基于物理深度学习的微气泡系统动力学预测

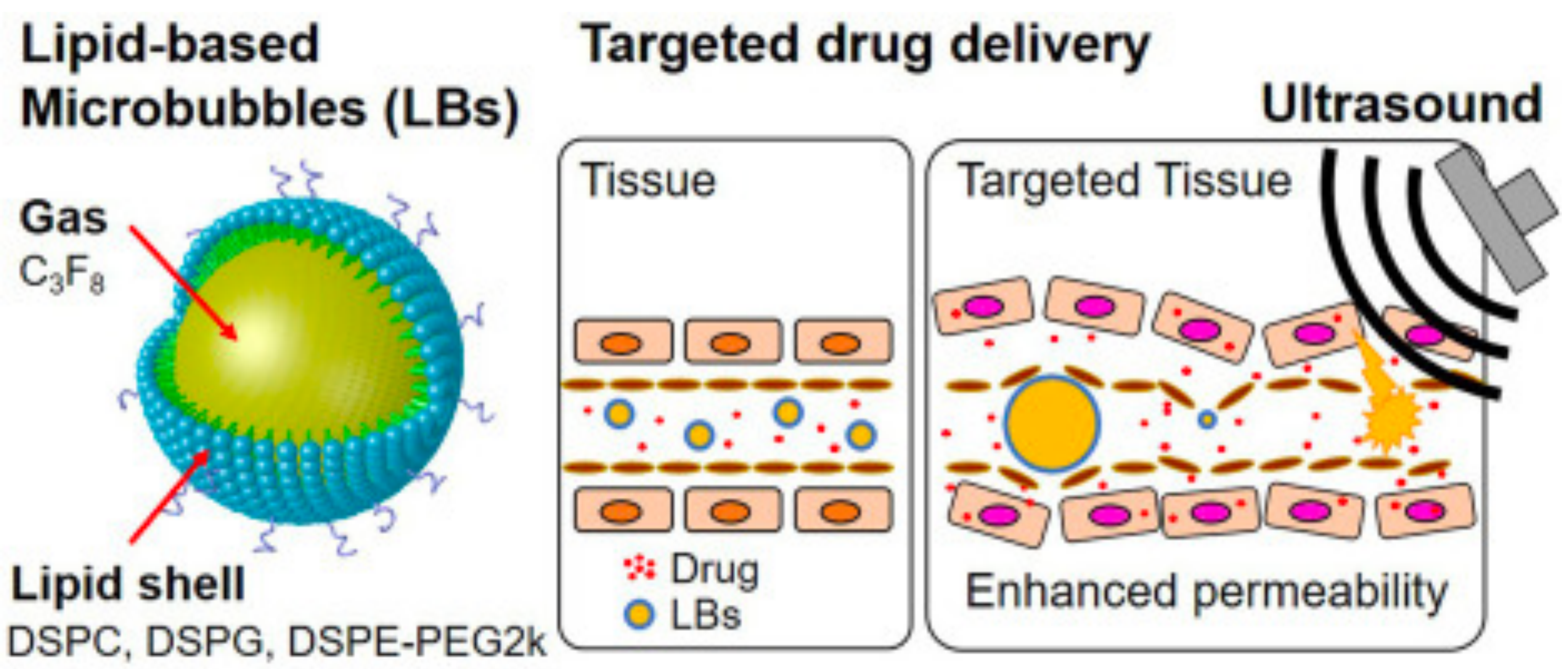
答辩人：翟晗锋　　指导教师：胡国辉

上海大学力学与工程科学学院

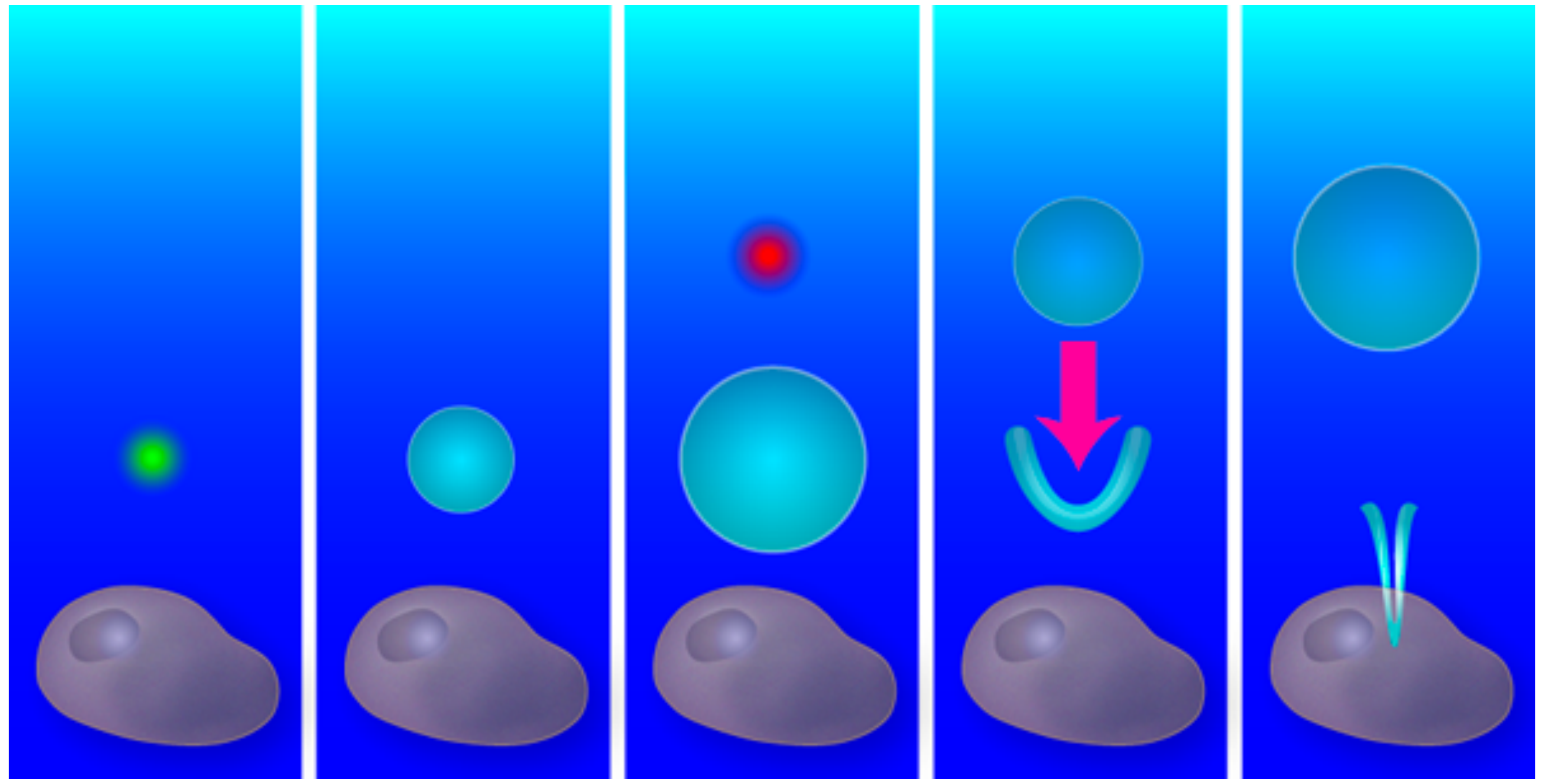
目录

- **应用背景**：气泡流动的生物学背景 & 神经网络及机器学习技术
- **理论背景**：神经网络介绍及物理应用
- **理论 & 建模**：两个算例的模型建立 & 参数给定，我们提出的物理神经网络
- **结果 & 讨论**：模拟仿真结果 & 深度学习预测结果
- **声明**：致谢和代码 & 项目开源声明

