

基于物理深度学习的微气泡系统动力学预测

翟晗锋^{*}, 胡国辉[†]

上海大学 力学与工程科学学院, 上海 200072

摘要 微气泡流动在生物医学领域有广泛应用和研究, 涉及复杂力学问题。为研究微流体气泡运动, 本文设定两算例: (1) 微管道中单气泡流动变形, (2) 微气泡群流动过程。相关参数基于生物学应用背景给出。仿真结果显示单气泡流动变形形态为前段先外凸呈抛物线状, 尾端内凹, 直至附着气泡剥离气泡主体; 微气泡群会随着时间推进出现融合及剥离现象。对两算例, 我们对两相组分随时间变化分析, 印证算例中组分质量守恒, 并对产生误差原因进行分析。多相流数值模拟对计算精度需求高, 网格精度缺乏导致计算过程中某相流体出现组分丢失。因此, 数据驱动方法重构流场很有必要。基于物理神经网络 (PINN) 思路, 我们提出一种全新、可用于预测气泡动力学的神经网络结构 BubbleNet。该网络由两部分构成: 基本的深度神经网络 (DNN) 以及包含连续不可压条件的内置方程 (物理信息)。同时, 我们还引入了时间离散监督器, 以对流场数据进行时间离散化的归一化。我们分别用 DNN 和 BubbleNet 预测了单气泡在 $2000\mu\text{s}$ 和多气泡系统在 $1500\mu\text{s}$ 时刻物理场 (u, v, p, ϕ) 的分布。结果表明, BubbleNet 结构相较于传统的 DNN 可以以更小的迭代步数获得更高的预测精度。该算法具有潜在的工程应用前景。

关键词 机器学习; 物理神经网络; 多相流; 气泡动力学; 微流体

1 引言

机器学习是一个通过经验和数据, 可以自动提高程序性能的计算机算法(1)。随技术进步, 数据以前所未有速度增长(20-21)。基于海量数据, 机器学习算法得以发挥其预测能力。基于大数据的深度学习广受关注(22)。因 N-S 方程强非线性, 运用解析求解的方法只适用于特定问题。所以科学家们提出了各种离散方法对其进行数值求解。上世纪, 大量的计算方法, 如有限差分(36-37)、有限体积(38-42)、有限元(43)、光滑粒子(44-45)等方法得到快速发展。这些方法用不同格式和算法离散 N-S 方程, 其优势是物理信息准确, 方程确定。但是其缺点是计算格式复杂, 对于工程实际中的非线性问题往往难以同时兼顾计算速度和精度。

对不同物理问题, 计算科学研究人员开发了各种基于机器学习和数据驱动的计算物理算法。2016 年, Rudy *et al.* (46) 提出了通过数据驱动拟合物理控制方程的算法 (PDE-FIND), 颠覆了传统通过实验、经验和推理寻找物理控制方程的思路。2019 年, Raissi *et al.* (47-49) 提出了基于物理场数据驱动的神经网络 (Physics-Informed Neural

Network, PINN)。2020 年, 基于 PINN, Lu *et al.* 又提出了新的基于物理数据驱动的深度学习模型 DeepXDE, 用以求解偏微分方程控制的物理问题(50)。仿效 PDE-FIND 的思路, 并且基于 DeepXDE 的研究成果之上, 2020 年, Lu *et al.* (51) 提出利用深度神经网络可学习得到物理系统的控制方程的框架 DeepONet。同时, DeepONet 已被应用于生物学, 物理学等工程问题(52-54)。因 PINN 局限于特定物理问题, 2020 年, Li *et al.* (55) 提出了通过傅立叶神经算子 (Fourier Neural Operator, FNO), 即对空间映射进行学习的深度学习方法, 且具有快速高效和低误差的特点。基于前文提到的 CNN, 利用计算机视觉技术的物理深度学习模型也在近些年逐渐流行。2020 年, Jiang *et al.* (56) 提出了通过对三维场信息 (二维物理场随时间变化) 进行卷积学习, 可以实现模糊物理场的加密功能 (MeshfreeFlowNet)。实际上, 相关的物理深度学习模型近些年快速增长, 本节仅能简述其概貌。

多相流是一个经典流体力学问题(57)。它具有非常广泛的应用背景, 其中也涵盖大量的工程实际问题(58)。气泡流动常见于多相流研究和应用。

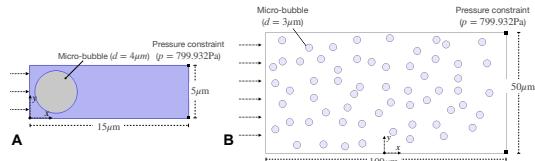


图 1 本文中对于单气泡和多气泡算例的建模示意图。**A.** 单气泡模型。**B.** 多气泡模型。

因气泡流有大量生物学和物理化学应用背景，已成为流体力学乃至生物物理领域中主要问题之一，其中针对管道气泡流研究众多。毛细管道内气泡的“剥离”现象 (Bubble Pinch-Off) 的理论与实验分析是该领域内最主流的问题之一 (60-64)。微气泡在管道中的运动可以广泛地应用于靶向输药 (65-66)，特别是血脑屏障药物输送的研究中 (67-69)。同时，因为多气泡系统的复杂性以及广泛的生物应用，多气泡群体动力学在不同物理场下气泡的相互作用表现出复杂性与随机性 (71-72)。因此，基于上述认识，在本文中作者针对两种情形下的管道流动进行研究，一种为微管道内部单气泡流动，其中计算模型参考了 Hosseinkhah *et al.* (69) 的工作。另一种为微管道内多气泡的系统动力学，计算模型参考了 Lea *et al.* (70) 提出的思路，即管道几乎完全充满液体，游离气体以小气泡的形式存在，并在液体中运动。

本文中，我们首先简概两气泡流算例：单气泡流动和气泡群流动的建模，相关参数给定方法、计算方法和仿真模拟计算结果分析以及结果验证。介绍利用普通深度神经网络预测气泡流的方法以及本文中提出的全新的可预测气泡流动的物理神经网络结 BubbleNet，以及两种神经网络预测结果分析。最后证明我们提出的学习框架的优越性。

