

文章编号: 1671-6612 (2026) 04-565-11

基于 PINN 的相变单元传热过程预测研究

王东旭 曹晓玲

(西南交通大学机械工程学院 成都 610031)

【摘要】 在相变储能系统传热问题的研究中, 单元区域内的温度变化与相变界面的移动对整个研究过程至关重要。然而, 求解相变传热过程需要高分辨率的测量手段与大规模计算, 这增加了实验复杂度与资源成本。为解决这一问题, 研究采用物理信息神经网络 (PINN), 并基于 CFD 数值模拟得到的温度场与界面捕捉数据对 PINN 模型进行训练, 在有限训练数据条件下, 系统评估了 PINN 方法在相变传热问题中的适用性, 同时预测了传热过程中的温度变化与界面演化规律, 并讨论了激活函数、学习率及网络结构对 PINN 预测精度的影响。结果表明, PINN 模型能够准确、高效地预测温度演变与相变界面演变过程; 在监测点位置处, 均方根误差 (RMSE) 与平均相对误差 (MRE) 分别为 6.32×10^{-3} 和 0.3261, 全域温度误差的最大相对误差仅为 8.94%, 且对移动界面的捕捉精度较高。这表明基于 PINN 的方法能够有效复现相变传热的热行为, 同时节约计算资源, 为相变传热研究提供了一种非常有效的思路和方法。

【关键词】 物理信息神经网络; 相变传热; 温度预测; 焓法

中图分类号 TK124/TP183 文献标志码 A

Physics-Informed Neural Networks (PINNs) for Prediction of Heat Transfer in Phase Change Energy Storage Units

Wang Dongxu Cao Xiaoling

(School of Mechanical Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu, 610031)

【Abstract】 In the research on the subject of heat transfer in phase change energy storage system, the temperature variation within the unit region and the movement of phase change interface are of crucial importance to the entire research process. However, resolving phase change heat transfer requires high resolution measurements and large scale computation, which increases experimental complexity and resource costs. In order to resolve this issue, a physics-informed neural network (PINN) is employed in the study and the PINN approach was trained on simulation data derived from physically based CFD simulations with temperature distribution and interface capturing. This study systematically evaluates the applicability of PINN for phase change heat transfer problems under limited training data conditions, by concurrently predicting both temperature variations and interface evolution during the heat transfer process. The impact of activation function, learning rate, and network architecture on the predictive accuracy of the PINN is also examined. The findings demonstrate that the PINN model accurately and efficiently predicts both temperature evolution and phase change interface propagation, achieving Root Mean Square Error (RMSE) and Mean Relative Error (MRE) of 6.32×10^{-3} and 0.3261 at individual probe locations, a domain-wide peak relative temperature error of only 8.94%, and remarkably precise capture of the moving interface. This confirms that the approach based on PINN effectively reproduces the thermal behavior of the phase change heat transfer while saving computational resources and offering a powerful

作者简介: 王东旭 (2000.12-), 男, 在读硕士研究生, E-mail: wdx277501776@163.com

通讯作者: 曹晓玲 (1984.08-), 女, 博士, 正高级工程师, E-mail: xlcao@swjtu.edu.cn

收稿日期: 2026-03-18

new avenue for phase change heat transfer research.

【Keywords】 PINN; Phase change heat transfer; Temperature prediction; Enthalpy method

0 引言

相变材料 (PCM) 因高储能密度和恒温相变特性, 在热能存储和温度调控领域应用前景广阔, 尤其在可再生能源集成、电子冷却和供暖、通风、空调 (HVAC) 系统中发挥重要作用^[1,2]。相变储能的研究方法分为实验研究和数值模拟研究, 实验研究虽能提供准确数据, 但成本高、耗时且复杂, 并且由于两相流体的存在和界面的复杂变化, 难以对大量的相变和流动细节进行捕捉; 数值模拟则需要大量的计算资源和时间。这些问题都使得相变储能过程的特性参数变化研究具有较大挑战^[3,4]。

近年来, 使用机器学习来分析和预测相变材料中的传热和相变现象的情况显著增加^[5]。机器学习擅长处理大型复杂数据集和建模非线性关系, 使其非常适合涉及高维输入和输出的问题。机器学习 (ML) 技术在传热问题中的应用可以追溯到 20 世纪 90 年代, 一种常用的机器学习算法是人工神经网络 (ANN), 当时 ANN 被用来从数据中学习对流换热系数^[6]。现如今, ANN 已在图像识别^[7]、认知科学^[8]、自然语言处理^[9]、自动驾驶^[10]和基因组学^[11]等领域得到比较广泛的发展。同时, 对于 PCM 的研究, 研究人员将实验研究或数值模拟与机器学习相结合, 为研究 PCM 系统提供了一种十分适用的方法。Urresti 等^[12]利用实验数据以及与 PCM 热行为相关的其他数据来训练 ANN 并分析和评估嵌入建筑围护结构中的 PCM 的热行为。Motahar 等^[13]使用 ANN 来预测外壳内 PCM 的努塞尔数和熔融体积分, 使用实验数据进行训练。Duan 等^[14]将 ANN 与实验数据相结合, 根据时间和孔隙率预测金属泡沫 PCM 系统的温度、液体分数和努塞尔数。

上述方法均可以概括为基于数据驱动的方法, 现如今这类研究较为丰富, 这类方法的建模精度主要取决于可用数据量和系统本身的复杂性, 但是当数据稀疏或边界条件缺少时, 物理信息神经网络 (PINN) 的预测结果误差要低于 ANN。Wei 等人^[15]对室内气流进行预测, 与纯数据驱动的 ANN 相比, PINN 的预测误差大大降低, 其中速度大小、 x 速度分量、 y 速度分量和压力的绝对误差分别为 ANN

