

“硬”边界低阶导数型物理信息神经网络： 一种流动求解器

崔永赫，张文耀，闫慧龙，钱芳，王秋旺，赵存陆
(西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室，710049，西安)

摘要：为加速求解流体力学问题的物理信息神经网络的训练过程，本文将 Navier-Stokes 方程转换成低阶导数形式，并以“硬”方式施加边界条件，构建了用于求解稳态不可压缩层流流动问题的“硬”边界低阶导数型物理信息神经网络(HLPINN)。应用 HLPINN 对变截面管道内的流动进行了数值模拟，并将结果与传统的“硬”边界物理信息神经网络(HPINN)结果对比。结果表明：HLPINN 和 HPINN 均能精确模拟截面扩张和收缩管道内的流场；相较于 HPINN，HLPINN 可以加速反向传播过程从而加速训练过程；对于截面扩张和收缩两种工况，与 HPINN 相比，HLPINN 的训练时间减少超 60%；HLPINN 可对两种优化算法进行加速，对于自适应矩估计(Adam)算法可提速超过 200%，对于局部极小化(L-BFGS-B)算法可提速 90%左右。此外，用于施加“硬”边界条件的距离函数的形式和值域对计算精度影响很大，但是对训练时间及优化算法计算速度的影响甚微。研究表明，连续、平缓和值域在合理范围的距离函数有助于提高计算精度。

关键词：物理信息神经网络；低阶导数；流体力学；反向传播

中图分类号：TK124 **文献标志码：**A

DOI：10.7652/xjtuxb202209013 **文章编号：**0253-987X(2022)09-0123-11



OSID 码

“Hard” Boundary Low-Order Derivative Physics Informed Neural Network: A Fluid Flow Solver

CUI Yonghe, ZHANG Wenyao, YAN Huilong, QIAN Fang, WANG Qiuwang, ZHAO Cunlu
(Key Lab of Thermo-Fluid Science and Engineering of MOE, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: To accelerate the training of the physics informed neural network for solving fluid mechanics problems, a “hard” boundary low-order derivative physics informed neural network (HLPINN) is established by converting the Navier-Stokes equations into the low-order derivative form and imposing boundary conditions in a “hard” way to solve steady incompressible laminar flow problems. The HLPINN is used to simulate the flow in the pipes with a variable cross-section, and the results are compared with those obtained from the traditional “hard” boundary physics informed neural network (HPINN). The comparison results show that both HLPINN and HPINN can accurately simulate the flow fields in pipes with the expanding and contracting cross-section. Compared with the HPINN, HLPINN can accelerate the back-propagation process to accelerate the training. For either the cross-section expansion or the cross-section contraction, the training time of the HLPINN is reduced by more than 60% compared with that of HPINN

with the same size. The HLPINN can accelerate the two optimization algorithms: adaptive moment estimation (Adam) algorithm and limited-memory BFGS-Bound (L-BFGS-B) algorithm by more than 200% and 90%, respectively. In addition, the form and value range of the distance function used to impose “hard” boundary conditions have a great impact on the calculation accuracy, but are of negligible influence on the training time and the calculation speed of both optimization algorithms. The results show that a continuous and smooth distance function with the reasonable value range can improve the calculation accuracy.

Keywords: physics informed neural network; low-order derivative; fluid mechanics; back-propagation

流体的流动在自然界和工业过程中无处不在,精确模拟流体流动过程对航空航天^[1]、建筑环境^[2]、能源电力^[3]和生物医学工程^[4]等领域有重要意义。流体流动问题的传统数值模拟通常使用有限差分法、有限容积法或有限元法等方法以离散的形式求解 Navier-Stokes(N-S)方程,此即计算流体动力学(computational fluid dynamics,CFD)方法。对于在复杂几何结构中的流动和湍流问题,CFD方法计算过程繁琐,并且在使用过程中对计算区域的网格划分也消耗巨大的计算资源。此外,对于病态问题和反演问题的求解,CFD方法也存在一定的困难。

近年来随着计算机技术和人工智能的发展,深度神经网络以其强大的复杂非线性系统建模能力在计算流体动力学领域引起广泛关注^[5-6]。深度神经网络在求解流动问题时只需事先获取部分流场数据,然后就可以快速实现对整个计算区域内流场的精准预测。Jin等利用CFD数据集训练了一个可以精确预测不同雷诺数下圆柱绕流流场的卷积神经网络(convolutional neural network,CNN)模型^[7]。谢晨月等基于高马赫数的可压缩湍流直接数值模拟数据训练了一个用于对强可压缩湍流进行大涡模拟的空间人工神经网络模型(space artificial neural network,SANN)^[8];模拟结果表明,SANN模型展现了优异的预测性能,突破了梯度模型、待定系数梯度模型和反卷积模型的局限性,此外,Kim等建立了一个通过输入壁面切应力等壁面信息就可以实现对湍流通道局部热通量进行精确预测的CNN模型^[9]。以上研究表明,CNN、SANN等深度神经网络模型的优势在于非线性预测能力强、无需划分网格、训练速度快,但是深度神经网络在使用过程中需要事先获取大量的标签数据用于训练网络,而在实际应用过程中获取标签数据往往十分困难。

Raissi等于2017年首次提出了一种名为物理信息神经网络(physics informed neural network,

PINN)的新型神经网络框架,该框架通过将控制方程嵌入到传统神经网络中,使其成为一种懂物理的神经网络。研究表明,PINN具有极强的求解/识别偏微分方程的能力^[10-11]。PINN也可用于流体动力学问题的数值模拟,通过给定控制方程和相应的初始及边界条件即可获得方程的数值结果;且在求解过程中只需从区域内抽取一定数量的残差点,而无需对计算区域进行网格划分。Jin等基于N-S方程和涡量方程,建立了可用于预测流场的速度压力PINN模型和涡量速度PINN模型^[12]。侯龙锋等发现利用 k -epsilon雷诺平均N-S方程构建的PINN框架可实现对湍流流动的数值模拟^[13]。Cai等应用PINN求解了一些CFD方法不易解决的病态流动和传热问题^[14],此外,Cai等利用PINN求解反演问题的能力提出了一种基于实验温度数据预测整个计算区域流场和温度场的PINN模型,这有望为实验流体动力学提供新的发展方向^[15]。然而,与CNN、SANN等深度神经网络模型相比,PINN的劣势在于其训练过程通常需要花费大量时间。因此,如何加速PINN的训练过程成为PINN应用道路上亟待解决的问题。Sun等将边界条件以一种“硬”方式编码到PINN中,提出了“硬”边界物理信息神经网络(“hard” boundary PINN,HPINN)框架;结果表明,HPINN可以有效加速PINN的训练过程,并可在一定程度上提高计算精度^[16-18]。Zhu等利用赫维赛德函数对PINN施加“硬”边界条件,也可实现对PINN训练过程的加速^[19]。Rao等提出了一种用于模拟不可压缩层流流动的混合变量物理信息神经网络,通过将流函数作为神经网络的输出,该网络自动满足连续性方程,因此可在一定程度上加速网络的训练过程^[20-21]。