2 气泡流的数值计算

本文共设置两算例：单气泡微管道流动和多气泡管道流。其中，我们研究单气泡管道流动的主要背景是（但不限于）血脑屏障中血管内气泡运动的研究 (67-69) 和红细胞的变形 (79-80)；计算模型主要参考 Hosseinkhah *et al.* (69) 的工作：单气泡被限制在管壁（血管壁）内运动。而多气泡模型则主要考虑（但不限于）组织液内多细胞运动 (81-82) 以及药物输运 (66)，计算模型参考 Talu *et al.* (66) 的实验以及 Lea *et al.* (70) 的工作。气泡流为两种

不同相的流体相互作用，满足流体力学控制方程 N-S 方程：

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1)$$

其中 ρ 为流体密度， \mathbf{u} 为速度矢量， p 是作用在流体上的压强， μ 是动力学粘度。

气泡流动涉及到气-液两相流体相互作用。我们令 ρ_l 为流体密度， ρ_g 为气体密度； μ_l 为流体粘度； μ_g 为气体粘度。他们的关系可以用相函数（水平集方法中为描述不同相的函数）进行描述：

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_l + \phi(\rho_g - \rho_l) \\ \mu &= \mu_l + \phi(\mu_g - \mu_l) \end{aligned} \quad (2)$$

在相函数 ϕ 的描述下，方程 (1) 可写为：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla \cdot \left(\epsilon_{ls} \nabla \phi - \phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (3)$$

其中左侧相用来表述界面运动、右侧相用来维持计算过程中数值稳定。 γ 决定了相函数的初始化和稳定过程，在本文中等于 1。 ϵ_{ls} 用来描述界面厚度等于最大网格大小。

流体力学的连续方程写为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

对于不可压缩流体，方程简化为 $\partial_y u + \partial_x v = 0$ ，即流体速度无散度， $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ 。我们的目的是将该条件放入神经网络的损失函数中。两相流界面的形貌特征可以用单位法向量表示： $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|_{\phi=0.5}$ 。而相函数的曲率写作 $\kappa_{ls} = -\nabla \cdot \mathbf{n}|_{\phi=0.5}$ 。为数值计算多相流，方程 (3) 在特定时空域上被网格离散，在给定初始和边界条件下求解。

如图1，对于单气泡模型：坐标原点定位微管道左下角处；管道左侧以 (2.5, 2.5) 为圆心，做一直径为 $4\mu\text{m}$ 的圆，为初始气泡。柱状管道设置长度为 $15\mu\text{m}$ ，直径为 $5\mu\text{m}$ 。基于前述对于血红细胞、组织细胞以及药物输运中油性气泡等的研究 (65-69; 71-72; 79-81)，我们发现，细胞与气泡大多直径处在几个微米量级，因此此处我们给定气泡直径 $d = 4\mu\text{m}$ ，以符合应用背景。轴向给定周期性边界条件，且管道进出两端压强差为 $\Delta p = 10\text{Pa}$ 。初始边界条件给为：初始速度为 0，初始压强给定为组织液压强 (83)：基于实验数据与过往研究，我们将初始压强设定为 6mmHg ，转换为国际标准单位后，

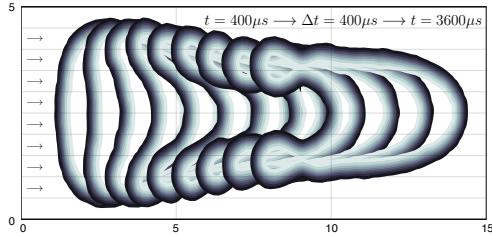


图2 单气泡在管道中的运动形态。

可给定: $p_0 = 799.932\text{Pa}$ 。同时, 我们将液体流出段两端设定两压强限制点, 压强依旧选为组织液压强 $p = 799.932\text{Pa}$ 。上下两端为管壁, 在多相流系统内设定为润湿壁, 液相流体与固壁的接触角设置为 $\pi/2$ 。气泡(气相材料)设为空气(Air), 流体(液相材料)设置为水(H_2O)。温度为室温(293.15K)。在本算例中我们采用系统定义的加密网格, 选用”Extra Fine”网格, 网格数为24812。

对于多气泡, 参考前一小节的应用设定, 我们在此也将气泡直径设定在 $1 \sim 5\mu\text{m}$ 内, 选定 $d = 3\mu\text{m}$ 。由前述工作(71-72), 我们知道, 生物体内气泡分布较为均匀和密集, 参考 Wang and Hu (85) 对于细胞内流体建模的工作。在生物力学环境中, 当气泡分布均匀时可以采用单向流处理多相流问题。因此, 在对多气泡系统进行建模时, 我们假设气泡密集地, 并且较为均匀地分布在流域内。设定管道长度为 $100\mu\text{m}$, 管壁直径为 $50\mu\text{m}$ 。坐标原点定为下管壁中点处。60个直径为 $3\mu\text{m}$ 的微气泡均匀分布在管道内部。参考上一小节, 初始条件给定 $p_0 = 799.932\text{Pa}$, 管道出口压力限制点 $p = 799.932\text{Pa}$ 。轴向给定周期性边界条件, 且压差 $\Delta p = 10\text{Pa}$ 。温度为室温(293.15K)。对于该算例, 我们设定多气泡系统计算 $3000\mu\text{s}$, 其中每 $1\mu\text{s}$ 输出一次结果。数值模拟采用 Level Set 和 Time-Dependent 计算方法。由于多气泡系统中每个气泡相对较小, 在整个算例中容易造成长时间计算致使组分丢失问题, 因此我们在该算例中给定网格为最密集等级(Extremely Fine), 网格数为75302。

