \,\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^2}, \qquad P_7 = \frac{\int \mathcal{R}_h \,\mathrm{d}v}{\rho_2 T_2^{3/2}}.$$

P_1、P_2 和 P_3 分别是质量、动量和能量的平衡，即三个通量的导数；P_4 和 P_5 分别是应力和平动热流的平衡，而 P_6和 P_7则分别是仅对氮气存在的转动热流和转动能的平衡，$\mathrm{d}(\rho u T_{\mathrm{rot}} + q_{\mathrm{rot}})/\mathrm{d}x = \rho\,(T - T_{\mathrm{rot}})/(Z\tau)$。对于单原子气体 $\mathcal{R}_h = 0$ 和 $k = 1$、……、5。式（c（A.8）中的热运动速度使用网络当前的速度，损失函数的梯度也通过该速度计算。该实现的检查结果列于补充材料第 S8.14节。

附录 B. 实现与设置

所有网络代码均使用双精度（64 位浮点数），在处理器和显卡上运行，并以 Python 和 PyTorch 编写。集群上的计算使用 Python 3.12.11、针对 CUDA 12.8 构建的 PyTorch 2.10.0、NumPy 2.5.2 和 SciPy 1.18.1；显卡上的各阶段则运行于 NVIDIA A100 显卡上。图表使用 Matplotlib 3.11.2 绘制。自缩放 Broyden 方法（包括其保护机制和线搜索）的更新、Adam 和 Levenberg–Marquardt 阶段，以及三维速度节点上的损失函数，均在补充材料第S8.7节至第节中给出。每次运行的设置详见补充材料第S8.10 节和第S8.11节；各阶段的设置和墙钟时间见补充表S6至S8。

附录 C. 硬球计算的单位和碰撞频率

上游密度、上游温度和气体常数均为 1，速度以 $\sqrt{RT_1}$ 为单位，长度则以上游平均自由程 $\lambda_1 = 1/(\sqrt{2}\,\pi d^2 n_1)$为单位，其中 d为分子直径，n_1 为上游数密度。一维空间中的稳态方程为 $v\,\partial f/\partial x = Q(f,\ f)$，其中碰撞积分为（3），$\boldsymbol{v} = (v,\ v_y,\ v_z)$。硬球散射是各向同性的，总截面为 πd^2，而 $1/\sqrt{2}$（3）中的因子为 $\pi d^2 n_1 \lambda_1$。该积分是增益项与损失函数项之差，$Q = Q^+ - f\,\nu[f]$，其中碰撞频率为

$$\nu[f](\boldsymbol{v}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{v} - \boldsymbol{w}|\, f(\boldsymbol{w})\,\mathrm{d}\boldsymbol{w}. \tag{C.1}$$

采用第2.2节中的硬球黏度，弛豫模型的长度单位为 $\ell_0 = 0.795882\,\lambda_1$。弛豫模型的解若以 $\tau = 1/\rho$ 开始玻尔兹曼阶段，则乘以该因子即可映射到硬球单位：网络接收的位置以及基准的宽度w （19）会进行缩放，使该阶段从以平均自由程表示的同一剖面开始。

积分采用 Carleman 形式，并在由 N_v^3 个节点构成的周期立方体上，通过快速谱方法 [37] 进行计算 $M_\theta \times M_\varphi$：对于半球上的每个方向，对 f 进行线积分和平面积分，并通过对立方体进行傅里叶逆变换获得结果，随后在节点处将二者相乘。不进行守恒修正；守恒性由损失函数施加。相对于参数的梯度通过反向模式自动微分，经过所有步骤计算得到。在马赫数 3 和 5 时，将冷束从中分离出来，表示为上游麦克斯韦分布乘以网络得到的多项式；其碰撞通过闭式表达式或在精细辅助立方体上进行计算；在双尺度节点上，束流与热气体之间碰撞的增益以 Radon 形式表示。DSMC参考结果采用的计算域为 $-30 \le x \le 30$、$-30 \le x \le 25$和 $-30 \le x \le 20$ ，分别对应马赫数 2 、 3 和 5 ； 以及 $-30 \le x \le 20$ ，对应马赫数 8 和 10。离散算子、相关测试以及 DSMC参考结果详见补充材料第 S6节。