上述研究主要是通过减少PINN损失函数的损失项数实现对PINN训练过程的加速,这种方式的加速效果有限。本研究另辟蹊径,从控制方程入手,

将 N-S 方程转换成低阶导数形式,转换后 N-S 方程构建的 PINN 的损失函数形式简单,易于优化;在此基础上,进一步对 PINN 施加“硬”边界条件。因此,新的 PINN 结合了两种方式的优点,其训练过程被大幅加速。本文以求解变截面管道内的流动问题为例,讨论所提出的 PINN 相较于传统 HPINN 的训练加速性能以及模拟的精确性。

1 控制方程和神经网络框架构建

1.1 控制方程

二维稳态不可压缩层流流动由下列连续性方程和 N-S 方程控制

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{-\nabla p}{\rho} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2)$$

式中: ∇ 是哈密尔顿算子; ∇^2 是拉普拉斯算子; $\mathbf{u} = (u, v)$ 为流体速度; p 是压力; ρ, ν 分别是流体密度和运动黏度。

1.2 HPINN 框架

PINN 框架主要由一个全连接神经网络 (fully connected neural network, FCNN) 和一个残差网络构成。FCNN 用于近似 N-S 方程的解,即 FCNN 的输入为空间变量 (x, y) , 输出为 (u, v, p) 。残差网络用于计算控制方程残差。在构建残差网络时,需要计算 FCNN 的输出变量关于输入变量的偏导数,这可由自动微分技术实现^[22]。FCNN 的激活函数采用 tanh 函数,权重 $\mathbf{W}$ 和偏置 $\mathbf{b}$ 采用 Xavier 方式进行初始化^[23]。优化策略为先采用自适应矩估计 (adaptive moment estimation, Adam) 算法进行一定步数的优化^[24],随后采用局部极小化 (limited-memory BFGS-Bound, L-BFGS-B) 算法进行更精细的优化^[25]。在计算过程中,通过两种优化算法不断对 PINN 的损失函数进行优化,从而更新权重 $\mathbf{W}$ 和偏置 $\mathbf{b}$,以使 PINN 可以精准地预测 N-S 方程的解。当损失函数被优化到一个极小值时,此时的 PINN 便可以精准预测 N-S 方程的解。

通常,对于只包含第一类边界条件的稳态问题, PINN 的损失函数包括控制方程损失 ($\mathcal{L}_e$) 和边界条件损失 ($\mathcal{L}_{bc}$) 两部分,损失函数具体由下式表示

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_e + \alpha \mathcal{L}_{bc} \quad (3)$$

其中

$$\mathcal{L}_e = \frac{1}{N_r} \sum_{k=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_r} |e_k(x^i, y^i, \mathbf{W}, \mathbf{b})|^2 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{bc} = & \frac{1}{N_u} \sum_{k=1}^{N_u} |u(x^i, y^i, \mathbf{W}, \mathbf{b}) - u_{bc}^i|^2 + \\ & \frac{1}{N_v} \sum_{k=1}^{N_v} |v(x^i, y^i, \mathbf{W}, \mathbf{b}) - v_{bc}^i|^2 + \\ & \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} |p(x^i, y^i, \mathbf{W}, \mathbf{b}) - p_{bc}^i|^2 \end{aligned} \quad (5)$$

式中: α 为惩罚系数; N_e 表示控制方程数; N_r, N_u, N_v 和 N_p 分别表示内部残差点数、 x 方向速度 u 的边界点数、 y 方向速度 v 的边界点数和压力 p 的边界点数; u_{bc}^i, v_{bc}^i 和 p_{bc}^i 为边界点处对应的 x 方向速度、 y 方向速度和压力。

上述这种将边界条件以数据误差的形式添加到损失函数中,构建有约束优化损失函数的方式称之为“软”边界条件。以这种“软”方式构建的损失函数进行训练主要有两种弊端。一是该损失函数中 α 的大小会对 PINN 的预测性能产生严重影响。若 α 较小则会导致 PINN 预测结果可以很好地满足控制方程,但是却不能精确满足边界条件,致使计算结果不准确,反之亦然;而通常惩罚系数的选择只能依靠经验和反复尝试。二是在求解具有复杂几何结构的问题时,特别是边界发生突变的问题时,“软”方式不能精准施加边界条件, PINN 在计算时难以预测边界的形状规律,导致最终的计算误差较大。

为规避以上两种弊端,本研究采用“硬”边界条件进行计算。“硬”边界条件是通过利用边界条件和距离函数强制使 PINN 满足相应的边界条件。“硬”边界 PINN 的输出变量可由下列公式表示^[16]

$$u = u_{bc}[1 - d(x, y)] + d(x, y)u_{NN} \quad (6)$$

$$v = v_{bc}[1 - d(x, y)] + d(x, y)v_{NN} \quad (7)$$

$$p = p_{bc}[1 - d(x, y)] + d(x, y)p_{NN} \quad (8)$$

式中: u, v 和 p 为“硬”边界 PINN 的输出变量; u_{NN}, v_{NN} 和 p_{NN} 为 FCNN 的直接输出变量; u_{bc}, v_{bc} 和 p_{bc} 为给定的第一类边界条件; $d(x, y)$ 为与点 (x, y) 到边界的距离有关的连续光滑函数,当点 (x, y) 在边界上时 $d(x, y) = 0$, 当点 (x, y) 远离边界时 $d(x, y) \neq 0$, 且越远离边界其值也越大。

以这种“硬”方式施加边界条件可以实现 PINN 对边界上值的零误差预测,因此相较于“软”边界可以有效提升计算精度。与此同时,“硬”边界 PINN 的损失函数无需边界条件损失,因此可在一定程度上加速训练过程。用于求解二维稳态不可压缩层流流动问题的“硬”边界物理信息神经网络框架如图 1 所示,其损失函数如下式所示