误差的 84.2%、72.5%、77.8% 和 98.3%。Alejandro 等人^[16]在有限噪声数据下, PINN 在保持物理可解释性的同时, 准确地捕捉到了系统的长期退化动态。与 ANN 的预测结果相比, PINN 将电压、膜厚预测误差降低一个数量级以上, 且自动正则化, 避免过拟合。随着科技的发展, PINN 已经运用于各个领域。Mao 等人^[17]利用 PINN 模型去求解一维和二维 Euler 方程的正向和逆向问题, 并对高速气体流动建立模型。Rao 等人^[18]通过 PINN 模型求解不可压缩牛顿流体对应的 Navier-Stokes 方程, 研究低雷诺数下的稳态和瞬态层流。Darioush Jalili 等^[19]利用 PINN 捕捉两相流中相界面的行为, 并对具有代表性的流动结构的流体力学和传热进行建模。包括追踪单个气泡在更稠密流体中的上升过程, 以及探究气泡在靠近加热壁面处上升后的传热过程。对不同性质流体的上升气泡相界面进行了追踪。Jin 等人^[20]利用 PINN 模型研究了 2 种不同表达式的 Navier-Stokes 方程的求解。Ren 等人^[21]提出了一种高效可靠的物理信息极限学习机框架来解决 Stefan 问题, 即使用双网络结构, 通过两个单独的 ELM 网络来逼近潜解和移动边界。然而, 目前利用 PINN 求解相变传热过程及储能的研究相对较少, 主要研究仅是针对系统的出入口参数进行预测研究。Gaurav 等人^[22]研究了一种新的基于物理信息神经网络 (PINNs) 的数据驱动建模方法, 用于预测 DCEE 的冷却水出口温度、空气出口温度和空气出口比湿, 通过考虑不同的输入参数, 使用 PINN 评估 DCEE 的性能特征。

综上所述, 物理信息神经网络 (PINN) 在众多学科领域中均展现出优于传统人工神经网络 (ANN) 的显著优势, 但其在相变传热领域的应用仍相对较少。因此, 本研究采用 PINN 模型对相变单元熔化过程中的温度变化与相变界面移动开展预测研究, 探究该模型在这一研究方向上的适用性。具体工作如下: 首先, 基于焓-孔隙率方法定义相变传热物理问题, 建立系统的控制方程、初始条件与边界条件, 通过数值模拟获取训练集、验证集与测试集, 并对数据进行归一化处理; 其次, 分

析不同激活函数、隐藏层神经元数量及学习率下 PINN 模型的性能优势, 利用验证集数据验证 PINN 预测精度优于 ANN 模型, 同时确定 PINN 的最优网络结构; 最后, 在最优配置下分析 PINN 对相变过程中温度变化与相界面移动的预测误差, 验证该神经网络方法在相变传热预测中的准确性与适用性。

1 数据集的获取及预处理

1.1 物理问题的定义

考虑正方形二维单元区域 Ω , 边界 $\Gamma=\partial\Omega$, 区域内部充满相变材料, 根据焓法模型可知^[23], 本文的相变传热的控制方程可以定义为:

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

式中:

$$H = \begin{cases} c_{p,s} T & T < T_m - \varepsilon \\ c_{p,s} (T_m - \varepsilon) + \frac{L}{2\varepsilon} (T - (T_m - \varepsilon)) & T_m - \varepsilon \leq T \leq T_m + \varepsilon \\ c_{p,s} (T_m - \varepsilon) + L + c_{p,l} (T - (T_m + \varepsilon)) & T > T_m + \varepsilon \end{cases} \quad (2)$$

式中: x, y 为区域内的位置坐标; t 为时间; H 为相变材料的焓值; ρ 和 λ 分别为密度和导热系数; $c_{p,s}$ 和 c_p 分别为固态和液态的比热; L 为相变过程中的潜热; 相变温度范围从 $T_m - \varepsilon$ 到 $T_m + \varepsilon$, T_m 为相变温度区间的平均温度; ε 为相变温度区间的半长。

相变传热过程初始条件:

$$T(x, y, t) = T_{init}, t = 0 \quad (3)$$

相变单元边界假定为恒温加热边界:

$$T(x, y, t) = T_b, x \in \Gamma \quad (4)$$

式中: $T(x, y, t)$ 为 t 时间点 (x, y) 处的温度; T_{init} 为初始温度 ($T_{init} = 20^\circ\text{C}$); T_b 为边界温度。

1.2 数据集获取

本文的数据集样本是通过 ANSYS Fluent 软件进行数值模拟来获得的, 相变单元为二维正方形结构, 如图 1 所示, 相变单元内部充满石蜡, 方形模型的边长设定为单位长度 1。相变材料的物性参数如表 1 所示。

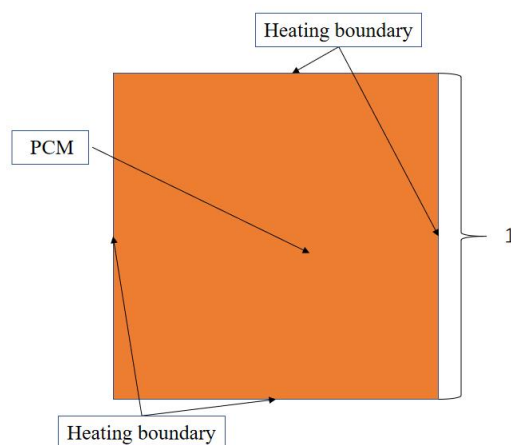


图 1 相变单元示意图

Fig.1 Schematic diagram of the phase change unit

表 1 相变材料热物性参数

Table 1 Schematic diagram of the phase change unit

热物性	参数
相变温度区间/ $^\circ\text{C}$	25.90–28.30
潜热/(kJ/kg)	144
密度/(kg/m ³)	834(s)800(l)
导热系数/[W/(m· $^\circ\text{C}$)]	0.3–0.5
比热容/[kJ/(kg· $^\circ\text{C}$)]	1.70(s)2.50(l)