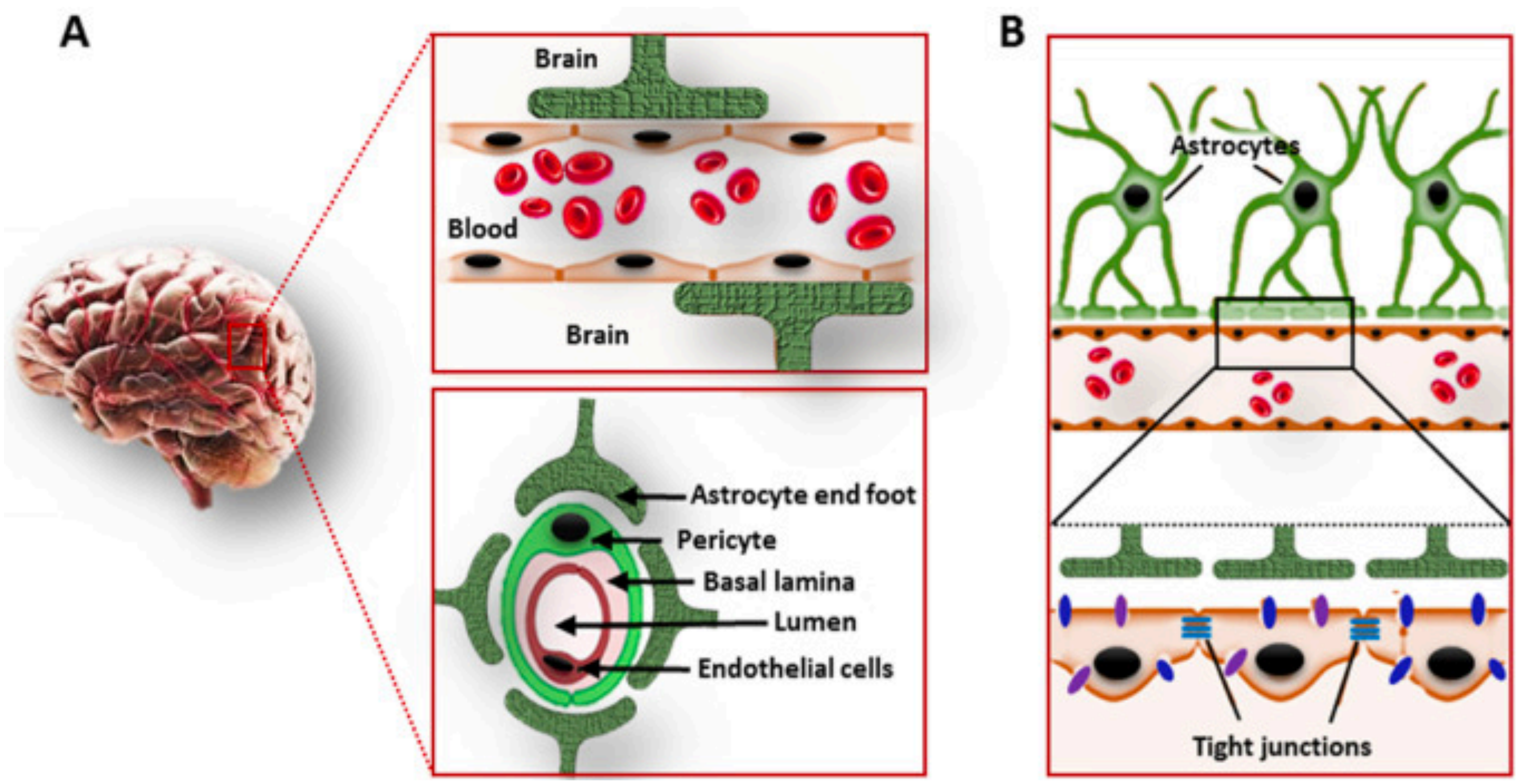
气泡流：大量应用研究场景



Omata *et al*., *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