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_e \quad (9)$$

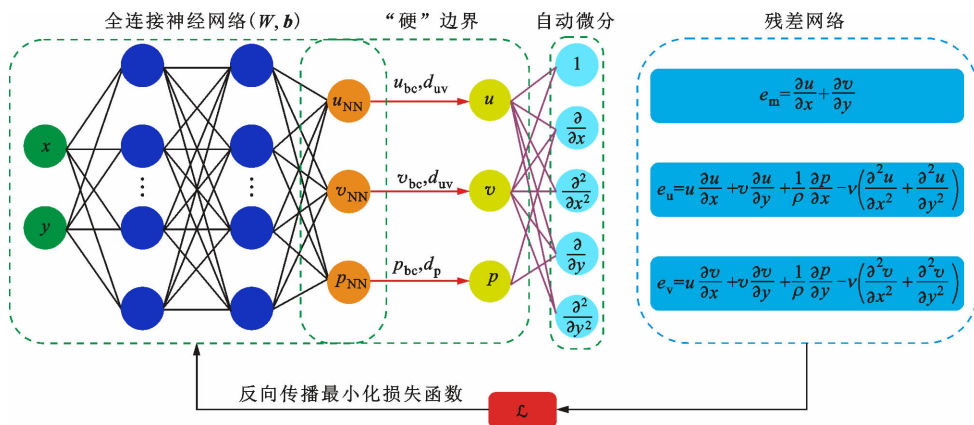


图 1 “硬”边界物理信息神经网络框架示意图

Fig. 1 Schematic of the framework of the “hard” boundary physics informed neural network

其中

$$\mathcal{L}_c = \frac{1}{N_r} \sum_{k=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_r} |e_k(x^i, y^i, \mathbf{W}, \mathbf{b})|^2 \quad (10)$$

1.3 HLPINN 框架

在利用 HPINN 求解流动问题时,由于式(2)中存在高阶导数,因此损失函数中的控制方程损失($\mathcal{L}_c$)部分较为复杂。复杂的损失函数不利于优化,进而会严重拖慢 HPINN 的训练速度。为简化损失函数形式,构造易于优化的损失函数,保持连续性方程不变,将 N-S 方程转换成低阶导数形式

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (11)$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla \cdot \left(\frac{\rho}{\rho} \mathbf{I} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (12)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \nu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (13)$$

式中: $\boldsymbol{\sigma}$ 为柯西应力张量。

变换形式后,控制方程导数项的最高阶数由二阶降为一阶。利用式(11)、(12)和(13)构建的 PINN,由于其损失函数只包含一阶导数,训练过程中的反向传播过程被加速,因此可以大幅节省训练时间。同时,边界条件也采用“硬”方式施加。这种新型 PINN 框架称之为“硬”边界低阶导数型物理信息神经网络框架(“hard” boundary low-order derivative PINN, HLPINN)。

以求解二维稳态不可压缩层流问题为例, HLPINN 的输入变量仍是空间变量(x, y),输出变量则变为($u, v, p, \boldsymbol{\sigma}$)。与 HPINN 相同, HLPINN 的损失函数也只包含控制方程损失,只是控制方程变成了低阶导数的形式。HLPINN 的激活函数、初始化方法和优化策略均与 HPINN 保持一致。用于求解二维稳态不可压缩层流问题的“硬”边界低阶导数型物理信息神经网络框架示意图如图 2 所示。本

文虽只以二维稳态流动问题为例建立 HLPINN 框架,但是该框架也可非常方便地拓展用于解决更为复杂的问题。例如对于三维非稳态流动问题来说, FCNN 输入变量为时空变量(x, y, z, t),输出变量需增加 z 方向的速度和相应的应力分量,然后将三维非稳态问题的控制方程嵌入残差网络。最后,将初始条件以数据误差的形式添加到损失函数中即可完成构建求解三维非稳态流动问题的 HLPINN 框架。

2 结果与讨论

变截面管道(截面扩张和收缩)在工业生产过程中应用广泛,例如工业输送管道及管道的阀门连接处;在生物医学工程领域也很普遍,例如狭窄的血管和患有动脉瘤的血管。基于深度学习框架 TensorFlow,本文应用所提出的 HLPINN 和 HPINN 框架对变截面管道内的流动进行数值模拟,以探究两种框架求解流动问题的有效性,并比较 HLPINN 相对于 HPINN 对神经网络训练加速的能力。

为比较 HLPINN 和 HPINN 数值模拟的精确性,本研究采用 HLPINN 和 HPINN 求得的解与 CFD 方法求得解的相对误差 L_2 进行比较,其计算公式如下

$$L_2 = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N \|\varphi_{\text{PINN}}^i - \varphi_{\text{CFD}}^i\|^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \|\varphi_{\text{CFD}}^i\|^2}} \quad (14)$$

式中: φ_{PINN}^i 为 PINN 的预测值; φ_{CFD}^i 为 CFD 方法得到的参考值,本研究的参考值均由商用软件 COMSOL Multiphysics 5.5 计算得到; N 为计算误差时

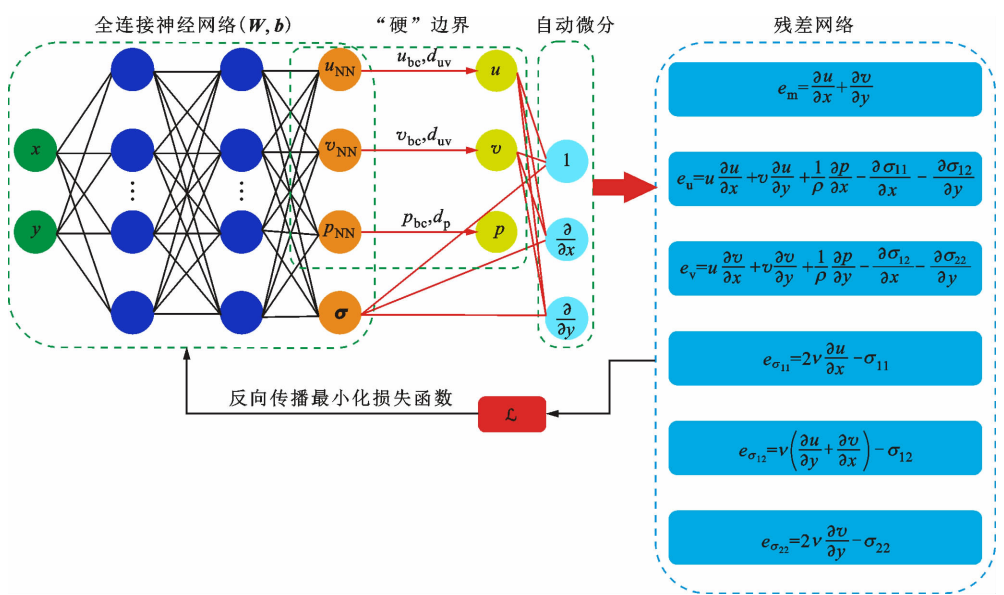


图 2 “硬”边界低阶导数型物理信息神经网络框架示意图

Fig. 2 Schematic of the framework of the “hard” boundary low-order derivative physics informed neural network

选用的参考数据点总数。

本文变截面管道的截面半径可由下式表示^[16]

$$R = R_0 \pm \omega (2\pi\delta^2)^{-1/2} e^{-(x-\lambda)^2/2\delta^2} \tag{15}$$