参考值

[1] C. Cercignani，《玻尔兹曼方程及其应用》，Springer，1988年。doi:10.1007/978-1-4612-1039-9。URL https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4612-1039-9[2] Y. Sone，《分子气体动力学：理论、技术与应用》，Birkhäuser，2007年。doi:10.1007/978-0-8176-4573-1。URL https://link.springer.com/book/10.1007/978-0-8176-4573-1[3] G. A. Bird，《分子气体动力学与气体流动的直接模拟》，Clarendon Press，牛津，1994年。URL https://academic.oup.com/book/54839[4] H. Grad，论稀薄气体的动力学理论，《纯粹与应用数学通讯》2 (4) (1949) 331–407。doi:10.1002/cpa.3160020403。URL https://doi.org/10.1002/cpa.3160020403[5] H. Struchtrup、M. Torrilhon，Grad的13矩方程的正则化：推导与线性分析，《流体物理学》15 (9) (2003) 2668–2680。doi:10.1063/1.1597472。URL https://doi.org/10.1063/1.1597472[6] H. Struchtrup，《稀薄气体流动的宏观输运方程》，Springer，2005年。doi:10.1007/3-540-32386-4。URL https://link.springer.com/book/10.1007/3-540-32386-4[7] X.-J. Gu、D. R. Emerson，用于捕捉过渡流态非平衡现象的高阶矩方法，《流体力学杂志》636 (2009) 177–216。doi:10.1017/S002211200900768X。URL https://doi.org/10.1017/S002211200900768X

[8] E. Roohi，针对动理学激波的物理信息神经网络（PINN）：有无矩监督时低阶和高阶矩的准确度均能同时得到保证，版本2，2026年11月13日（2026年）。arXiv:2605.29211，doi:10.48550/arXiv.2605.29211。[9] B. Riemann，《有限振幅平面空气波的传播》，哥廷根皇家科学学会论文集8 (1860) 43– 66。[10] W. J. M. Rankine，论有限纵向扰动波的热力学理论，伦敦皇家学会哲学汇刊160 (1870) 277–288。doi:10.1098/rstl.1870.0015。[11] Lord Rayleigh，《有限振幅空中平面波》，伦敦皇家学会会刊。A辑84 (570) (1910) 247–284。doi:10.1098/rspa.1910.0075。[12] G. I. Taylor，气体发生不连续运动的必要条件，伦敦皇家学会会刊。A辑84 (571) (1910) 371–377。doi:10.1098/rspa.1910. 0081。[13] R. Becker，《激波与爆轰》，物理学杂志8 (1) (1922) 321–362。doi: 10.1007/BF01329605。[14] L. H. Thomas，关于Becker理论中激波前沿的注记，化学物理学杂志12 (11) (1944年) 449–453。doi:10.1063/1.1723889。[15] D. Gilbarg、D. Paolucci，流体连续介质理论中的激波结构，理性力学与分析杂志2 (4) (1953) 617–642。doi:10.1512/iumj. 1953.2.52031。[16] H. M. Mott-Smith，激波的玻尔兹曼方程解，Physical Review 82 (6) (1951) 885–892。doi:10.1103/PhysRev.82.885。[17] H. Grad，稳态平面激波的剖面，《纯粹与应用数学通讯》5 (3) (1952) 257–300。doi:10.1002/cpa.3160050304。[18] L. Mieussens，稀薄气体动力学BGK方程的离散速度模型与隐式格式，应用科学中的数学模型与方法10 (8) (2000) 1121– 1149。doi:10.1142/S0218202500000562。URL https://doi.org/10.1142/S0218202500000562 [19] K. Xu、J.-C. Huang，适用于连续介质流动和稀薄流动的统一气体动理论格式，《计算物理学杂志》229 (20) (2010) 7747–7764。doi:10.1016/j.jcp.2010.06.032。URL https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.06.032[20] F. G. Tcheremissine，离散纵标近似下玻尔兹曼碰撞积分的守恒评估，计算与应用数学35 (1–2) (1998) 215–221。doi:10.1016/S0898-1221(97)00269-1。URL https://doi.org/10.1016/S0898-1221(97)00269-1[21] S. Takata、K. Aoki、C. Cercignani，无限强激波中的速度分布函数，《流体物理学》12 (8) (2000) 2116–2127。doi:10.1063/1.870457。