在数值模拟的具体设置中, 利用 Fluent 软件的凝固熔化模型, 打开能量方程和重力项。Boussinesq 假设认为, 温度变化导致密度变化, 材料的物性参数均为常数, 相变材料具有相变温区, 相变单元的四周被设定为恒温加热边界条件, 加热温度范围为 50°C 至 55°C 。同时, 相变材料的初始温度被设定为材料处于固态时的温度, 以确保模拟从固态开始的相变过程。

1.3 数据预处理

数据预处理是机器学习流程中的关键步骤, 它能够显著提升数据质量、模型性能和训练效率, 本节预处理步骤主要包括数据集划分、归一化和标准化等步骤。

基于 1.2 节计算得到的数据, 分别建立不同的数据集。以边界加热温度、相变材料种类为基准, 利用 Python 3.9 中的 sklearn.model_selection 模块对数据进行随机划分, 按照 80%、10%和 10%的比例分别构建训练集、验证集和测试集。其中, 训练集用于训练模型, 使机器学习算法能够学习数据中的特征与规律; 验证集用于评估不同超参数组合下的模型性能, 并选择最优模型结构; 测试集则用于检

验模型的预测精度和泛化能力,确保其在未知数据上的表现。本研究仅针对模型内插预测的研究,因此预测工况的边界温度取 $50^{\circ}\text{C} \sim 55^{\circ}\text{C}$ 之间,由 Python 中的随机模块划分选取的测试集数据边界温度为 $T_b=54.5^{\circ}\text{C}$ (不包括在训练集中)。

同时,为了避免输入端的不同维度之间的量纲差异带来的影响,需要对数据进行归一化处理,以提高网络性能,本文采用 Min-Max 归一化方法对数据进行处理,其公式如式 (5) 所示:

$$\hat{x} = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (5)$$

式中: $\hat{x}$ 为归一化后的值; $x_{\max}$ 和 $x_{\min}$ 分别为原始数据集中的最大值和最小值; x 为原始数据值。

2 PINN 模型的构建与调试

2.1 模型构建方法

PINN 模型采用全连接网络结构 (Fully Connected Neural Network, FCN) 作为 PINN 模型的基本结构,这是一种经典的神经网络架构,广泛用于处理各种复杂的非线性问题。一旦控制方程已知,它们就可以与初始条件和边界条件相结合,形成基于物理的损失函数,表达式如式 (6) 所示:

$$T = F_{NN}(x, y, t, \rho, k, c, \omega, b) \quad (6)$$

式中: F_{NN} 为单个神经网络的总贡献,由可训练参数 ω 和 b 来塑造。全连接网络决定了时间、空间坐标 (x, y, t) 、物理量 (比热容、密度、导热系数) 和温度之间的关系。如图 2 所示,输入层接收多个物理参数 $(x_1, x_2, \dots, x_i)$ 。模型包含三个隐藏层,第一个隐藏层的神经元接收来自输入层的数据。这些神经元对输入数据进行加权求和,应用激活函数引入非线性,并产生输出,然后传递给后续层,这层往往是另一个隐藏层。该层中的每个神经元执行类似的操作:它计算其输入的加权和,应用激活函数,并产生输出。这个过程在网络中的所有隐藏层中重复进行,最后,输出层接收来自最后一个隐藏层的处理信息并输出目标值。为了模拟原方程的预测解,需要使用神经网络来逼近具有初始条件和边界条件的潜在解,通过使用梯度下降法对损失函数进行处理,定义损失函数来衡量预测值与真实值之间的

差异,每个神经元通过激活函数引入非线性,结合所提供的训练数据,使得网络能够学习和模拟复杂的物理现象。总的来说就是该模型的隐藏层由若干个全连接层组成,通过降低每个循环中的 MSE_f 、 MSE_{ic} 和 MSE_b 和 MSE_{data} 四个惩罚项,实现 PINNs 的学习能力,最终达到更高的预测精度。此外,本文还展示了用于损失函数不同项的数据点,如图 3 所示。用于计算残差损失的残差点可以在计算时空域中随机选取。

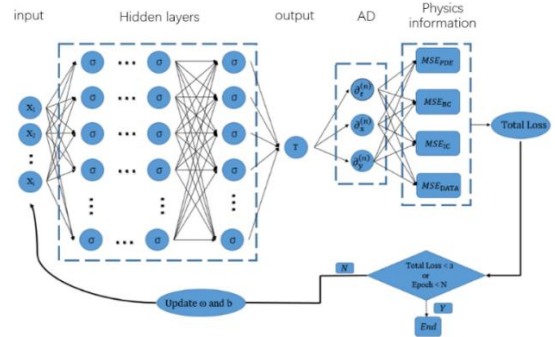


图2 PINN网络结构

Fig.2 Architecture of the PINN network

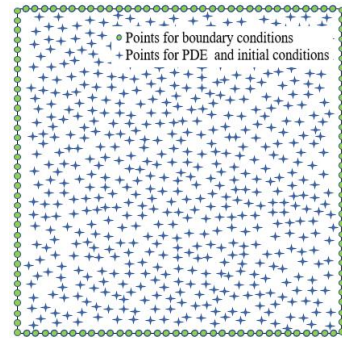


图3 PINN取样方案

Fig.3 Sampling strategy of the PINN

对于二维相变传热问题,其损失函数可表示为:

$$Loss(\theta) = W_f \cdot MSE_f + W_{ic} \cdot MSE_{ic} + W_b \cdot MSE_b + W_d \cdot MSE_d \quad (7)$$

式中: MSE_f 为偏微分方程损失; MSE_{ic} 为初始条件损失; MSE_b 为温度边界条件损失; MSE_d 为数据损失。 W_f , W_{ic} , W_b , W_d 分别为各项损失的权重。各项损失表达式分别为:

$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \left| F(x_f^i, y_f^i) \right|^2 \quad (8)$$

$$MSE_b = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \left| T(x_b^j, y_b^j, t) - T_b \right|^2 \quad (9)$$

$$MSE_{ic} = \frac{1}{N_{ic}} \sum_{k=1}^{N_{ic}} \left| T(x_{ic}^k, y_{ic}^k, t) - T_{ic} \right|^2 \quad (10)$$

$$MSE_d = \frac{1}{N_d} \sum_{l=1}^{N_d} \left| T(x_d^l, y_d^l, t) - T_d \right|^2 \quad (11)$$