式中:截面扩张时±取正号,反之取负号; R_0 为管道入口半径,固定为 0.1 m; ω 为与截面变化程度有关的参数,其值越大则截面越宽或越窄,固定为 0.005 m^2 ; λ 为截面变化峰值点的位置,固定为 0.5 m; δ 为影响截面变化陡度的参数,固定为 0.1 m。

2.1 截面扩张管道内的流动

2.1.1 数值模拟的精确性研究

本节应用 HLPINN 和 HPINN 对截面扩张管道的流动问题进行求解。管道长度为 1 m,截面半径由式(15)表示。流体的密度 $\rho=1 \text{ kg/m}^3$,运动黏度 $\nu=0.01 \text{ m}^2/\text{s}$,管道入口处施加抛物线型速度边界条件,具体可由下式描述

$u(0,y) = u_0(R_0 - y)(R_0 + y)/R_0^2$ (16)

式中: $u_0=1 \text{ m/s}$,可保证流动为层流。出口压力为 0,壁面无滑移。用于施加速度和压力边界条件的距离函数可分别表示如下

$$d_{uv} = 10x(R^2 - y^2) \tag{17}$$
$$d_p = -x^2 + 1 \tag{18}$$

由式(17)和(18)可见, d_{uv} 仅在入口和壁面处函数值为 0,满足施加速度边界条件的要求。 d_p 仅在出口处函数值为 0,满足施加压力边界条件的要求。

首先研究不同神经网络大小(隐藏层数×每层神经元数)对 HLPINN 和 HPINN 模拟精确性的影响,以期找到表现最佳的神经网络。计算过程中采

用拉丁超立方抽样方法从计算区域内抽取 $N_r=5\,904$ 个残差点,并对壁面附近加密。优化策略为先采用学习率为 0.001 的 Adam 算法进行 30 000 步计算,紧接着采用 L-BFGS-B 算法进行 5 000 步计算。所有训练均在同一计算平台(NVIDIA GeForce GTX 1660 GPU, Windows 10 Pro)上完成,每个算例进行 3 次重复计算。截面扩张工况下不同大小的 HLPINN 和 HPINN 预测的 x 方向速度 u 的相对误差 L_2 如表 1 所示。

表 1 截面扩张工况下不同大小的 HLPINN 和 HPINN 预测的 x 方向速度 u 的相对误差 L_2

Table 1 Relative L_2 errors of x -direction velocity u predicted with HLPINN and HPINN of various sizes under the condition for expanding cross-section

神经 元数	$L_2/\%$			
	6 层		8 层	
	HLPINN	HPINN	HLPINN	HPINN
50	0.97	0.29	0.56	0.29
60	1.11	0.29	0.93	0.29
70	0.88	0.29	0.64	0.29
80	1.02	0.29	0.57	0.29
90	0.83	0.29	0.68	0.29
100	0.76	0.29	0.53	0.29

由表 1 可知,所选 12 种不同大小的 HPINN 均能精确模拟截面扩张管道内的 x 方向速度 u ,并且将相对误差 L_2 控制在 0.29% 左右。相比之下,

HLPINN 的误差比 HPINN 的略大,但是也保持在同一数量级。在所有算例中,HLPINN 的最大误差仅为 1.11%,表明其能精确模拟管道内的速度分布。HLPINN 大小为 8×100 时的误差最小,下文选用 8×100 的 HLPINN 和 HPINN 的计算结果做进一步讨论。

图 3(a)、3(b)和 3(c)分别为 CFD、HLPINN 和 HPINN 模拟得到的流场情况。由图 3 可见,HLPINN 和 HPINN 对流场的模拟结果与 CFD 结果高度一致。这说明两种框架均能精确模拟管道内流场情况。

图 4(a)和 4(b)分别给出了由 HLPINN、HPINN 和 CFD 预测的截面 $x=0.5\text{ m}$ 处的 x 、 y 方向速度曲线和沿通道中心线($y=0\text{ m}$)的压力分布。曲线表明两种框架均可精确模拟截面扩张处流体的 x 、 y 方向速度分布以及管道内的非线性压降。

2.1.2 HLPINN 的加速性能研究

为深入研究 HLPINN 的训练加速效果,对比了不同大小 HLPINN 和 HPINN 完成训练所需的时间。物理模型及边界条件、残差点数,优化策略与 2.1.1 小节中的相同。截面扩张工况下不同大小 HLPINN 和 HPINN 的训练时间如图 5 所示。

由图 5 可见,随着神经网络增大,两种框架的训练时间均随之增加。这是由于当神经网络增大时,其训练所需计算的参数增多导致的。另外,对比曲线可以发现,HLPINN 的训练时间比同等大小的 HPINN 明显大幅缩短,这说明 HLPINN 对训练过程的加速效果极佳。具体来看,当神经网络大小分别为 6×50 、 6×60 、 6×70 、 6×80 、 6×90 和 6×100 时,HLPINN 的训练时间比 HPINN 分别减少了 68.39%、68.24%、66.19%、65.63%、65.97% 和 63.72%,平均减少了 66.36%。同样,当神经网络大

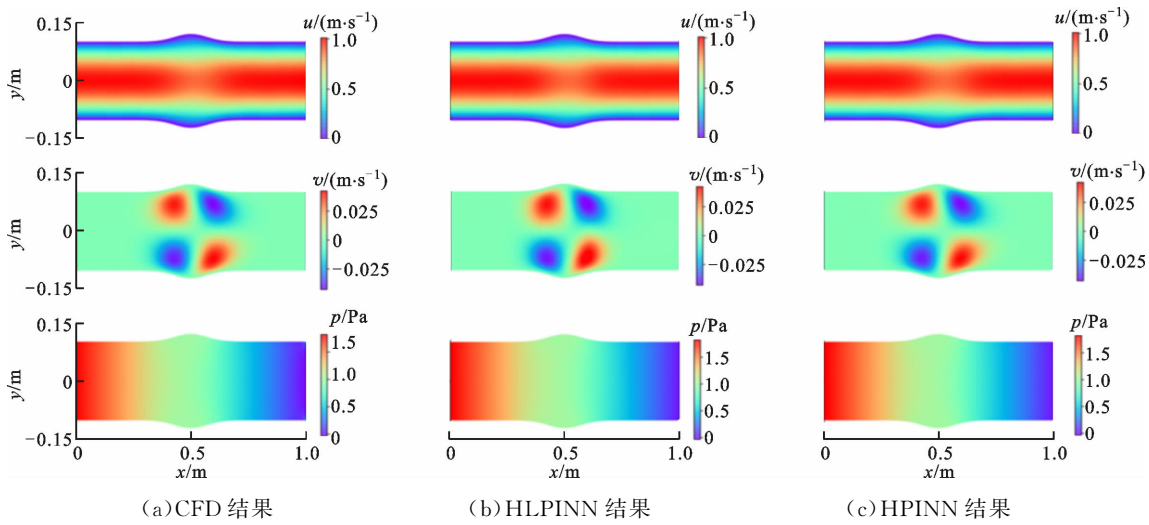


图 3 截面扩张管道内流动的 x 方向速度 u 、 y 方向速度 v 和压力 p 云图

Fig. 3 x -direction velocity u , y -direction velocity v and pressure p contours of the flow in pipes with expanding cross-section