[22] T. Holtz，E. P. Muntz，马赫数7的氩正激波中的分子速度分布函数，《流体物理学》26（9）（1983）2425–2436。doi:10.1063/1. 864428。[23] G. Pham-Van-Diep，D. Erwin，E. P. Muntz，超音速激波中的非平衡分子运动，《Science》245（4918）（1989年）624–626。doi:10.1126/science.245.4918. 624。[24] P. Valentini，T. E. Schwartzentruber，稀薄氩气中正激波的大规模分子动力学模拟，《流体物理学》21（2009）066101。doi:10.1063/1. 3149866。[25] G. A. Bird，强激波结构的若干方面，《流体物理学》13（5）（1970）1172–1177。doi:10.1063/1.1693047。[26] D. A. Erwin，G. C. Pham-Van-Diep，E. P. Muntz，非平衡气体流动。I：单原子气体蒙特卡罗直接模拟的详细验证，《流体物理学A：流体动力学》3（4）（1991）697–705。doi:10.1063/1.858075。[27] K. A. Fiscko，D. R. Chapman，超音速激波结构的Burnett方程、超Burnett方程与蒙特卡罗解的比较，载于：《稀薄气体动力学：理论与计算技术》，《航天与航空学进展》第118卷，AIAA，1989年，第374–395页。doi:10.2514/5.9781600865923.0374.0395。[28] F. E. Lumpkin, III，D. R. Chapman，Burnett方程对超音速真实气体流动的准确度，《热物理学与热传递杂志》6（3）（1992）419–425。doi: 10.2514/3.377。[29] M. A. Solovchuk，T. W. H. Sheu，利用双峰分布函数预测强激波结构，《Physical Review E》83（2）（2011）026301。doi:10.1103/PhysRevE. 83.026301。[30] T. Ohwada，正激波结构：硬球分子玻尔兹曼方程的直接数值分析，《流体物理学A：流体动力学》5（1）（1993）217–234。doi:10.1063/1.858777。[31] O. I. Dodulad，F. G. Tcheremissine，具有精度控制的单原子气体激波结构计算，《计算数学与数学物理学》53（6）（2013）827–844。doi:10.1134/S0965542513060055。[32] E. A. Malkov，Y. A. Bondar，A. A. Kokhanchik，S. O. Poleshkin，M. S. Ivanov，激波结构的高准确度玻尔兹曼方程确定性解，《Shock Waves》25（4）（2015年）387–397。doi:10.1007/s00193-015-0563-6。[33] L. Pareschi，B. Perthame，齐次玻尔兹曼方程的傅里叶谱方法，《输运理论与统计物理学》25（3–5）（1996）369–382。doi:10.1080/ 00411459608220707。[34] L. Pareschi，G. Russo，玻尔兹曼方程的数值解I：碰撞算子的谱精度近似，《SIAM数值分析杂志》37（4）（2000）1217–1245。doi:10.1137/S0036142998343300。