式中: N_f , N_b , N_{ic} , N_d 分别为 PDE、温度边界、初始条件和数据的样本点数; $T(x_b^j, y_b^j, t)$ 为温度边界处的温度预测值; T_b 为边界温度样本点对应温度的真实值; 同理, $T(x_{ic}^k, y_{ic}^k, t)$ 和 $T(x_d^l, y_d^l, t)$ 为初始温度、所提供数据点的对应位置的预测值; T_{ic} 和 T_d 分别表示初始温度和数据样本点对应的真实值, $F(x_f^i, y_f^i)$ 为域内样本点的控制方程残差, 其表达式如 (12) 所示:

$$F(x_f^i, y_f^i) = \lambda \left(\frac{\partial^2 T^i}{\partial x_f^2} + \frac{\partial^2 T^i}{\partial y_f^2} \right) - \rho \frac{\partial H}{\partial t_f} \quad (12)$$

此外, 为了满足物理约束, 该网络利用自动微分 (Automatic Differentiation, AD) 技术计算各项物理损失, 并通过计算损失函数来优化模型参数。训练过程中, 模型采用 Python 3.8 作为编程语言, 并基于 Google 公司的 TensorFlow 框架进行构建, 在硬件环境方面, 训练过程在 NVIDIA GeForce RTX 3060 GPU 上运行, 在所有的数值实验中, 统一定义双曲正切函数 (tanh) 作为模型的非线性激活函数。采用一种带有权重衰减功能的优化器 Adam-W, 权重衰减有助于防止模型过拟合, 提高模型的泛化能力。不断更新网络参数 ω 和偏置项 b , 直至总损失降低到设定阈值以下或达到最大迭代次数 N 。

通过 PINN 模型预测典型位置和全区域的温度分布, 逐步衡量 PINN 的预测精度。这种训练方式不仅能够使模型拟合数据还能确保其遵循物理规律, 提高预测精度。

2.2 PINN 模型的性能评估

在模型训练过程中, 采用均方误差 (MSE) 损失函数来计算损失, 采用平均相对误差 (MRE) 作为衡量验证集预测精度的指标。

MSE 的计算式为:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (T_i - T_{pi})^2 \quad (13)$$

MRE 的计算式为:

$$MRE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_i - T_{pi}}{T_i} \right| \times 100\% \quad (14)$$

式中: T_{pi} 为第 i 个样本集的温度预测值; T_i 为对应样本的温度真实值; N 为验证集中数据点的数量。

2.2.1 不同激活函数对预测结果的影响

在三层隐藏层的结构基础上^[24], 根据验证结果对 ReLU、Sigmoid 和 Tanh 三种激活函数以及不同隐藏层神经元数量组合进行了评估选择。隐藏层神经元评估数量分别设置为 40、50 和 60。

验证集的损失变化结果如图 4 所示, 从整体趋势来看, 所有 Loss 曲线均随着训练迭代次数的增加而下降。从收敛速度的角度分析, ReLU 损失值在训练初期下降较快, 但其损失水平始终维持在较高状态。Sigmoid 和 Tanh 最终稳定的损失值低于 ReLU, 即模型在收敛后具有更好的拟合效果。鉴于 PINN 和 ANN 所使用的网络结构均为全连接网络结构, 训练过程较为接近, 因此本研究只讨论相同网络结构下的温度预测结果。图 5 展示了应用不同激活函数和神经元数量时, ANN 模型与 PINN 模型对于验证集的预测结果和真实结果的 MRE 值。从图中数据可以看出, 使用三种激活函数的情况下, PINN 预测结果的 MRE 值比 ANN 预测结果的 MRE 值降低了将近一个数量级。并且使用 Tanh 作为激活函数时, PINN 预测的 MRE 值最小, 预测结果最为精确。

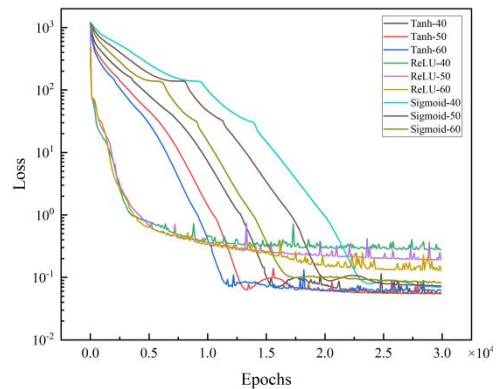


图 4 不同网络结构验证损失

Fig.4 Validation loss for different network architectures

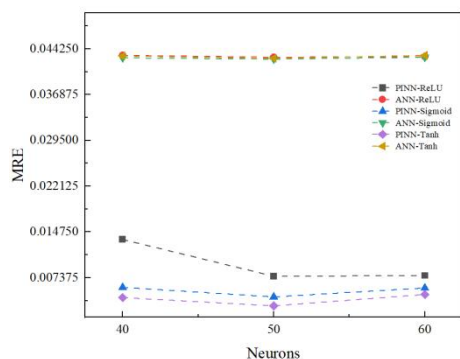


图5 不同激活函数和神经元组合的验证集 MRE

Fig.5 Validation MRE for different combinations of activation functions and neurons