 2020

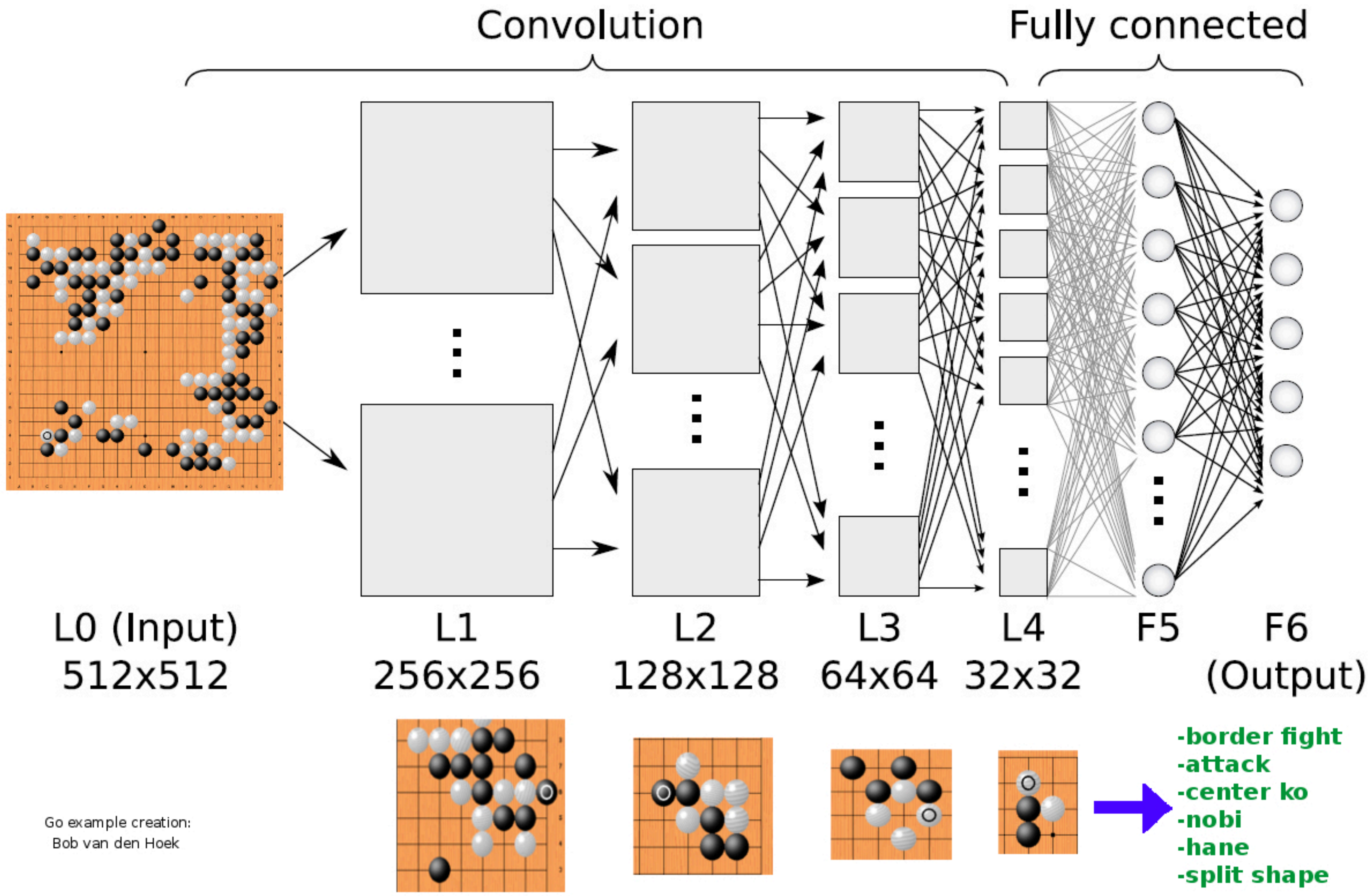


Sankin *et al., PRL*, 2010