[35] A. V. Bobylev, S. Rjasanow, Fast deterministic method of solving the Boltzmann 方程ti 硬球情形下，《欧洲力学杂志：B辑/流体》18 (5) (1999) 869–887。doi:10.1016/S0997-7546(99)00121-1。[36] I. M. Gamba, S. H. Tharkabhushanam，非平衡统计态碰撞模型的谱-拉格朗日方法，《计算物理学杂志》228 (6) (2009) 2012–2036。doi:10.1016/j.jcp.2008.09.033。[37]C. Mouhot, L. Pareschi，计算玻尔兹曼碰撞算子的快速算法，Mathematics of Computation 75 (256) (2006) 1833–1852。doi:10.1090/S0025-5718-06-01874-6。[38] F. Filbet, C. Mouhot, L. Pareschi，在 $N \log_2 N$中求解玻尔兹曼方程，SIAM科学计算杂志 28 (3) (2006) 1029–1053。doi:10.1137/050625175。[39] L. Wu, C. White, T. J. Scanlon, J. M. Reese, Y. Zhang，使用快速谱方法确定性数值求解玻尔兹曼方程，《计算物理学杂志》250 (2013) 27–52。doi:10.1016/j.jcp.2013.05.003。[40] I. M. Gamba, J. R. Haack, C. D. Hauck, J. Hu，适用于一般碰撞核的玻尔兹曼碰撞算子快速谱方法，SIAM科学计算杂志 39 (4) (2017) B658–B674。doi:10.1137/16M1096001。[41] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook，气体碰撞过程模型：I. 带电和中性单组分系统中的小振幅过程，Physical Re-view 94 (3) (1954) 511–525。doi:10.1103/PhysRev.94.511。URL https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.94.511[42] E. M. Shakhov, Krook动理学弛豫方程的推广，流体动力学 3 (1968) 95–96。doi:10.1007/BF01029546。URL https://doi.org/10.1007/BF01029546[43] L. H. Holway, Jr.，动力学理论的新统计模型：构建方法，《流体物理学》9 (9) (1966) 1658–1673。doi:10.1063/1.1761920。[44] C. K. Chu，激波形成的动理学理论描述，《流体物理学》8 (1) (1965) 12–22。doi:10.1063/1.1761077。[45] J. Y. Yang, J. C. Huang，使用非线性模型玻尔兹曼方程计算稀薄流，《计算物理学杂志》120 (2) (1995) 323–339。doi:10.1006/jcph. 1995.1168。[46] H. W. Liepmann, R. Narasimha, M. T. Chahine，平面激波层的结构，The Physics of Fluids 5 (11) (1962) 1313–1324。doi:10.1063/1.1706527。[47] E. M. Shakhov，单原子气体中的激波结构，流体动力学 4 (1969) 44–47。doi:10.1007/BF01014969。[48] V. V. Aristov，强激波问题中速度空间变网格方法，苏联计算数学与数学物理 17 (4) (1977) 261–266，译自 Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. 17(4), 1081–1086。

[49] B. M. Segal, J. H. Ferziger，使用非线性模型玻尔兹曼方程研究激波结构，《流体物理学》15 (7) (1972) 1233–1247。doi:10.1063/1.1694072。[50] J.-C. Huang, K. Xu, P. Yu，适用于连续介质流和稀薄流动的统一气体动理论格式 II：多维情形，《计算物理通讯》12 (3) (2012) 662–690。doi:10.4208/cicp.030511.220911a。[51] Z. Guo, K. Xu, R. Wang，适用于所有克努森数流动的离散统一气体动理论格式：低速等温情形，Physical Review E 88 (3) (2013) 033305。doi:10.1103/ PhysRevE.88.033305。[52] G. Dimarco, L. Pareschi，动力学方程的数值方法，Acta Numerica 23 (2014) 369–520。doi:10.1017/S0962492914000063。URL https://doi.org/10.1017/S0962492914000063 [53] S. Rjasanow, W. Wagner，《玻尔兹曼方程的随机数值方法》，Springer计算数学丛书第37卷，Springer Berlin Heidelberg，2005。doi: 10.1007/3-540-27689-0。URL https://link.springer.com/book/10.1007/3-540-27689-0[54] F. Fei, H. Liu, Z. Liu, J. Zhang，激波动力学模型基准研究，AIAA Journal 58 (6) (2020) 2596–2608。doi:10.2514/1.J059029。URL https://doi.org/10.2514/1.J059029[55] E. Jun, M. Pfeiffer, L. Mieussens, M. H. Gorji，立方型与椭球型福克–普朗克动力学模型的比较研究，AIAA Journal 57 (2019)。doi:10.2514/1.J057935。[56] V. A. Rykov，具有转动自由度气体的动理学模型方程，流体动力学 10 (6) (1975) 959–966。doi:10.1007/BF01023275。[57] I. N. Larina, V. A. Rykov，具有转动自由度双原子气体的玻尔兹曼方程动力学模型，Computational Mathematics and Mathematical Physics 50 (12) (2010) 2118–2130。doi:10.1134/S0965542510120134。[58] L. Wu, C. White, T. J. Scanlon, J. M. Reese, Y. Zhang，非振动多原子气体的玻尔兹曼方程动力学模型，《流体力学杂志》763 (2015) 24–50。doi:10.1017/jfm.2014.632。[59]V. A. Rykov, V. A. Titarev, E. M. Shakhov，基于动力学模型的双原子气体激波结构，流体动力学 43 (2) (2008) 316–326。doi:10.1134/S0015462808020178。[60] S. Kosuge, K. Aoki，具有较大体黏度的多原子气体激波结构，Physical Review Fluids 3 (2) (2018) 023401。doi:10.1103/PhysRevFluids.3.023401。[61] H. Alsmeyer，通过电子束吸收测得的氩和氮激波密度剖面，《流体力学杂志》74 (3) (1976) 497–513。doi: 10.1017/S0022112076001912。[62] F. Robben, L. Talbot，氮气激波中转动分布函数的实验研究，《流体物理学》9 (4) (1966) 653–662。doi:10.1063/1.1761730。