2.2.2 不同学习率对预测结果的影响

在确定激活函数和隐藏层神经元数量后,进一步探讨了不同学习率对训练效果的影响,图6展示了不同学习率下的 PINN 训练后的验证集的损失结果。

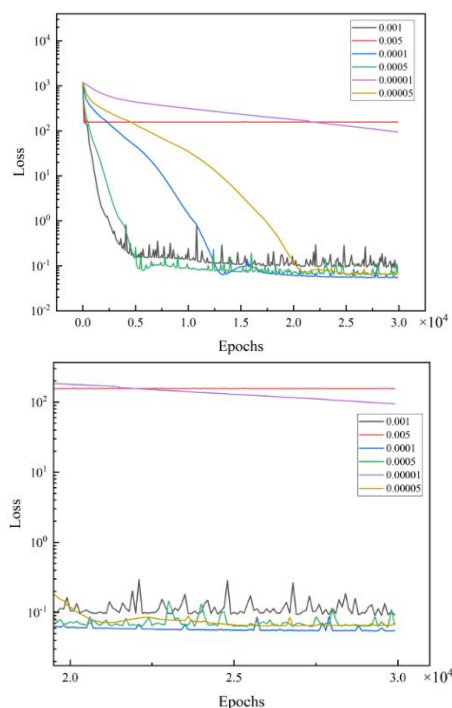


图6 不同学习率下模型的验证损失

Fig.6 Validation loss of the model under different learning rates

从图6中可以看出,学习率过大或过小都会影响模型的训练效果。当学习率较小(0.00001)时,在30000次迭代次数内仍未达到稳定状态。这是因为学习率过小会导致每次参数更新的步长过小,训练速度变慢,需要更多的迭代次数才能收敛。当学习率较大(0.005)时,训练过程可

能出现不收敛甚至发散的情况,这是由于步长过大,导致模型在参数空间内无法稳定收敛,从而跳过了最优解。学习率设定在0.0001至0.0005之间能够取得较好的训练效果。为了更清楚地解释 PINN 模型的优势,图7展示了不同学习率的 PINN 与 ANN 预测结果的 MRE 值。可以看出,当学习率过大或过小时, PINN 预测结果误差均大于 ANN。当学习率为0.0005时, PINN 预测结果与验证集真实值的 MRE 值最小,预测结果最为精确。而 ANN 的预测结果误差受学习率变化影响不大, MRE 结果都维持在 4.3×10^{-2} 附近。

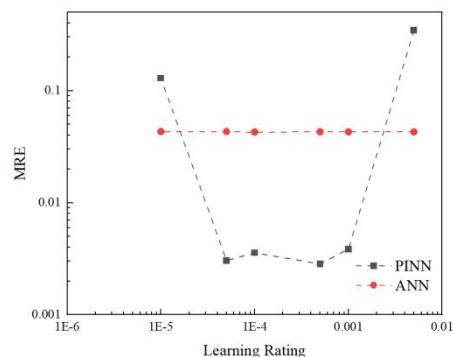


图7 不同学习率的 PINN 和 ANN 模型的 MRE 值

Fig.7 MRE values of PINN and ANN models with different learning rates

上述结果中, ANN 模型预测结果的 MRE 值变化不大的原因可能是训练集的数据量较少。因为本文旨在讨论稀疏数据情况下的 PINN 模型的优势,所以本文仅关注 PINN 与 ANN 预测结果的 MRE 值的相对大小。

结合上文讨论的结果,经过评估后的最佳网络配置如表2所示。

表2 PINN 网络结构最佳配置

Table 2 Optimal configuration of the PINN network structure

参数	配置
输入层	特征向量长度: 13
隐藏层	由三个全连接层组成, 每层具有 50 个神经元
输出层	1 (T)
批量大小	128
学习率	初始值为 0.0005, 采用 Adam-W 优化器动态调整学习率
Epochs	30000
激活函数	Tanh

3 预测结果与讨论

3.1 不同位置处温度预测结果

在上文验证集得出结论的基础上, 利用测试集对 PINN 模型进行预测效果评估。本文采用模型对相变单元四个位置处的温度变化进行预测。每个点的坐标分别为位置 1 (0.25, 0.75)、位置

2 (0.5, 0.75)、位置 3 (0.25, 0.5)、位置 4 (0.5, 0.5), 其中位置 4 为单元中心位置。

图 8 展示了 PINN 模型的预测值和真实值的对比结果, 从图中可以看出, PINN 模型的温度预测曲线和真实结果曲线的拟合度高。

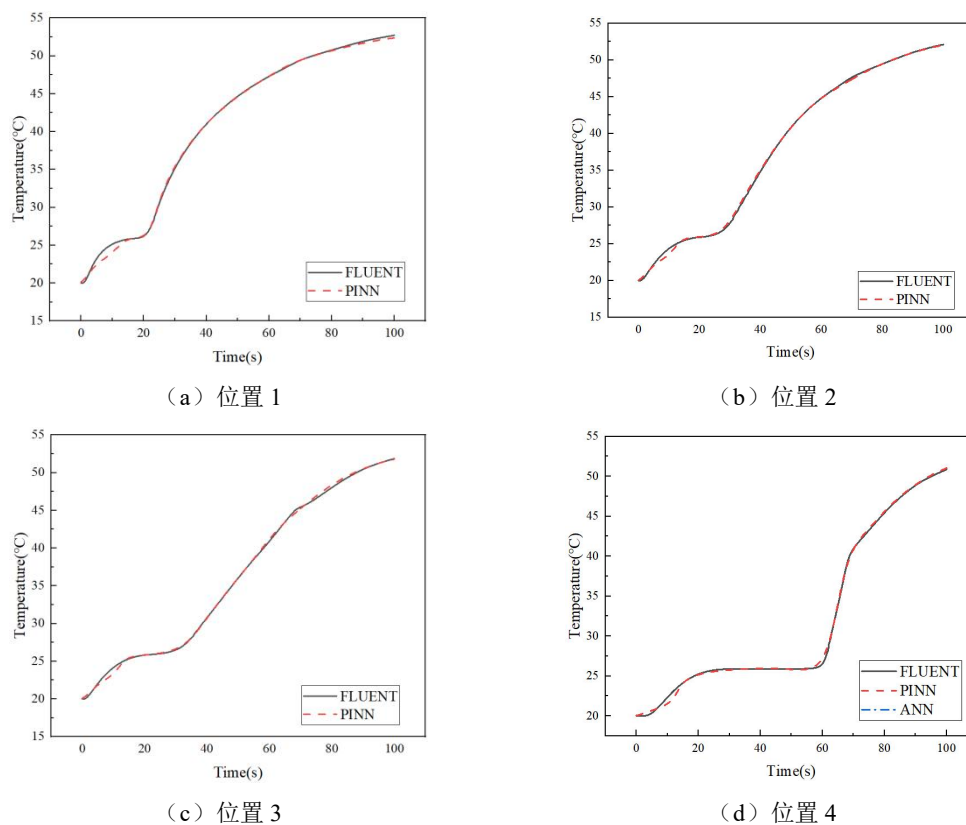


图 8 不同位置处的预测对比结果

Fig.8 Prediction comparison results at different positions

为了更加详细直观讨论模型的效果, 增加了均方根误差 (RMSE) 和 R^2 值对模型进行评估, RMSE 的计算式为:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (T_i - T_{pi})^2} \quad (15)$$