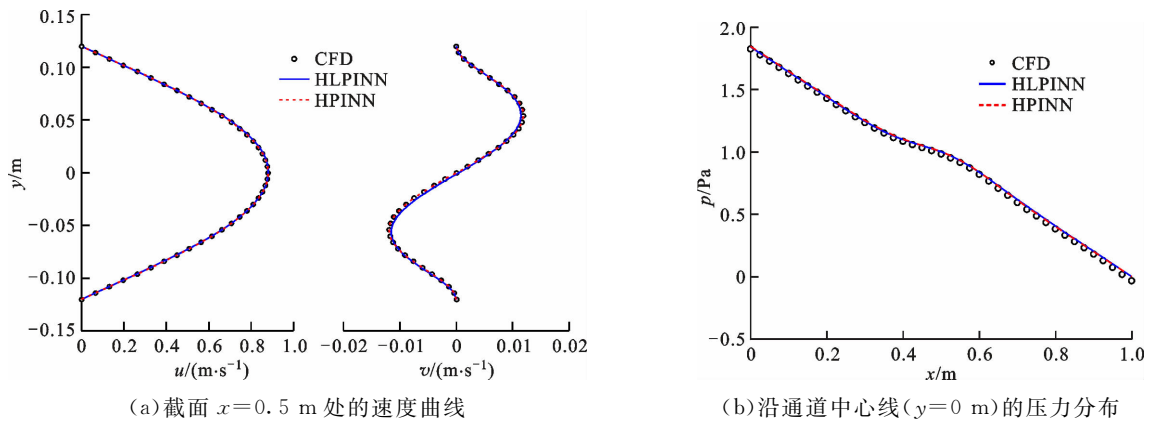


图 4 截面扩张管道内不同截面处的速度和压力曲线

Fig. 4 Velocity and pressure profiles at various cross sections in pipes with expanding cross-section

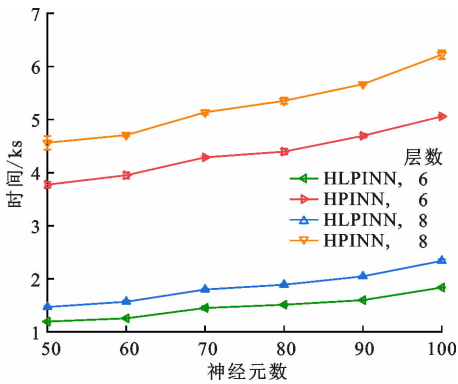
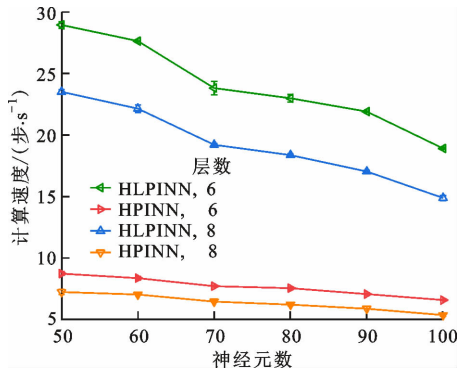


图 5 截面扩张工况下不同大小 HLPINN 和 HPINN 的训练时间

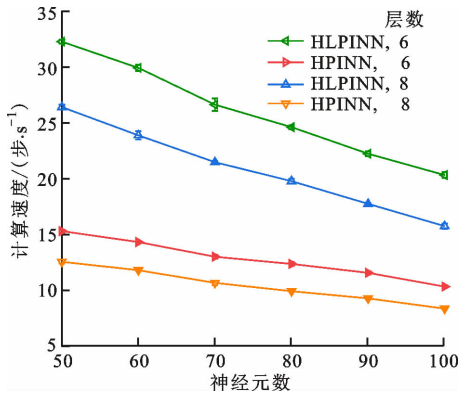
Fig. 5 Training time of HLPINN and HPINN of different sizes under the condition for expanding cross-section

小分别为 8×50 、 8×60 、 8×70 、 8×80 、 8×90 和 8×100 时,训练时间分别减少了 67.23%、66.71%、65.00%、64.73%、63.89% 和 62.43%,平均减少了 65.00%。

为进一步研究 HLPINN 加速效果对优化算法的依赖性,比较了 Adam 和 L-BFGS-B 两种优化算法的平均计算速度,如图 6 所示。由图 6 可见,基于先前同样的原因,两种算法的计算速度均随神经网络的增大而降低。对比曲线可以明显发现,两种算法对 HLPINN 的计算速度比同等大小的 HPINN 要快很多。这说明 HLPINN 对两种算法均有明显的加速效果。具体来看,当隐藏层数为 6 时,Adam 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度分别提高了 232.14%、231.13%、209.45%、205.27%、210.61% 和 187.96%,平均提高了 212.76%;L-BFGS-B 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度分别提高了 110.55%、108.63%、104.37%、98.72%、91.85% 和 96.23%,平均提高了 101.72%。类似地,当隐藏层数为 8 时,Adam 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度平均提高了 200.89%;L-BFGS-B 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度平均提高了 98.41%。可见,HLPINN 的加速效果明显依赖于优化算法,即 Adam 算法的加速幅度明显高于 L-BFGS-B 算法。然而,对于相同大小的同种神经网络,L-BFGS-B 算法的计算速度却比 Adam 算法快,因此在制定优化策略时可以适当减少 Adam 的迭代步数,并相应增加 L-BFGS-B 的迭代步数以减少训练时间。



(a) Adam 算法



(b) L-BFGS-B 算法

图 6 截面扩张工况下两种优化算法对不同大小 HLPINN 和 HPINN 的平均计算速度

Fig. 6 Average speed of two optimization algorithms in calculating HLPINN and HPINN with different sizes under the condition for expanding cross-section

2.2 截面收缩管道内的流动

2.2.1 数值模拟的精确性研究

本节应用 HLPINN 和 HPINN 对截面收缩管道内的流动问题进行求解。管道长度为 1 m,截面半径由式(15)表示。流体的物性和管道的边界条件与 2.1.1 节中相同。用于施加速度和压力边界条件的 d_{uv} 、 d_p 与式(17)、(18)相同。