[63] K . K$_{\text{oura,}}$ Monte Carlo direct simulation of rotational relaxation of diatomic molecul 采用经典轨迹计算：氮气激波，《流体物理学》9 (1997) 3543–3549。doi:10.1063/1.869462。[64] K. Koura，采用经典轨迹计算研究氮气激波和球形膨胀中的转动非平衡的直接模拟蒙特卡罗研究，《流体物理学》14 (2002) 1689–1695。doi:10.1063/1.1467059。[65] P. Valentini，C. Zhang，T. E. Schwartzentruber，氮气转动弛豫的分子动力学模拟：对转动碰撞数模型的启示，《流体物理学》24 (2012) 106101。doi:10.1063/1.4757119。[66] C. D. Levermore，动理学理论的矩闭合层次结构，《统计物理学杂志》83 (1996) 1021–1065。doi:10.1007/BF02179552。URL https://doi.org/10.1007/BF02179552[67] M. Torrilhon，H. Struchtrup，正则化13矩方程：激波结构计算及与Burnett模型的比较，《流体力学杂志》513 (2004) 171–198。doi:10.1017/S0022112004009917。URL https://doi.org/10.1017/S0022112004009917[68] M. Torrilhon，基于矩方程的非平衡气体流动建模，《流体力学年度评论》48 (2016) 429–458。doi:10.1146/ annurev-fluid-122414-034259。URL https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122414-034259[69] I. E. Lagaris，A. Likas，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 (5) (1998) 987–1000。doi:10.1109/72.712178。[70] M. Raissi，P. Perdikaris，G. E. Karniadakis，物理信息神经网络：用于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 (2019) 686–707。doi:10. 1016/j.jcp.2018.10.045。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118307125[71] G. E. Karniadakis，I. G. Kevrekidis，L. Lu，P. Perdikaris，S. Wang，L. Yang，物理信息机器学习，《自然评论：物理学》3 (6) (2021) 422–440。doi:10.1038/ s42254-021-00314-5。[72] L. Lu，X. Meng，Z. Mao，G. E. Karniadakis，DeepXDE：用于求解微分方程的深度学习库，《SIAM评论》63 (1) (2021) 208–228。doi:10.1137/19M1274067。[73] Z. Mao，A. D. Jagtap，G. E. Karniadakis，用于高速流动的物理信息神经网络，《应用力学与工程中的计算方法》360 (2020) 112789。doi:10.1016/j.cma.2019.112789。[74] R. Yano，用于圆柱体绕流稳态可压缩欧拉流的无数据有限体积卷积神经网络，arXiv预印本 arXiv:2603.01001 (2026)。doi:10. 48550/arXiv.2603.01001。