R^2 计算公式为:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (T_i - T_{pi})^2}{\sum_{i=1}^N (T_i - T_{mean})^2} \quad (16)$$

式中: T_{pi} 为第 i 个样本集的温度预测值; T_i 为对应样本的温度真实值; T_{mean} 为测试集得平均温度值; N 为测试集中数据点的数量。

本文分别计算不同位置处 PINN 模型的 MRE 值、RMSE 值和 R^2 值, 结果如表 3 所示。

表 3 不同位置处 MRE、RMSE 和 R^2 值对比结果

Table 3 Comparison of MRE, RMSE and R^2 values at different positions

	MRE	RMSE	R^2
位置 1	6.32×10^{-3}	0.3261	0.9990
位置 2	5.03×10^{-3}	0.2224	0.9996
位置 3	5.04×10^{-3}	0.2309	0.9995
位置 4	6.25×10^{-3}	0.2514	0.9994

从表 3 中我们可以看出, PINN 模型在不同位置处的预测结果与测试集真实数据之间的均方根误差 (RMSE) 和平均相对误差 (MRE) 均

较小。位置 1、位置 2、位置 3 和位置 4 的 MRE 值分别为 6.32×10^{-3} 、 5.03×10^{-3} 、 5.04×10^{-3} 和 6.25×10^{-3} , RMSE 值分别为 0.3261、0.2224、0.2309 和 0.2514, 且 R^2 值均大于 0.99。这些结果表明, 预测结果与数值模拟结果之间具有较高的一致性。这是因为 PINN 模型通过结合与物理过程相关的偏微分方程, 训练一定量的数据让模型学习到相变传热的物理过程, 找到适定的且其唯一的解。在这种情况下, PINN 方法可以达到很好的预测效果。

3.2 全区域温度预测结果

结合 3.1 节中所用到的模型结构, 针对相变

单元全域的温度变化进行预测讨论。本节采用了随机取样的方法, 如 2.1 节中图 3 所示, 选取了域内 $N_f=3974$ 个配置点作为内部的采样点, 应用于 PDE 条件和初始条件。同时, 为了确保边界条件的准确性和完整性, 在每个边界上均匀地选取了 60 个配置点, 共计 240 个边界配置点。这些配置点被用作训练样本, 且在每个边界上均施加了 Dirichlet 边界条件, 训练数据温度范围设定为 50°C 到 55°C 。本文主要针对 $t=20\text{s}$ 、 $t=50\text{s}$ 和 $t=80\text{s}$ 三个时刻的预测结果和误差对 PINN 进行评估讨论。