同样,首先研究不同神经网络大小对 HLPINN 和 HPINN 模拟精确性的影响。残差点数 $N_r = 5\,700$,优化策略仍为二段式优化,只是 L-BFGS-B 算法的计算步数调整为 8 000。截面收缩工况下不同大小 HLPINN 和 HPINN 预测的速度 u 的相对误差 L_2 如表 2 所示。

由表 2 可知,截面收缩工况下所选 12 种不同大小的 HPINN 均能将速度 u 的相对误差 L_2 控制在 0.27% 左右。HLPINN 的计算精度虽然比 HPINN

的低,但是已经可以满足大部分实际需求。最佳的网络大小仍为 8×100 。

图 7(a)、7(b)和 7(c)分别为 CFD、HLPINN 和 HPINN 对管道内流场的模拟情况。速度、压力云图表明两种神经网络框架均能精确模拟截面收缩管道内的流场情况。

图 8(a)和 8(b)分别给出了由 HLPINN、HPINN、CFD 预测的截面 $x=0.5\text{ m}$ 处的 x 、 y 方向速度曲线和沿通道中心线($y=0\text{ m}$)的压力分布。可见,由于截面收缩处流动非线性增强,且 y 方向速度本身数值较小,HLPINN 对截面收缩处 y 方向速度的预测结果与 CFD 和 HPINN 结果相比有些许偏差,但是其对截面收缩处 x 方向速度分布以及管道沿程非线性压降的预测结果极为准确。

表 2 截面收缩工况下不同大小 HLPINN 和 HPINN 预测的速度 u 的相对误差 L_2

Table 2 Relative L_2 errors of u predicted with HLPINN and HPINN of various sizes under the condition for contracting cross-section

神经 元数	$L_2/\%$			
	6 层		8 层	
	HLPINN	HPINN	HLPINN	HPINN
50	1.01	0.27	0.58	0.27
60	1.01	0.27	0.73	0.27
70	0.93	0.27	0.60	0.27
80	0.79	0.27	0.53	0.27
90	0.87	0.27	0.47	0.27
100	0.62	0.27	0.41	0.27

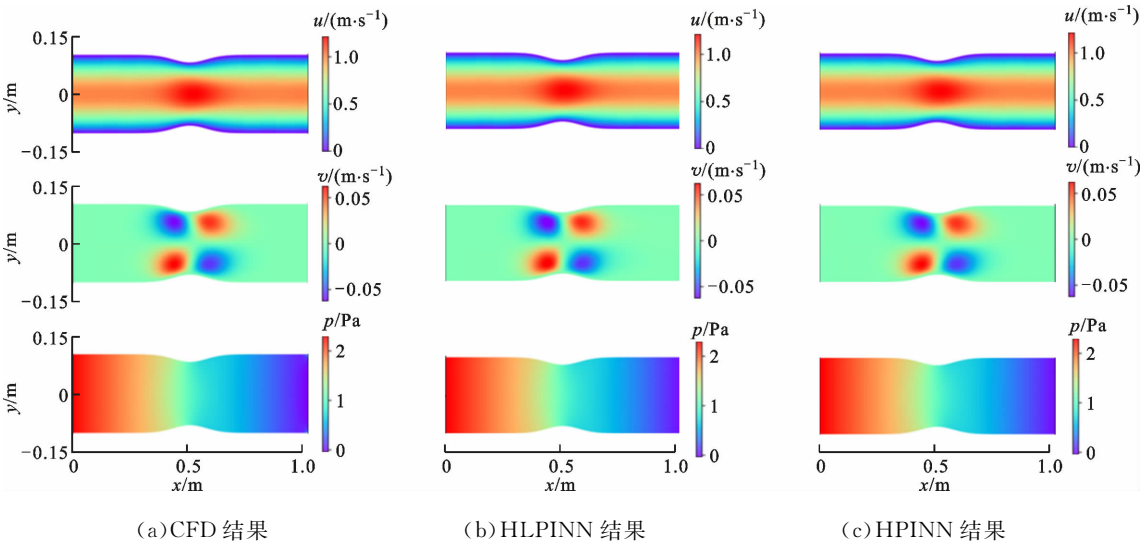


图 7 截面收缩管道内流动的 x 方向速度 u 、 y 方向速度 v 和压力 p 云图

Fig. 7 x -direction velocity u , y -direction velocity v and pressure p contours of the flow in pipes with contracting cross-section

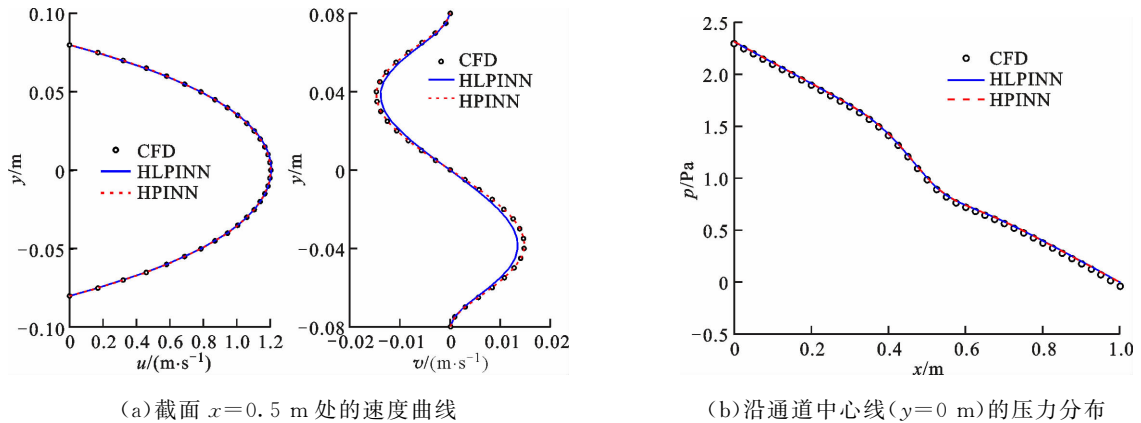


图 8 截面收缩管道内不同截面处的速度和压力曲线

Fig. 8 Velocity and pressure profiles at various cross sections in pipes with contracting cross-section