单气泡计算后气泡运动形态如图2所示。图中从 $400\mu\text{s}$ 开始显示单气泡运动, 每隔 $400\mu\text{s}$ 记录气泡形态, 共记录九个气泡形态直至 $3600\mu\text{s}$ 。Tomaiuolo *et al.*(80)曾研究了流速为 1.12cm/s , 红细胞在 $6.6\mu\text{m}$ 的微管道中运动的情况。在我们的仿真中, 由定性分析可观测到, 在 $3600\mu\text{s}$ 时的单

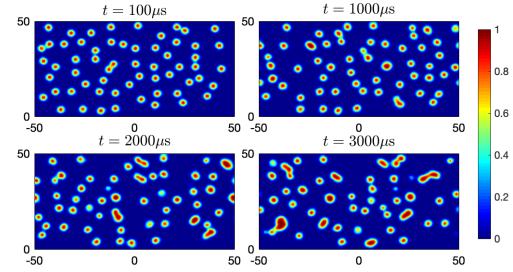


图3 多气泡流动随时间变化趋势。图片从 $100\mu\text{s}$ 开始至 $3000\mu\text{s}$ 记录了四个不同时刻多气泡流动面貌。

气泡变形与 Tomaiuolo *et al.*(80) 中单红细胞变形面貌基本一致。这在一定程度上验证了我们计算的准确性。

从图2中, 我们可以观测到单气泡运动变化形式。气泡左端背流处最先向内凹, 右端受微流动推动向右凸起, 呈抛物线状前进。随着时间推进, 左端界面受到流体剪切的作用, 内凹至形成一定空间形成两个尾端泡张力面。

在微流体环境中, 整个气泡前进造成的尾端两个附着“小气泡”的产生原因主要有二: 一是随着流体速度前进致使气泡产生的惯性; 二为微流体环境中流体的粘性和表面张力起到明显作用。二者共同作用下: 单气泡在微管道中前进时, 因气泡本身速度, 以及气液接触界面对气泡表面产生的“拖曳”效应, 使得单气泡变形的尾迹被拖出两个附着气泡。由前文所述, 单气泡该变形模式和 Tomaiuolo *et al.* (80) 实验中单血红细胞变形相似。但是因为气泡外表面仅为气-液界面表表面张力支持的, 所以很容易被“撕裂”, 使得附着小气泡被“剥离”。而 Tomaiuolo *et al.* 实验中红细胞却在流动过程中没有产生这一现象, 因为血红细胞因为外表面有生物膜, 生物膜本身具有弹性、韧性等力学性质, 故可以使得红细胞在微管道流动中保持完整形态。分析多气泡算例时, 我们采用和上一小节相同的分析方法。整个多气泡系统运动趋势如图3所示: 初始状态下60个微气泡均匀分布在流场各点, 至 $t = 900\mu\text{s}$ 时, 可观测到极个别气泡已经融合, 少量呈现融合趋势; 至 $t = 1500 \sim 1800\mu\text{s}$ 时, 可以看到已经有少部分气泡已经融合, 且分别对应 $t = 1500 \& 1800\mu\text{s}$ 两时刻, 我们也可观测到气泡的融合过程, 并且融合气泡还会产生更小的微气泡剥离现象。至 $t = 2100 \& 3000\mu\text{s}$ 时, 大部分

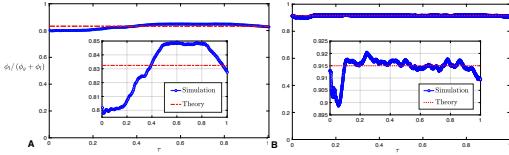


图4 对于两气泡流模型运算过程中气-液组分随时间的变化。

气泡已经发生了气泡间的碰撞和融合；在 $3000\mu\text{s}$ 我们观察到多气泡融合后的“大气泡”更易与周围微气泡产生新的融合。

多相流计算中对网格需求较高，可能因稀疏网格导致在计算迭代过程中相流体组分丢失，致使误差增大，使结果不可信。因此，我们选择较密网格进行数值模拟。但在结果分析时，我们仍需验证两相组分分布，以确保结果精准。图4展示了对单气泡算例气-液两相的组分在整个计算过程的变化情况。我们验证了气泡群动力学在计算过程中组分变化是否符合物理规律。图4展示了在整个气泡群运动过程中气-液组分比和理论标准值的对比。与上一小节采用同样方法，对计算所得相函数 ϕ ，取 $\phi \in [0.5, 1]$ 属于气相，取 $\phi \in [0, 0.5]$ 属于液相，记录所得组分随时间变化规律如图4中蓝色曲线所示。红色虚线为理论值，对应初始情况下液相在整体占比。对于单气泡算例理论值为 $\phi_l/(\phi_l + \phi_g) = 0.8324$ ，多气泡 $\phi_l/(\phi_l + \phi_g) = 0.915$ 。由图4可判断两算例误差符合误差范围。

3 机器学习

本文中，为了学习并预测气泡的运动，我们采用了有 9 个隐层，每隐层具有 30 个神经元的深度神经网络结构，如图5所示。为了能够预测气泡流场所具有的基本物理量，我们令需要被预测的 4 个物理量 $[u, v, p, \phi]$ 为神经网络的输出量作为监督，离散化后全时间步长的场数据 $[x, y, t]$ 为训练数据。此处，我们采用四个子神经网络分别预测对应物理场是基于 Lu *et al.* 在 DeepONet(51) 中利用 Branch Net 和 Trunk Net 两个子网络分别逼近空间域与时间域上的非线性算子思路启发。我们认为分别对物理参量进行逼近可以达到更高的准确度和效果。基本思路可以简单介绍为：定义深度神经网络函数；首先更新网络内部运算参数；设定损失函数为预测值和监督数据的差值；给定网

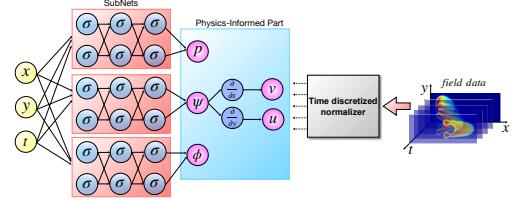


图5 我们提出的物理神经网络 BubbleNet 示意图；对于图片中的每个子网络训练采用 $[9 \times 30]$ 结构。利用自动求导通过潜在函数 ψ 可以计算出 u, v 。