[75] S. Wang，Y. Teng，P. Perdikaris，理解并缓解物理信息神经网络中的梯度流病态，《SIAM科学计算杂志》43 (5) (2021) A3055–A3081。doi:10.1137/20M1318043。[76] S. Wang，X. Yu，P. Perdikaris，PINN何时以及为何训练失败：神经切线核视角，《计算物理学杂志》449 (2022) 110768。doi:10.1016/j.jcp. 2021.110768。[77] A. S. Krishnapriyan，A. Gholami，S. Zhe，R. M. Kirby，M. W. Mahoney，刻画物理信息神经网络中可能的失效模式，载于：神经信息处理系统进展（NeurIPS 2021），2021。arXiv:2109.01050，doi: 10.48550/arXiv.2109.01050。[78] P. Rathore，W. Lei，Z. Frangella，L. Lu，M. Udell，PINN训练中的挑战：损失景观视角，载于：第41届国际机器学习会议论文集（ICML 2024），2024。arXiv:2402.01868，doi:10.48550/arXiv:2402.01868。[79] L. D. McClenny，U. M. Braga-Neto，自适应物理信息神经网络，《计算物理学杂志》474 (2023) 111722。doi:10.1016/j.jcp.2022.111722。[80] S. Wang，S. Sankaran，P. Perdikaris，遵循因果关系训练物理信息神经网络，《应用力学与工程中的计算方法》421 (2024) 116813。doi:10.1016/j.cma.2024.116813。[81] C. Wu，M. Zhu，Q. Tan，Y. Kartha，L. Lu，针对物理信息神经网络的非自适应采样与基于残差的自适应采样的全面研究，《应用力学与工程中的计算方法》403 (2023) 115671。doi:10.1016/j.cma.2022. 115671。[82] N. Sukumar，A. Srivastava，在物理信息深度神经网络中利用距离函数精确施加边界条件，《应用力学与工程中的计算方法》389 (2022) 114333。doi:10.1016/j.cma.2021.114333。[83] L. Lu，R. Pestourie，W. Yao，Z. Wang，F. Verdugo，S. G. Johnson，采用硬约束进行逆向设计的物理信息神经网络，《SIAM科学计算杂志》43 (6) (2021) B1105–B1132。doi:10.1137/21M1397908。[84] D. P. Kingma，J. Ba，Adam：一种随机优化方法，载于：国际学习表征会议，2015年。URL https://arxiv.org/abs/1412.6980[85] D. C. Liu，J. Nocedal，关于用于大规模优化的有限内存BFGS方法，《数学规划》45 (1–3) (1989年) 503–528。doi:10.1007/BF01589116。[86] J. F. Urbán，P. Stefanou，J. A. Pons，揭示物理信息神经网络的优化过程：PINN能够达到多高的精度和竞争力？《计算物理学杂志》523 (2025年) 113656。doi:10.1016/j.jcp.2024.113656。URL https://doi.org/10.1016/j.jcp.2024.113656