2.2.2 HLPINN 的加速性能研究

截面收缩工况下不同神经网络大小 HLPINN 和 HPINN 的训练时间对比如图 9 所示。物理模型及边界条件、残差点数、优化策略与 2.2.1 节中的相同。

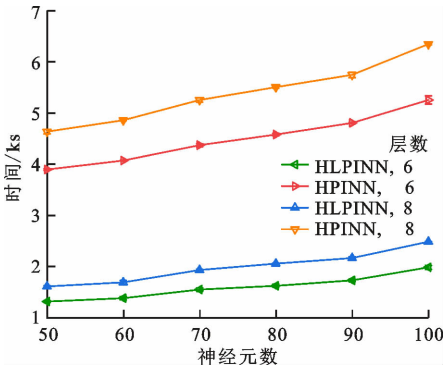
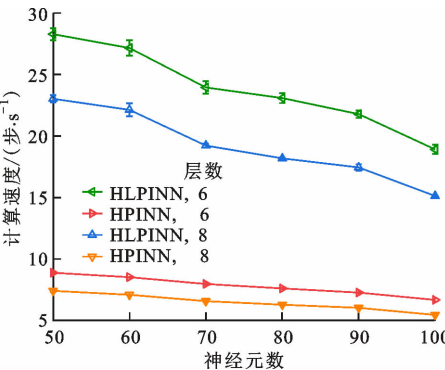


图 9 截面收缩工况下不同大小 HLPINN 和 HPINN 的训练时间对比

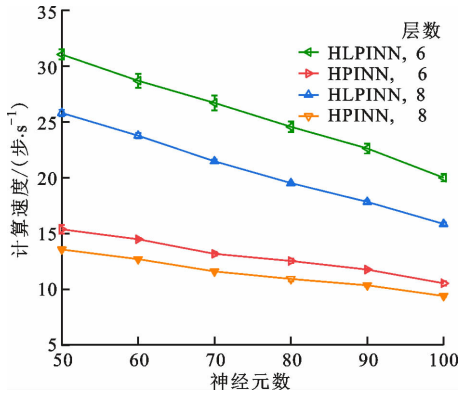
Fig.9 Training time of HLPINN and HPINN of different sizes under the condition for contracting cross-section

由图 9 可见,HLPINN 在截面收缩工况下同样可以加速训练过程。当隐藏层数为 6 时,HLPINN 的训练时间比 HPINN 平均减少了 64.29%。当隐藏层数为 8 时,训练时间平均减少了 63.22%。

截面收缩工况下,Adam 和 L-BFGS-B 两种优化算法对 HLPINN 和 HPINN 的平均计算速度分别如图 10 (a) 和 10 (b) 所示。由图 10 可见,HLPINN 加速效果仍显著依赖于算法的种类。当隐藏层数为 6 时,Adam 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度平均提高了 204.09%;L-BFGS-B 算法对 HLPINN 的计算速度较其对 HPINN 的计算速度平均提高了 96.31%。当隐藏层数为 8 时,Adam 算法的计算速度平均提高了 195.29%;L-BFGS-B 算法的计算速度平均提高了 79.84%。



(a) Adam 算法



(b) L-BFGS-B 算法

图 10 截面收缩工况下两种优化算法对不同大小 HLPINN 和 HPINN 的平均计算速度

Fig.10 Average speed of two optimization algorithms in calculating HLPINN and HPINN with different sizes under the condition for contracting cross-section

2.3 距离函数对 HLPINN 的影响

为探究施加“硬”边界条件时,距离函数特性对 HLPINN 求解流动问题的影响,本节对比了几种不同速度边界条件距离函数得到的速度 u 的相对误差 L_2 、训练时间及计算速度。选取的距离函数如下

$$d_1 = 10x(R^2 - y^2) \tag{19}$$

$$d_2 = 1\,000x(R^2 - y^2) \tag{20}$$

$$d_3 = 0.1x(R^2 - y^2) \tag{21}$$

$$d_4 = 10\,000x(R^2 - y^2) \tag{22}$$

$$d_5 = 0.01x(R^2 - y^2) \tag{23}$$

$$d_6 = \min(x, R - |y|) \tag{24}$$

$$d_7 = \begin{cases} 0, & x(R^2 - y^2) = 0 \\ 1, & x(R^2 - y^2) > 0 \end{cases} \tag{25}$$

上述距离函数中,函数 $d_2 \sim d_5$ 形式与 d_1 相似,只是函数值域被扩大或缩小。 d_6 的值域与 d_1 相近,但是不如 d_1 平滑。 d_7 则为一种极端情况,函数在边界上时值为 0,反之则为 1。利用上述距离函数施加速度边界条件求得的截面扩张和收缩管道内的流体速度 u 的相对误差 L_2 以及相应的训练时间和计算速度如表 3 所示。在训练过程中,物理模型及边界条件、残差点数、优化策略分别与 2.1.1 和 2.2.1 小节中的保持一致,选用的 HLPINN 大小均为 8×100 。

分析表 3 可知,对于截面扩张和收缩两种工况,用 d_2 和 d_3 施加边界条件求得的误差比 d_1 的略大;用 d_4 和 d_5 施加边界条件求得的误差比 d_2 和 d_3 的更大,这说明当函数形式相似时,函数的值域对计算

误差有很大的影响。 d_6 的误差比 d_1 的略大,这主要是因为函数 d_6 不如 d_1 平缓。若用 d_7 施加边界条件则无法顺利求解,这主要是因为 d_7 不连续。另外,对比 $d_1 \sim d_6$ 的训练时间和计算速度可以发现,

表 3 不同距离函数下 HLPINN 的速度 u 的相对误差 L_2 、训练时间及优化算法的计算速度
Table 3 Relative L_2 error of u , training time and speed of optimization algorithms for HLPINN with different distance functions

距离 函数	$L_2/\%$		训练时间/s		Adam 速度/(步 $\cdot$ s $^{-1}$)		L-BFGS-B 速度/(步 $\cdot$ s $^{-1}$)	
	截面扩张	截面收缩	截面扩张	截面收缩	截面扩张	截面收缩	截面扩张	截面收缩
d_1	0.53	0.41	2 371.3	2 489.4	14.64	15.10	15.72	15.90
d_2	2.09	1.45	2 367.5	2 471.4	14.61	15.19	15.71	16.12
d_3	1.70	2.00	2 391.3	2 470.5	14.47	15.17	15.69	16.22
d_4	25.50	124.77	2 327.5	2 113.1	14.89	15.16	15.98	16.36
d_5	3.54	11.35	2 335.3	2 537.1	14.84	14.75	15.94	15.90
d_6	0.89	0.48	2 354.1	2 486.5	14.72	15.08	15.81	16.10
d_7	106.74	104.66	1 924.4	1 877.7	15.64	15.99	16.28	0.83

3 结 论

本文基于 HPINN 提出了用于求解稳态不可压缩层流流动问题的 HLPINN。利用 HLPINN 和 HPINN 对截面变化管道内的流动进行了数值模拟,并系统比较了两者的训练时间、计算速度和计算精度,得到如下结论。

(1)HLPINN 和 HPINN 均能精确模拟截面扩张和收缩管道内的流场分布,但是 HLPINN 的整体计算精度略低于 HPINN。对于截面扩张工况,HPINN 和 HLPINN 预测速度 u 的相对误差 L_2 分别低至 0.29% 和 0.53%;对于截面收缩工况,HPINN 和 HLPINN 预测速度 u 的相对误差 L_2 分别低至 0.27% 和 0.41%。