络基本参数和优化器；开始网络计算：初始化网络，训练数据，预测数值。给定网络数据与迭代次数等基本参数。对于本文的两算例，我们设定单气泡算例迭代次数为 10000，多气泡算例迭代次数为 200000。对于给定优化器 L-BFGS-B，给定最大迭代次数为 500000。我们基于普通深度神经网络结构，提出了一种包含物理信息，并可以更精准预测多相流的神经网络 BubbleNet，其基本结构如图5所示。该种结构与前文中普通深度神经网络主要有两点不同：其一是，网络的输出不再是 4 个物理量，而是三个场函数 (p, ψ, ϕ) ，其中 (p, ϕ) 同上，而我们通过对流函数 ψ 进行求导，求得两个速度分量： $u = \partial_y \psi, v = -\partial_x \psi$ 。这样，我们通过预测流函数 ψ ，在获得速度场的过程中，流体的连续性方程 $u_x + v_y = 0$ 就自动满足了。BubbleNet 的另一创新点在于我们引入了时间离散归一器（Time Discretized Normalizer, TDN）。和传统神经网络归一化的思路不同，因为针对微管道气泡流速度、压力会随时间发生很大变化，若直接对数据整体进行传统的归一化，则会造成一部分时间步上物理场特征会被那些相应物理量数值较大的时刻所剥夺，致使在该时刻的数据被归一化后，原本流场的特征消失。举例来讲，若 $t = t_1$ 时刻流场中压力分布的数量级为 10^5 (SI)，而 $t = t_2$ 时刻流场中压力分布数量级 10^2 ；则对整体数据进行归一化后 t_1 时刻流场压力分布可能几乎不受影响，但是 t_2 时刻数值却几乎接近为同一数值。这在训练时会“欺骗”神经网络，使得优化器认为已经完成拟合，导致最终预测偏差较大。

在我们的训练中，我们使用了均方误差 (MSE) 来计算损失函数。若我们用 \mathcal{W} 代表具有物理场的训练集数据： $\mathcal{W} = (u_{train}, v_{train}, p_{train}, \phi_{train})$ ，那么损失函数 \mathcal{L} 可

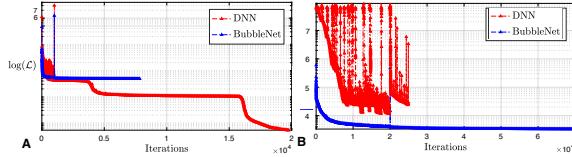


图6 对于两个算例的神经网络损失函数训练过程。其中蓝色代表 BubbleNet，红色代表 DNN。**A.** 单气泡算例损失函数。**B.** 多气泡算例损失函数。

写为：

$$\mathcal{L} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\mathcal{W}_{pred(i)} - \mathcal{W}_{train(i)})^2$$

其中 \mathcal{W}_{pred} 是神经网络训练的预测值， \mathcal{W}_{train} 是归一化后的训练数据。 m 为训练数据量。

同时，为了评估训练效果，我们采用绝对误差 $|\epsilon|$ 作为评估训练效果的指标：

$$|\epsilon_{\mathcal{W}}| = |\mathcal{W}_{pred(i)} - \mathcal{W}_{train(i)}|$$

由图6我们得到损失函数下降的趋势为：DNN 迭代次数更长久，损失函数数值下降至更小；而 BubbleNet 梯度下降至一固定数值后便结束迭代完成训练，最终损失函数数值明显大于传统 DNN。在此我们提供两点可能解释：第一，利用两种归一化器计算后的训练数据特征不同，网络对其适应性也不同；第二，因为我们在 BubbleNet 的误差函数中引入了物理信息（通过预测 ψ 算出 u, v ），所以该结构误差总额较大，使得 ψ 不能同时精准拟合 u, v 的训练数据。对于多气泡算例，我们提出的 BubbleNet 明显以更快的速度进行梯度下降并且误差更小。传统深度神经网络在训练时梯度处在相对剧烈的波动中，没有稳定下降。此处我们给出的解释为：I、多气泡流动场物理数据有很多明显变化，即很多个小气泡与周围场的组分分布的数值间断难以被神经网络捕捉；II、根据我们给出的周期性边界条件，压力、速度等物理量在时间域上变化较大，在每个时间步上又存在间断，因此使得神经网络在拟合这样的数值场时难以兼顾多特征，因此上一次迭代产生的权重在下一次训练验证就产生较大误差，以至于损失函数波动较大。但是时间离散归一器使得每个时间步的数据处在同一尺度上，因此拟合误差相对较小。

两种网络结构对于单气泡算例速度场 u 预测结果如图7所示。图中，我们可以观察到 BubbleNet

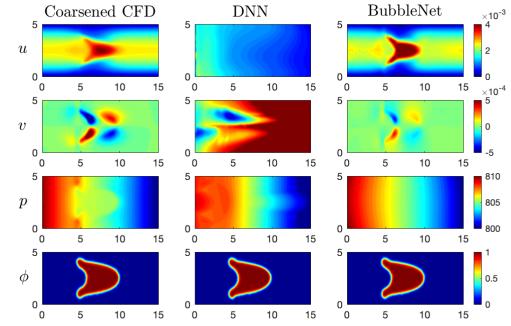


图7 粗化后的CFD计算结果，使用传统神经网络 DNN 和 BubbleNet 预测的单气泡流动计算结果。

预测流场趋势与实际计算结果基本相符，而传统的 DNN 预测结果却相差较大。在前文我们提到，造成该现象的主要原因是在对整个时空域的数据进行归一化后，由于在特定时间步某些物理量数值较大，从而“剥夺”了其他时间步该物理量的特征，以致进行整体归一化后在该时间步上整体数值都趋于 0（或量级上非常小），该数据特征因此“欺骗”神经网络使其误以为对该时间步的预测为准确的。而从图7的特征，我们可以基本判断速度场 u 分布满足这种特征。通过四个物理场预测结果我们可以判断无论从数值范围还是运动趋势上 BubbleNet 预测结果均优于传统的 DNN；并且速度场 $u & v$ 都符合前文描述的由于整体归一化导致的“特征被剥夺”。因此 BubbleNet 预测效果优势更为突出。但是，从压力场 p 分布我们也可以看出两种神经网络在预测时都会造成细节遗失，即便是 BubbleNet 在预测压力场也遗失气泡部分压场变化。对此，我们给出两个解释：首先是压力场左端与右端压差较大，神经网络在训练时主要考虑了两侧压差这个的明显特征，以至于忽略了气泡的细节特征；同时我们对于神经网络训练迭代次数仅有 10000，使得网络训练不充分不完全。而对于描述气泡构型的相函数，传统 DNN 已经表现出彩，可以基本预测出整体气泡形态。