[87] S. S. Oren、D. G. Luenberger，自缩放变度量（SSVM）算法，《管理科学》20 (5) (1974年) 845–862。doi:10.1287/mnsc.20.5.845。[88] E. Kiyani、K. Shukla、J. F. Urbán、J. Darbon、G. E. Karniadakis，优化物理信息神经网络和Kolmogorov–Arnold网络的优化器，arXiv预印本；首个版本发表于2025年1月，第6版发表于2026年2月（2025年）。arXiv:2501.16371，doi: 10.48550/arXiv.2501.16371。[89] J. Müller、M. Zeinhofer，通过能量自然梯度提升物理信息神经网络的准确度（2023年）。arXiv:2302.13163，doi:10.48550/arXiv.2302.13163。[90] K. Levenberg，一种用于求解某些最小二乘非线性问题的方法，《应用数学季刊》2 (2) (1944年) 164–168。doi:10.1090/qam/10666。URL https://doi.org/10.1090/qam/10666[91] D. W. Marquardt，一种用于非线性参数最小二乘估计的算法，《工业与应用数学学会期刊》11 (2) (1963年) 431–441。doi:10.1137/0111030。URL https://doi.org/10.1137/0111030[92] J. Taylor、W. Wang、B. Bala、T. Bednarz，优化数据驱动深度神经网络和物理信息神经网络的优化器（2022年）。arXiv:2205.07430，doi: 10.48550/arXiv.2205.07430。[93] A. Bonfanti、G. Bruno、C. Cipriani，物理信息神经网络在非线性区域面临的挑战（2024年）。arXiv:2402.03864，doi:10.48550/arXiv.2402.03864。[94] M. L. Shahab、I. Mukhlash、H. Susanto，物理信息神经网络（PINN）需要很深吗？使用Levenberg–Marquardt算法的浅层物理信息神经网络（2026年）。arXiv:2602.08515，doi:10.48550/arXiv.2602.08515。[95] Q. Lou、X. Meng、G. E. Karniadakis，通过Boltzmann–BGK表述求解正向与逆向流动问题的物理信息神经网络，《计算物理学杂志》447 (2021年) 110676。doi:10.1016/j.jcp.2021.110676。URL https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110676[96] M. De Florio、E. Schiassi、B. D. Ganapol、R. Furfaro，稀薄气体动力学的物理信息神经网络：Bhatnagar–Gross–Krook近似下的热蠕流，《流体物理学》33 (4) (2021年) 047110。doi:10.1063/5.0046181。[97] L. Zhang、W. Ma、Q. Lou、J. Zhang，结合离散速度方法的物理信息神经网络模拟稀薄气体流动，《流体物理学》35 (7) (2023年) 077124。doi:10.1063/5.0156404。[98] P. Zhang、Y. Wang，采用BGK模型的微流动神经网络表征（2024年）。arXiv:2410.21935，doi:10.48550/arXiv.2410.21935。[99]S. Jin、Z. Ma、K. Wu，用于多尺度时变线性输运方程的渐近保持神经网络，《科学计算杂志》94 (3) (2023年) 57。doi:10.1007/s10915-023-02100-0。

[100] S. Li, Z. Ma, K. Wu，《计算物理通讯》35 (3) (2024) 693–723。doi: 10.4208/cicp.OA-2023-0211。[101] W. Chen, G. Dimarco, L. Pareschi，面向多尺度动力学方程不确定性量化的结构保持与渐近保持深度神经替代模型，《多尺度建模与仿真》24 (2) (2026) 861–888。doi:10.1137/25M1768709。[102] L. Liu, X. Zhu, Z. Zhu，基于双保真度的渐近保持神经网络及其在半导体玻尔兹曼方程逆问题中的应用，《计算物理学杂志》563 (2026) 115076。doi:10.1016/j.jcp.2026.115076。URL https://doi.org/10.1016/j.jcp.2026.115076[103] Z. Li, Y. Wang, H. Liu, Z. Wang, B. Dong，利用神经稀疏表示求解玻尔兹曼方程，SIAM科学计算杂志46 (2) (2024) C186–C215。doi:10.1137/23M1558227。[104] J. Oh, S. Y. Cho, S.-B. Yun, E. Park, Y. Hong，用于求解玻尔兹曼方程BGK模型的可分离物理信息神经网络，SIAM科学计算杂志47 (2) (2025) C451–C474。doi:10.1137/24M1668809。URL https://doi.org/10.1137/24M1668809[105] G. Ko, S.-J. Son, S. Y. Cho, M.-S. Lee，通过物理信息神经网络求解BGK模型的理论引导加权L2损失，arXiv预印本 arXiv:2604.04971 (2026)。doi:10.48550/arXiv.2604.04971。URL https://arxiv.org/abs/2604.04971[106] E. Abdo, L. Chai, R. Hu, X. Yang，逼近玻尔兹曼方程的物理信息神经网络误差估计 (2024)。arXiv:2407.08383，doi:10.48550/arXiv.2407.08383。[107] J. Kim, E. Jun，基于Fokker–Planck模型的稀薄气体流动物理信息神经网络 (2026)。arXiv:2610.22390，doi:10.48550/arXiv.2610.22390。[108] J. Han, C. Ma, Z. Ma, W. E，适用于动力学方程的一致高精度机器学习流体动力学模型，《美国国家科学院院刊》116 (44) (2019) 21983–21991。doi:10.1073/pnas.1909854116。[109] Z. Li, B. Dong, Y. Wang，玻尔兹曼–BGK方程的保持不变性矩闭合模型学习，《数学与统计学通讯》(2023)。doi: 10.1007/s40304-022-00331-5。[110] T. Xiao, M. Frank，利用神经网络加速玻尔兹曼方程的求解，《计算物理学杂志》443 (2021) 110521。doi:10.1016/j.jcp.2021.110521。[111] T. Xiao, M. Frank，RelaxNet：用于逼近玻尔兹曼碰撞算子的结构保持神经网络，《计算物理学杂志》490 (2023) 112317。doi: 10.1016/j.jcp.2023.112317。