(2)HLPINN 相较于 HPINN 可以加速训练过程,减少训练时间。对于截面扩张和收缩两种工况,HLPINN 的训练时间相较于同等大小的 HPINN 减少超 60%。HLPINN 可对两种优化算法实现不同程度的加速,对于 Adam 算法可以提速超过 200%,对于 L-BFGS-B 算法则可提速 90% 左右。

(3)施加“硬”边界条件的距离函数的形式和值域对计算误差影响很大。研究发现,距离函数必须是连续光滑函数且值域需在合理范围内,但是距离函数对训练时间及计算速度的影响甚微。

除了流体力学(动量传递)问题,HLPINN 还有望用于求解热量及质量传递问题。

参考文献:

[1] 吴立明,王雷,刘小民,等. 仿海鸥翼型动静态气动

距离函数对训练时间和计算速度影响甚微。截面扩张工况下 d_7 和截面收缩工况下 d_4 、 d_7 的训练时间短是由于训练发生病态,损失函数无法继续下降,L-BFGS-B 算法自动停止计算导致的。

特性的数值模拟 [J]. 西安交通大学学报, 2020, 54(12): 88-97.

WU Liming, WANG Lei, LIU Xiaomin, et al. Numerical simulation on the static and dynamic aerodynamic characteristics of bionic seagull airfoil [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2020, 54(12): 88-97.

[2] 韩馨仪,赵松松,刘斌,等. 分体式空调室内气流组织 CFD 仿真优化 [J]. 制冷与空调, 2021, 21(11): 41-45.

HAN Xinyi, ZHAO Songsong, LIU Bin, et al. CFD simulation optimization of indoor air distribution in split air conditioner [J]. Refrigeration and Air-Conditioning, 2021, 21(11): 41-45.

[3] 樊桦,吴东垠. 烟气挡板流动特性的数值模拟 [J]. 西安交通大学学报, 2021, 55(2): 93-99.

FAN Hua, WU Dongyin. Numerical simulation of the flow characteristics of a flue gas damper [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2021, 55(2): 93-99.

[4] 胡其会,张鸣远,李景银,等. 轴流式血泵水动力特性和生物相容性的数值模拟 [J]. 西安交通大学学报, 2011, 45(8): 118-122.

HU Qihui, ZHANG Mingyuan, LI Jingyin, et al. Numerical simulation for hydrodynamics and biocompatibility in an axial blood pump [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2011, 45(8): 118-122.

[5] TRIPATHY R K, BILIONIS I. Deep UQ: learning deep neural network surrogate models for high dimensional uncertainty quantification [J]. Journal of Computational Physics, 2018, 375: 565-588.

[6] ZHU Yin hao, ZABARAS N. Bayesian deep convolu-

- tional encoder-decoder networks for surrogate modeling and uncertainty quantification [J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 366: 415-447.
- [7] JIN Xiaowei, CHENG Peng, CHEN Wenli, et al. Prediction model of velocity field around circular cylinder over various Reynolds numbers by fusion convolutional neural networks based on pressure on the cylinder [J]. *Physics of Fluids*, 2018, 30(4): 047105.
- [8] 谢晨月, 王建春, 万敏平, 等. 基于人工神经网络的可压缩湍流大涡模拟模型 [J]. *航空学报*, 2021, 42(9): 145-160.
- XIE Chenyue, WANG Jianchun, WAN Minping, et al. Artificial neural network model for large-eddy simulation of compressible turbulence [J]. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2021, 42(9): 145-160.
- [9] KIM J, LEE C. Prediction of turbulent heat transfer using convolutional neural networks [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, 882: A18.
- [10] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed deep learning: part I data-driven solutions of nonlinear partial differential equations [EB/OL]. [2022-03-13]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1711.10561>.
- [11] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.
- [12] JIN Xiaowei, CAI Shengze, LI Hui, 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.
- [13] 侯龙锋, 朱兵, 张伟. 基于 PINN 神经网络算法的低雷诺数下槽道流模拟方法 [C]//第三十一届全国水动力学研讨会论文集: 上册. 北京: 法律出版社, 2020: 1037-1044.
- [14] CAI Shengze, WANG Zhicheng, WANG Sifan, et al. Physics-informed neural networks for heat transfer problems [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2021, 143(6): 060801.
- [15] CAI Shengze, WANG Zhicheng, FUEST F, et al. Flow over an espresso cup: inferring 3-D velocity and pressure fields from tomographic background oriented Schlieren via physics-informed neural networks [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2021, 915: A102.
- [16] SUN Luning, GAO Han, PAN Shaowu, et al. Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 361: 112732.
- [17] BERG J, NYSTRÖM K. A unified deep artificial neural network approach to partial differential equations in complex geometries [J]. *Neurocomputing*, 2018, 317: 28-41.
- [18] 陆至彬, 瞿景辉, 刘桦, 等. 基于物理信息神经网络的传热过程物理场代理模型的构建 [J]. *化工学报*, 2021, 72(3): 1496-1503.
- LU Zhibin, QU Jinghui, LIU Hua, et al. Surrogate modeling for physical fields of heat transfer processes based on physics-informed neural network [J]. *CIESC Journal*, 2021, 72(3): 1496-1503.
- [19] ZHU Qiming, LIU Zeliang, YAN Jinhui. Machine learning for metal additive manufacturing: predicting temperature and melt pool fluid dynamics using physics-informed neural networks [J]. *Computational Mechanics*, 2021, 67(2): 619-635.
- [20] RAO Chengping, SUN Hao, LIU Yang. Physics-informed deep learning for incompressible laminar flows [J]. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2020, 10(3): 207-212.
- [21] LAUBSCHER R, ROUSSEAU P. Application of a mixed variable physics-informed neural network to solve the incompressible steady-state and transient mass, momentum, and energy conservation equations for flow over in-line heated tubes [J]. *Applied Soft Computing*, 2022, 114: 108050.
- [22] BAYDIN A G, PEARLMUTTER B A, RADUL A A, et al. Automatic differentiation in machine learning: a survey [J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2018, 18(153): 1-43.
- [23] GLOROT X, BENGIO Y. Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks [C]// *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. Chia Laguna Resort, Sardinia, Italy: PMLR, 2010: 249-256.
- [24] KINGMA D P, BA J. Adam: a method for stochastic optimization [EB/OL]. [2022-03-13]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1412.6980>.
- [25] KESKAR N, WÄCHTER A. A limited-memory quasi-Newton algorithm for bound-constrained non-smooth optimization [J]. *Optimization Methods and Software*, 2019, 34(1): 150-171.

(编辑 武红江 亢列梅)