对多气泡流场 DNN 和 BubbleNet 预测的物理场 u, v, p, ϕ 如图9所示。图中显示，DNN 仅在速度场 u 上预测效果好于我们提出的 BubbleNet。此处我们给出的解释是，由于速度两分量 u, v 是由潜在函数 ψ 耦合在一起的（为满足连续条件），且 BubbleNet 在预测时侧重拟合速度场 v 的趋势，因此导致 u 出现了很多不必要的细节，但是预测速度场整体上无论在数值大小还是在趋势上都基本符

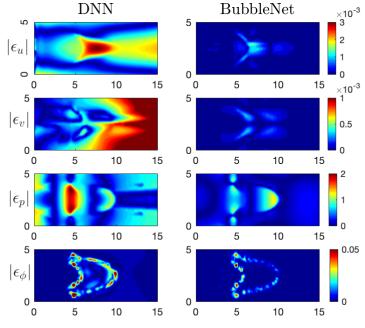


图 8 单气泡流算例对于传统神经网路方法和 BubbleNet 对于训练数据（粗化 CFD 数据）的绝对误差示意图。

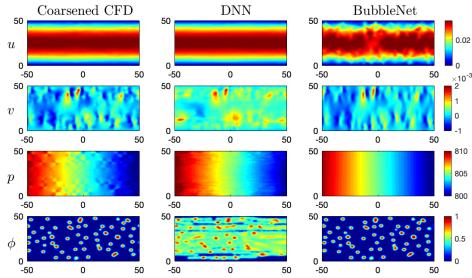


图 9 粗化后的 CFD 计算结果，使用传统神经网络 DNN 和 BubbleNet 预测的多气泡流动计算结果。

合原场分布。由绝对误差（图10）验证了 BubbleNet 对于整体物理场在预测效果上均好于 DNN，无论是趋势还是数值拟合都非常好地符合原场分布。根据图8, 10的绝对误差分布，我们认为 BubbleNet 训练效果和预测准确度均高于 DNN。

4 结 论

为了解决在化工、生物领域常见的多相流问题，特别是微管道中气泡流动问题，我们使用了近年来发展迅速的数据驱动物理深度学习方法来

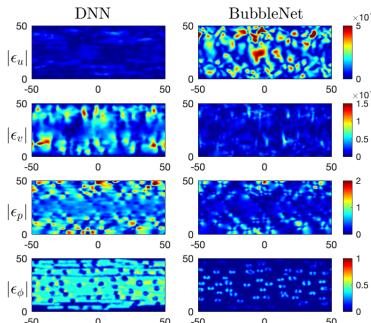


图 10 多气泡流算例对于传统神经网路方法和 BubbleNet 对于训练数据（粗化 CFD 数据）的绝对误差示意图。

预测微气泡流。首先我们基于数值模拟，分别计算了在微米尺度下微管道中单气泡与多气泡系统的运动规律。模拟仿真中计算参数基于生物学应用背景给出。单气泡算例计算了微管道中单气泡运动 $5000\mu\text{s}$ 的过程；多气泡算例则计算微管道中气泡群运动 $3000\mu\text{s}$ 的过程。仿真结果显示单气泡流动变形形态为前段先外凸呈抛物线状，尾端内凹直至附着气泡剥离气泡主体；微气泡群中气泡会随着时间推进发生融合及剥离。单气泡算例与现有文献中微管道实验中血红细胞变形形貌相似，管壁尾端在液相流部分符合泊肃叶流动基本速度分布。微气泡群算例中，整体流体速度分布符合泊肃叶流动规律。对本文的两个算例，我们通过对组分进行分析印证算例中流体组分守恒，验证了计算的精确度。

基于物理神经网络 (47)，我们提出了一种内部嵌构了连续性方程的针对气泡运动的神经网络 BubbleNet。我们的网络由两部分构成：构成基本的深度神经网络 (DNN) 以及包含连续不可压条件的内置方程（物理信息）。同时，我们还引入了时间离散监督器：即对于场数据进行时间离散化的归一化。我们分别用 DNN 和 BubbleNet 预测了单气泡在 $2000\mu\text{s}$ 和多气泡系统在 $1500\mu\text{s}$ 时刻物理场 (u, v, p, ϕ) 的分布。我们的 BubbleNet 结构相较于传统的 DNN 可以以更小的迭代步数获得更高的预测精度。因为对整个时空域上不同时间步流场数值的较大差异可能会导致特定时间步特征被“剥夺”，使得训练神经网络时网络被“欺骗”，所以时间离散归一器使网络预测时空数据更准确。对于我们给出的两个算例：微管道中的单气泡流动和气泡群流动中，与数值模拟得到的结果相比（根据与数值模拟的绝对误差 $|\epsilon|$ 对比），BubbleNet 在预测精度上均高于传统的 DNN。本文提出的相关算法成果不仅限于微气泡流，更可以广泛应用与电化学、电磁、燃烧等具有广泛工程应用背景的数学物理问题。

本文中使用的相关代码已开源在 <https://github.com/hanfengzhai/BubbleNet>。本项目更多细节可通过 <https://hanfengzhai.net/BubbleNet> 查看。