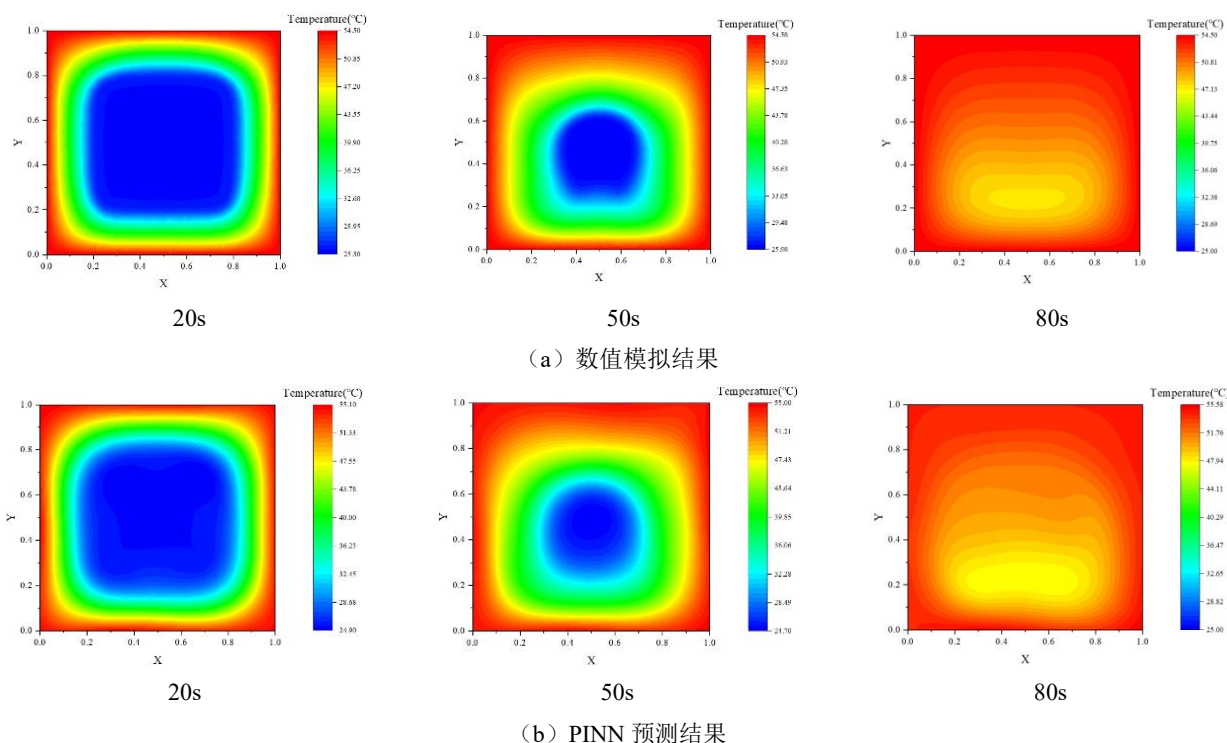


图 9 不同时刻预测对比结果

Fig.9 Prediction comparison results at different instants

图 9 (a) 和图 9 (b) 分别展示了在 $t=20\text{s}$ 、 $t=50\text{s}$ 、 $t=80\text{s}$ 这三个时刻 PINN 模型预测结果和数值模拟结果的温度分布云图。从图 9 (a) 结果中可以看出, 在数值模拟的初始阶段, 相变单元固体材料受到不同方向加热面的影响, 四周温度变化差异并不显著; 然而, 随着时间的推移, 固体材料与侧壁面之间的流体通道逐渐发生变化, 固体材料底部的形状也会发生演变, 呈现为弧状形状。这是因为熔化前期, 固体材料的熔化主要

受导热影响; 随着时间的推移, 自然对流的作用增强, 逐渐主导了单元的传热过程, 顶端的热流体聚集, 并沿着固体材料的侧面向下运动; 当固体完全融化后, 对流可能导致热量在垂直方向上的分布不均匀, 从而在顶部形成较高的温度区域, 最终整个区域温度逐渐趋于一致。对比图 9 (b) 展示的 PINN 预测结果图, 分析可知, 在相变单元熔化阶段和完全融化之后的预测结果准确, 可以学习到整个单元的温度变化过程。为了

进一步分析误差结果, 结合图 10 所示的 PINN 模型预测误差图可知, 在相变单元熔化阶段, 不同时刻 ($t=20\text{s}$ 、 $t=50\text{s}$) 的最大相对误差为 0.0893,

当相变单元完全融化阶段 ($t=80\text{s}$), 整个区域最大相对误差为 0.0202。

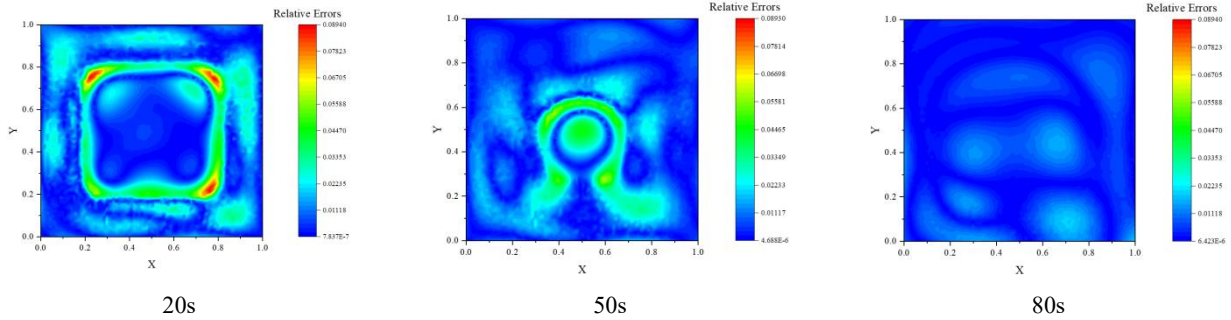


图 10 PINN 模型预测结果误差

Fig.10 Prediction error of the PINN model

上述结果表明, 相变单元全区域温度预测结果与数值模拟结果之间也具有较高的一致性, 这个结果也体现了 PINN 模型在预测未知边界条件下相变单元全域的温度变化方面表现优异, 体现了该模型的鲁棒性和准确、快速预测的能力。误差结果也显示出该 PINN 模型具有很高的准确性和良好的适应性。

3.3 相界面预测结果

将 PINN 预测模型与液相分数计算公式 (17) 相结合, 对相界面的移动进行捕捉预测, 得到如图 11 所示的结果

$$\beta = \begin{cases} 0, & T(x, y, t) < T_{m1} \\ \frac{T(x, y, t) - T_{m1}}{T_{m2} - T_{m1}}, & T_{m1} < T(x, y, t) < T_{m2} \\ 1, & T(x, y, t) \geq T_{m2} \end{cases} \quad (17)$$

式中: $T(x, y, t)$ 为 t 时刻 PINN 模型预测温度值。

图 11 对比分析了不同时刻下相界面的预测结果与数值模拟结果。在 $t=20\text{s}$ 、 40s 和 50s 时刻, PINN 均较为准确地捕捉到相界面的形态与位置, 体现了其对熔化动态过程的预测能力。数值模拟结果与 PINN 的预测结果吻合度较高, 表明 PINN 模型训练充分, 能够准确预测熔化过程中相界面的复杂演化。上述结果证实, PINN 可作为一种可靠、高效的工具用于预测相界面演变

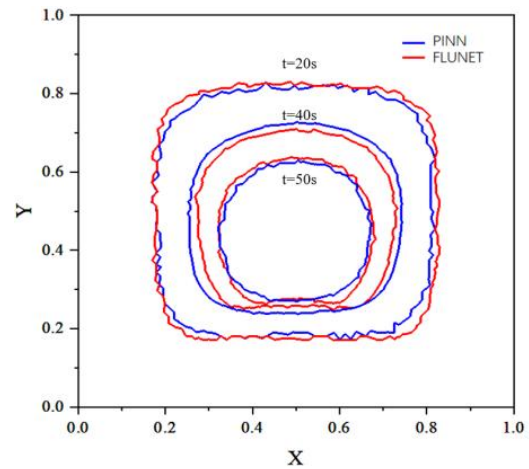


图 11 不同时刻的相变界面预测结果

Fig.11 Predicted results of the phase change interface at different instants

4 结论

本文通过构建基于物理信息神经网络 (PINN) 的模型, 对二维相变单元传热过程中的温度变化及相界面移动进行了讨论。通过对不同位置处、全区域温度变化的预测以及相界面移动的预测, 验证了 PINN 模型在相变传热过程中的有效性。以下是本文的主要结论:

(1) PINN 模型能够准确预测相变单元中不同位置的温度变化情况。在四个位置的预测结果中, 模型的平均相对误差 (MRE) 值均较小, 分别为 6.32×10^{-3} 、 5.03×10^{-3} 、 5.04×10^{-3} 和 6.25×10^{-3} ,

均方根误差 (RMSE) 值也处于较低水平, 分别为 0.3261、0.2224、0.2309 和 0.2514, R^2 值接近 1, 表明预测结果与数值模拟结果具有高度一致性, PINN 模型能够有效捕捉相变传热过程中的温度变化规律。

(2) 在对相变单元全区域温度变化的预测中, PINN 模型展现了良好的精度。在相变单元熔化阶段, 不同时刻 ($t=20s$ 、 $t=50s$) 的最大相对误差为 0.0893, 当相变单元熔化完成后 ($t=80s$), 整个区域的最大相对误差为 0.0202。这表明 PINN 模型能够有效模拟整个相变单元内的温度分布情况。

(3) PINN 模型在预测相界面移动方面表现出色。通过与数值模拟结果的对比, PINN 模型能够准确捕捉相界面的形状和位置变化, 预测结果与数值模拟结果高度吻合。这表明 PINN 模型能够有效模拟相变传热过程中的动态行为, 为研究相变传热过程提供了一种有力的工具。

参考文献:

- [1] A Sharma, V V Tyagi, C R Chen, et al. Review on thermal energy storage with phase change materials and applications[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2009,13:318-345.
- [2] H Jouhara, A Żabnieńska-Góra, N Khordehgah, et al. Latent thermal energy storage technologies and applications: A review[J]. International Journal of Thermofluids, 2020,5-6:100039.
- [3] S Shen, C Wu, F Duan. Machine learning for predicting the PCM melting process in a rectangular enclosure energy storage[J]. AI Thermal Fluids, 2025,1:100001.
- [4] V R Voller, C R Swaminathan. ERAL SOURCE-BASED METHOD FOR SOLIDIFICATION PHASE CHANGE[J]. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals, 1991,19:175-189.
- [5] S Rashidi. Applications of machine learning techniques in energy systems integrated with phase change materials-A concise review[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2023,150:237-245.
- [6] K Jambunathan, S L Hartle, S Ashforth-Frost, et al. Evaluating convective heat transfer coefficients using neural networks[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1996,39:2329-2332.
- [7] A Krizhevsky, I Sutskever, G E Hinton. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. Commun. ACM, 2017,60:84-90.
- [8] B M Lake, R Salakhutdinov, J B Tenenbaum. Human-level concept learning through probabilistic program induction[J]. Science, 2015,350:1332-1338.
- [9] K Cho, B Van Merriënboer, C Gulcehre, et al. Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation[C]. Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP), 2014:1724-1734.
- [10] S Grigorescu, B Trasnea, T Cocias, et al. A Survey of Deep Learning Techniques for Autonomous Driving[J]. Journal of Field Robotics, 2020,37:362-386.
- [11] B Alipanahi, A Delong, M T Weirauch, et al. Predicting the sequence specificities of DNA- and RNA-binding proteins by deep learning[J]. Nat Biotechnol, 2015,33:831-838.
- [12] A Urresti, A Campos-Celador, J M Sala. Dynamic neural networks to analyze the behavior of phase change materials embedded in building envelopes[J]. Applied Thermal Engineering, 2019,158:113783.
- [13] S Motahar. Experimental study and ANN-based prediction of melting heat transfer in a uniform heat flux PCM enclosure[J]. Journal of Energy Storage, 2020,30:101535.
- [14] J Duan, F Li. Transient heat transfer analysis of phase change material melting in metal foam by experimental study and artificial neural network[J]. Journal of Energy Storage, 2021,33:102160.
- [15] Wei Chenghao. Ooka Ryoza. Applying a Physics-Informed Neural Network to an Indoor Airflow Time-Extrapolation Prediction[J]. Building and Environment, 2025,282.
- [16] A Polo-Molina, J Portela, L A H Rozas, et al. Modeling Membrane Degradation in PEM Electrolyzers with Physics-Informed Neural Networks[J/OL]. Madrid: Institute for Research in Technology (IIT), 2025-07-07, <http://hdl.handle.net/11531/104179>, DOI:10.48550/arXiv.

- 2507.02887
- [17] Z Mao, A D Jagtap, G E Karniadakis. Physics-informed neural networks for high-speed flows[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020,360:112789.
- [18] C Rao, H Sun, Y Liu. Physics-informed deep learning for incompressible laminar flows[J]. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2020,10:207-212.
- [19] D Jalili, S Jang, M Jadidi, et al. Physics-informed neural networks for heat transfer prediction in two-phase flows[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024,221:125089.
- [20] X Jin, S Cai, H Li, et al. NSFnets (Navier-Stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible Navier-Stokes equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021,426:109951.
- [21] F Ren, P-Z Zhuang, X Chen, et al. Physics-Informed Extreme Learning Machine (PIELM) for Stefan problems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2025,441:118015.
- [22] G Priyadarshi, C Murali, S Agarwal, et al. Parametric investigation and optimization of phase change material-based thermal energy storage integrated desiccant coated energy exchanger through physics informed neural networks oriented deep learning approach[J]. *Journal of Energy Storage*, 2024,80:110231.
- [23] Y Zhang, K Du, J P He, et al. Impact Factors Analysis of the Enthalpy Method and the Effective Heat Capacity Method on the Transient Nonlinear Heat Transfer in Phase Change Materials (PCMs)[J]. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2014,65:66-83.
- [24] 余波,甘子玉,张森林,等.基于物理信息神经网络预测 2D/3D 非稳态温度场及热源[J]. *工程力学*, 2025, 42(10):12-24.