[112] S. T. Miller, N. V. Roberts, S. D. Bond, E. C. Cyr，玻尔兹曼方程的基于神经网络的碰撞算子，《计算物理学杂志》470 (2022) 111541。doi: 10.1016/j.jcp.2022.111541。[113] J. Y. Lee, S. Schotthöfer, T. Xiao, S. Krumscheid, M. Frank，保结构算子学习：动力学方程碰撞算子的建模 (2024)。arXiv:2402.16613，doi:10.48550/arXiv.2402.16613。[114] J. Y. Lee, G. J. Jung, B. Lim, H. J. Hwang，FourierSpecNet：受傅里叶谱方法启发的神经碰撞算子逼近，用于求解玻尔兹曼方程，《动力学及相关模型》21 (2026) 69–103。doi:10.3934/krm.2026004。[115] B. Hu, K. Qi，通过带守恒约束的傅里叶神经算子求解BGK模型和玻尔兹曼方程，《计算与应用数学杂志》(2026) 118335期刊预印本。doi:10.1016/j.cam.2026.118335。[116] T. Xiao，利用可微编程求解连续介质流动和稀薄流动，《计算物理学杂志》539 (2025) 114224。doi:10.1016/j.jcp.2025.114224。[117] E. Roohi, A. Shoja-Sani, F. Ebrahimzadeh Azghadi，稀薄气体动力学的神经网络：弛豫问题、多原子气体激波和高超声速圆柱绕流，《流体物理学》38 (5) (2026) 057108。doi:10.1063/5.0334590。URL https://doi.org/10.1063/5.0334590[118] N. D. Ball, J. F. MacArt, J. Sirignano，在线优化机器学习碰撞模型，以加速稀薄气体流动的直接分子模拟，《计算物理学杂志》549 (2026) 114601。doi:10.1016/j.jcp.2025.114601。URL https://doi.org/10.1016/j.jcp.2025.114601[119] E. Roohi, A. Shoja-Sani, S. Stefanov，用于硬球替代模型和直接模拟蒙特卡罗中第一性原理角度预测的物理约束神经碰撞算子，《流体物理学》38 (5) (2026) 057123。doi:10.1063/5.0328463。URL https://doi.org/10.1063/5.0328463[120] S. Chapman, T. G. Cowling，《非均匀气体的数学理论：气体中黏度、热传导和扩散的动力学理论》，第3版，剑桥大学出版社，剑桥，1970年，与D. Burnett合作编写。[121] T. Ohwada，正激波的结构，RIMS Kôkyûroku 824 (1993) 255–267。URL http://hdl.handle.net/2433/83238[122] S.-M. Yen，激波中的温度超调，《流体物理学》9 (7) (1966) 1417–1418。doi:10.1063/1.1761862。[123] F. G. Tcheremissine，私人通信 (2026)。