参考文献

- [1] Mitchell, T. (1997). Machine Learning. New York: McGraw Hill. ISBN 0-07-042807-7.
- [2] Silver, D., Huang, A., Maddison, C. *et al.* (2016) Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search. *Nature* **529**, 484–489.
- [3] Silver, D., Schrittwieser, J., Simonyan, K. *et al.* (2017) Mastering the game of Go without human knowledge. *Nature* **550**, 354–359.
- [4] Jo, T., Nho, K., and Saykin, A.J. (2019) Deep Learning in Alzheimer's Disease: Diagnostic Classification and Prognostic Prediction Using Neuroimaging Data. *Front. Aging Neurosci.* **11**, 40, 220.
- [5] Waring, J., Lindvall, J., and Umeton, R. (2020) Automated machine learning: Review of the state-of-the-art and opportunities for healthcare. *Artificial Intelligence in Medicine* **104**, 101822.
- [6] Woldaregay, A.Z., Årsand, E., Walderhaug, S., *et al.* (2019) Data-driven modeling and prediction of blood glucose dynamics: Machine learning applications in type 1 diabetes. *Artificial Intelligence in Medicine* **98**, 109-134.
- [7] Benke, K., and Benke, G. (2018) Artificial Intelligence and Big Data in Public Health. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. **15**(12):2796.
- [8] Panch, T., Pearson-Stuttard, and J., Greaves, F., *et al.* (2019) Artificial intelligence: opportunities and risks for public health. *The Lancet Digital Health* **1**, 1, 13-14.
- [9] Jarek, K., and Mazurek, G. (2019) Marketing and Artificial Intelligence. *Central European Business Review*, **8**(2), 46-55.
- [10] Davenport, T., Guha, A., and Grewal, D. (2020) How artificial intelligence will change the future of marketing. *Journal of the Academy of Marketing Science* **48**, 24–42.
- [11] Senior, A.W., Evans, R., Jumper, J., *et al.* (2020) Improved protein structure prediction using potentials from deep learning. *Nature* **577**, 706–710.
- [12] Harmon, S.A., Sanford, T.H., Xu, S., *et al.* (2020) Artificial intelligence for the detection of COVID-19 pneumonia on chest CT using multinational datasets. *Nat. Commun.* **11**, 4080.
- [13] Chassagnon, G., Vakalopoulou, M., Battistella, E., *et al.* (2021) AI-driven quantification, staging and outcome prediction of COVID-19 pneumonia. *Medical Image Analysis* **67**, 101860.
- [14] Li, Y., Shang, K., Bian, W., *et al.* (2020) Prediction of disease progression in patients with COVID-19 by artificial intelligence assisted lesion quantification. *Sci. Rep.* **10**, 22083.
- [15] Punn, N.S., Sonbhadra, S.K., and Agarwal, S. (2020) COVID-19 Epidemic Analysis using Machine Learning and Deep Learning Algorithms. *medRxiv*:10.1101/2020.04.08.20057679.
- [16] Curry, B., and Moutinho, L. (1993). Neural Networks in Marketing: Modelling Consumer Responses to Advertising Stimuli. *European Journal of Marketing* **27**. 5-20.
- [17] Kaefer, F., Heilman, C.M., and Ramenofsky, S.D. (2005) A neural network application to consumer classification to improve the timing of direct marketing activities. *Computers & Operations Research* **32**, 10, 2595-2615.
- [18] Zhou, G., Zhu, X., Song, C., *et al.* (2018) Deep Interest Network for Click-Through Rate Prediction. In Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining (KDD '18). Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 1059–1068.
- [19] Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., *et al.* (2016) TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems. *arXiv*. [arXiv:1603.04467](https://arxiv.org/abs/1603.04467)
- [20] Tsai, CW., Lai, CF., Chao, HC., *et al.* (2015) Big data analytics: a survey. *Journal of Big Data* **2**, 21.
- [21] Pääkkönen, P., and Pakkala, D. (2015) Reference Architecture and Classification of Technologies, Products and Services for Big Data Systems. *Big Data Research* **2**, 4, 166-186.
- [22] Zhang, W. J., Yang, G., Lin, Y., *et al.* (2018) On Definition of Deep Learning. 2018 World Automation Congress (WAC) Stevenson, WA, pp. 1-5.
- [23] Mishra, M., and Srivastava, M. (2014) A view of Artificial Neural Network. 2014 International Conference on Advances in Engineering & Technology Research (ICAETR - 2014), Unnao, pp. 1-3.
- [24] Mehlig, B. (2019) Artificial Neural Networks. *arXiv*. [arXiv:1901.05639](https://arxiv.org/abs/1901.05639)
- [25] Bebis, G., and Georgopoulos, M. (1994) Feed-forward neural networks. *IEEE Potentials*, **13**, 4, 27-31, Oct.-Nov.
- [26] Sherstinsky, A. (2020) Fundamentals of Recurrent Neural Network (RNN) and Long Short-Term Memory (LSTM) network. *Physica D: Nonlinear Phenomena* **404**, 132306.
- [27] Mikolov, T., Karafiat, M., Burget, L., *et al.* (2010). Recurrent neural network based language model. Proceedings of the 11th Annual Conference of the International Speech Communication Association, INTERSPEECH 2010. 2. 1045-1048.
- [28] Yang, Y., Krompass, and D., Tresp. V. (2017) Tensor-Train Recurrent Neural Networks for Video Classification. *arXiv*. [arXiv:1707.01786](https://arxiv.org/abs/1707.01786)
- [29] Hill, S.T., Kuintzle, R., Teegarden, A., *et al.* (2018) A deep recurrent neural network discovers complex biological rules to decipher RNA protein-coding potential. *Nucleic Acids Research* **46**, 16, 8105–8113.
- [30] Albawi, S., Mohammed, T.A., and Al-Zawi, S. (2017) Understanding of a convolutional neural network. 2017 International Conference on Engineering and Technology (ICET), Antalya, 2017, pp. 1-6.
- [31] Krizhevsky, A., Sutskever, I., Hinton, G.E. (2017) ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Communications of the ACM*. **60**, 6. June 2017 pp 84–90.
- [32] Ronneberger,O., Fischer P., and Brox, T. (2015) U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention MICCAI 2015: Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention –MICCAI 2015 pp 234-241.
- [33] Paszke, A., Gross, S., Massa, F., *et al.* (2019) PyTorch: An Imperative Style, High-Performance Deep Learning Library. *Advances in Neural Information Processing Systems* 32 (NeurIPS 2019), pp 8026–8037.
- [34] Rosentrater, K.A., and Balamuralikrishna, R. (2005) Essential Highlights of the History of Fluid Mechanics. *ASEE PEER Document Repository*. Session 2661.

- [35] Anderson Jr., J.D. (2010) Brief History of the Early Development of Theoretical and Experimental Fluid Dynamics. *Encyclopedia of Aerospace Engineering*. ISBN: 978-0-470-68665-2.
- [36] Bhanduvula, S. (2012) Finite Difference Method in Computational Fluid Dynamics. IJEAR Vol. 2, Issue 2, ISSN: 2348-0033.
- [37] Dlamini, P.G., Motsa, S.S., and Khumalo, M. (2013) Higher Order Compact Finite Difference Schemes for Unsteady Boundary Layer Flow Problems. *Nonlinear Fluid Flow and Heat Transfer* **2013**, 941096.
- [38] Bertram, V. (2012) Practical Ship Hydrodynamics. Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-08-097150-6.
- [39] Ahmadian, A.S. (2016) Numerical Models for Submerged Breakwaters. Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-12-802413-3.
- [40] Mazumder, S. (2016) Numerical Methods for Partial Differential Equations. Academic Press. ISBN 978-0-12-849894-1.
- [41] Rapp, B.E. (2017) Microfluidics: Modeling, Mechanics and Mathematics. Elsevier. ISBN 978-1-4557-3141-1.
- [42] Neill, S.P., and Hashemi, M.R. (2018) Fundamentals of Ocean Renewable Energy. Academic Press. ISBN 978-0-12-810448-4.
- [43] Logan, D.L. (2011). A first course in the finite element method. Cengage Learning. ISBN 978-0495668251.
- [44] Gingold, R.A., and Monaghan, J.J. (1977) Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181** (3): 375–89.
- [45] Lucy, L.B. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.* **82**: 1013–1024.
- [46] Rudy, S.H., Brunton, S.L., and Proctor, J.L., et al. (2017) Data-driven discovery of partial differential equations. *Science Advances* **3**, 4.
- [47] Raissi, M., Perdikaris, P., and Karniadakis, G.E. (2019) Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics* **378**, 686-707.
- [48] Raissi, M., Perdikaris, P., and Karniadakis, G.E. (2019) Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations. *arXiv*. [arXiv:1711.10561](#)
- [49] Raissi, M., Perdikaris, P., and Karniadakis, G.E. (2019) Physics Informed Deep Learning (Part II): Data-driven Discovery of Nonlinear Partial Differential Equations. *arXiv*. [arXiv:1711.10566](#)
- [50] Lu, L., Meng, X., Mao, Z., et al. (2020) DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *arXiv*. [arXiv:1907.04502](#).
- [51] Lu, L., Jin, P., and Karniadakis, G.E. (2019) DeepONet: Learning nonlinear operators for identifying differential equations based on the universal approximation theorem of operators. *arXiv*. [arXiv:1910.03193](#).
- [52] Cai, S., Wang, Z., Lu, L., et al. (2020) DeepM&Mnet: Inferring the electroconvection multiphysics fields based on operator approximation by neural networks. *arXiv*. [arXiv:2009.12935](#).
- [53] Mao, Z., Lu, L., Marxen, O., et al. (2020) DeepM&Mnet for hypersonics: Predicting the coupled flow and finite-rate chemistry behind a normal shock using neural-network approximation of operators. *arXiv*. [arXiv:2011.03349](#).
- [54] Lin, C., Li, Z., Lu, L., et al. (2020) Operator learning for predicting multiscale bubble growth dynamics. *J. Chem. Phys.* **154**, 104118.
- [55] Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., et al. (2020) Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *arXiv*. [arXiv:2010.08895](#).
- [56] Jiang, C., Esmaeilzadeh, S., Azizzadenesheli, K., et al. (2020) Mesh-freeFlowNet: A Physics-Constrained Deep Continuous Space-Time Super-Resolution Framework. *arXiv*. [arXiv:2005.01463](#).
- [57] Bai, Y., and Bai, Q. (2018) Subsea Engineering Handbook. ISBN 978-0-12-812622-6.
- [58] Meyers, R.A. (2001) Encyclopedia of Physical Science and Technology. ISBN 978-0-12-227410-7.
- [59] Wang, C.Y. (2007) MODELING MULTIPHASE FLOW AND TRANSPORT IN POROUS MEDIA. *Transport Phenomena in Porous Media*, 383-410.
- [60] Dollet, B., van Hoeve, W., Raven, J.-P., et al. (2008) Role of the Channel Geometry on the Bubble Pinch-Off in Flow-Focusing Devices. *Physical Review Letters* **100**, 034504.
- [61] Herrada, M.A., Montanero, J.M., Ferrera, C., et al. (2010) Analysis of the dripping-jetting transition in compound capillary jets. *J. Fluid Mech.* **649**, 523–536.
- [62] van Hoeve, W., Dollet, B., Versluis, M., et al. (2011) Microbubble formation and pinch-off scaling exponent in flow-focusing devices. *Physics of Fluids* **23**, 092001.
- [63] Vega, E. J., Acero, A. J., Montanero, J. M., et al. (2014) Production of microbubbles from axisymmetric flow focusing in the jetting regime for moderate Reynolds numbers. *Physical Review E* **89**, 063012.
- [64] Zhao, B., Pahlavan, A.A., Cueto-Felgueroso, L., et al. (2014) Forced Wetting Transition and Bubble Pinch-Off in a Capillary Tube. *Physical Review Letters* **120**, 084501.
- [65] Peyman, S.A., Abou-Saleh, R.H., McLaughlan, J.R., et al. (2012) Expanding 3D geometry for enhanced on-chip microbubble production and single step formation of liposome modified microbubbles. *Lab Chip* **12**, 4544–4552.
- [66] Papadopoulou, V., Tang, M.-X., Balestra, C., et al. (2014) Circulatory bubble dynamics: From physical to biological aspects. *Advances in Colloid and Interface Science* **206**, 239–249.
- [67] Miao, H., Gracewski, S.M., and Dalecki, D. (2008) Ultrasonic excitation of a bubble inside a deformable tube: Implications for ultrasonically induced hemorrhage. *J. Acoust. Soc. Am.* **124**, 2374–2384.
- [68] Hosseinkhah, N., Chen, H., Matula, T.J., et al. (2013) Mechanisms of microbubble–vessel interactions and induced stresses: A numerical study. *J. Acoust. Soc. Am.* **134**, 1875–1885.
- [69] Hosseinkhah, N., Goertz, D.E., and Hyynnen, K. (2015) Microbubbles and Blood Brain Barrier Opening: A Numerical Study on Acoustic Emissions and Wall Stress Predictions. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. **62**(5): 1293–1304.
- [70] Lea, J.F., Nickens, H.V., and Wells, M.R. (2008) Gas Well Deliquification. ISBN 978-0-7506-8280-0.
- [71] Tulu, E., Hettiarachchi, K., Powell, R.L., et al. (2008) Maintaining Monodispersity in a Microbubble Population Formed by Flow-Focusing. *Langmuir*. **24**(5): 1745–1749.
- [72] Tenjimbayashi, M., Doi, K., and Naito, M. (2019) Microbubble flows in superwettable fluidic channels. *RSC Advances*. **9** 21220.
- [73] Chen, Y., Liu, Y., Kung, C., et al. (2019) Design and Implementation of Cloud Analytics-Assisted Smart Power Meters Considering Advanced Artificial Intelligence as Edge Analytics in Demand-Side Management for Smart Homes. *Sensors* **2047**, 19(9).

- [74] Zhai, H. Mathematical Model of Neural Network. URL: <https://hanfengzhai.net/note/NN.pdf>
- [75] Meng, X., Li, Z., Zhang, D., et al. (2020) PPINN: Parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. **370** 113250.
- [76] Wikipedia. Fluid Mechanics. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Fluid_mechanics
- [77] Gibiansky, A. Fluid Dynamics: The Navier-Stokes Equations. URL: <https://andrew.gibiansky.com/downloads/pdf/Fluid%20Dynamics:%20The%20Navier-Stokes%20Equations.pdf>
- [78] Wikipedia. Multiphase Flow. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Multiphase_flow
- [79] Fedosov, D.A., Peltomäkia, M., and Gompper, G. (2014) Deformation and dynamics of red blood cells in flow through cylindrical microchannels. *Soft Matter*. **10**, 4258.
- [80] Tomaiuolo, G., Simeone, M., Martinelli, V., et al. (2009) Red blood cell deformation in microconfining flow. *Soft Matter*. **5**, 3736–3740.
- [81] Alizadehrad, D., Imai, Y., Nakaaki, K., et al. (2009) Quantification of red blood cell deformation at high-hematocrit blood flow in microvessels. *Journal of Biomechanics*. **45**(15), 2684-2689.
- [82] Matuła, K., Rivello, F., and Huck, W.T.S. (2019) Single-Cell Analysis Using Droplet Microfluidics. *Advanced Biomaterials*. **4**(1), 1900188.
- [83] Science Direct. Interstitial Pressure. URL: <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/interstitial-pressure>
- [84] COMSOL Multiphysics®. The Level Set Method. URL: <https://www.comsol.com/forum/thread/attachment/37361/The-level-set-method-from-MEMS-Module-5198.pdf>
- [85] Wang, H., and Guo, H. (2017) P granules phase transition induced by cytoplasmic streaming in *Caenorhabditis elegans* embryo. *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **60**, 1.
- [86] Sutera, S.P., and Skalak, R. (1993) THE HISTORY OF POISEUILLE'S LAW. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **25**, 1-20.
- [87] Shankar, B.M., and Shivakumara, I.S. (2020) Stability of Poiseuille flow in an anisotropic porous layer with oblique principal axes: More accurate solution. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. **101**, 2.
- [88] Ng, A. Deep Learning. *Coursera*. URL: https://www.coursera.org/specializations/deep-learning?utm_source=deeplearningai&utm_medium=institutions&utm_campaign=SocietyOfYouTubeDLSC2W1L10
- [89] Lima, G.C. The Growth of AI and Machine Learning in Computer Science Publications. URL: <https://medium.com/@thegcamilo/the-growth-of-ai-and-machine-learning-in-computer-science-publications-603d75467c38>
- [90] Zhai, H., and Hu, G. (2021) Inferring micro-bubble dynamics with physics-informed deep learning. *arXiv preprint*. arXiv:2105.07179.
- [91] Scornet, E. Deep Learning - Optimization. URL: <https://erwanscornet.github.io/teaching/Optimization.pdf>.
- [92] Lombaert, H. Level set method: Explanation. URL: <https://prof.etsmtl.ca/hlombaert/levelset/#fig:levelset-square>.
- [93] Skajaa, A. Limited Memory BFGS for Nonsmooth Optimization. Master Thesis. New York University.
- [94] Gaspar Elsas, J.H., Koide, T., and Kodama, T. (2014) Noether Theorem of Relativistic-Electromagnetic Ideal Hydrodynamics. *Brazilian Journal of Physics*. **45** 334–339.
- [95] Darby, R. Two-Phase Gas/Liquid Pipe Flow. <https://www.aiche.org/sites/default/files/docs/webinars/DarbyR-TwoPhaseGasLiquidPipeFlow.pdf>.
- [96] Wikipedia. Limited-memory BFGS. https://en.wikipedia.org/wiki/Limited-memory_BFGS.