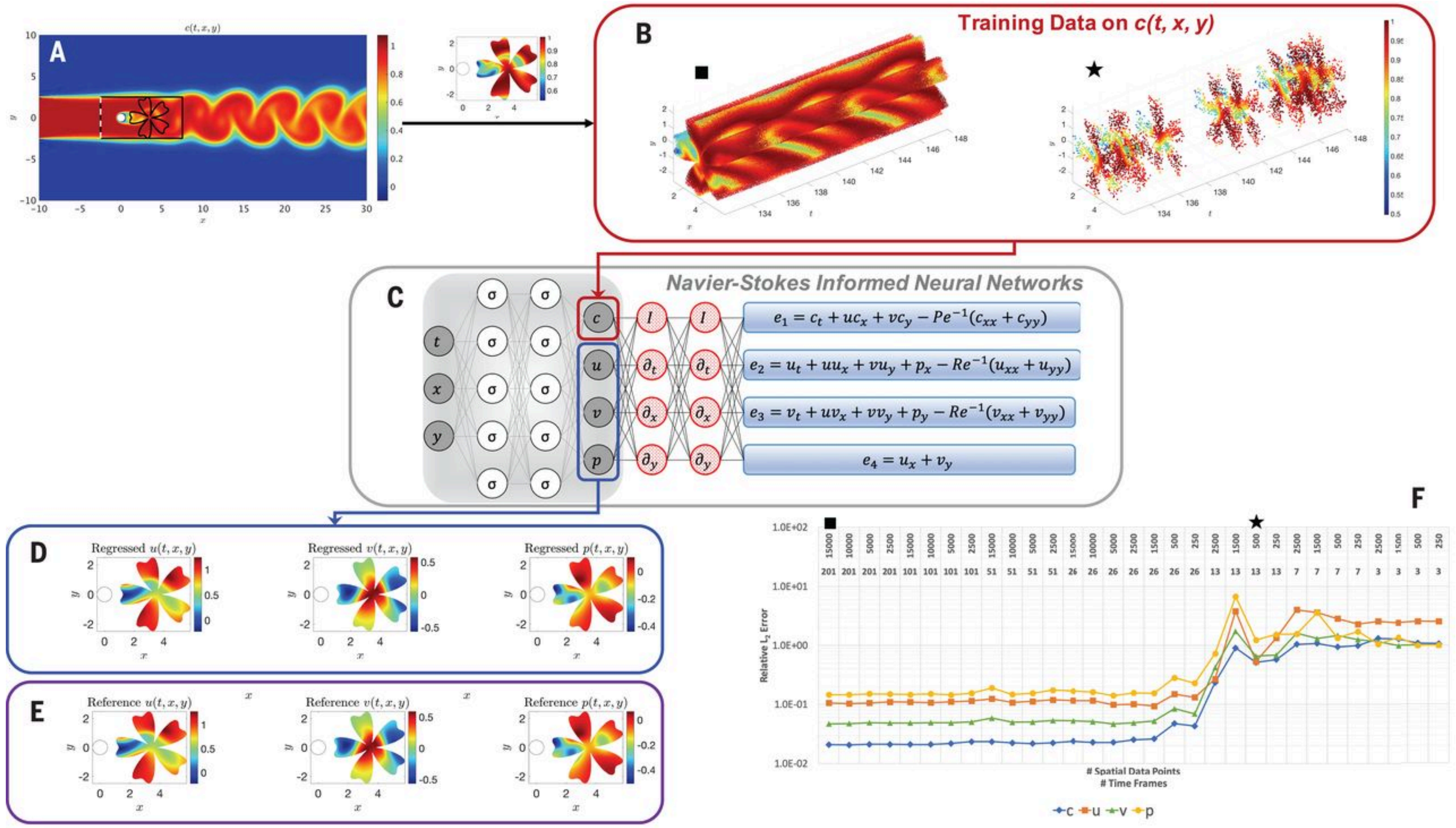


Kumosa *et al*., *Tran. Onc.*, 2021

机器学习横空出世



DeepMind, 2016

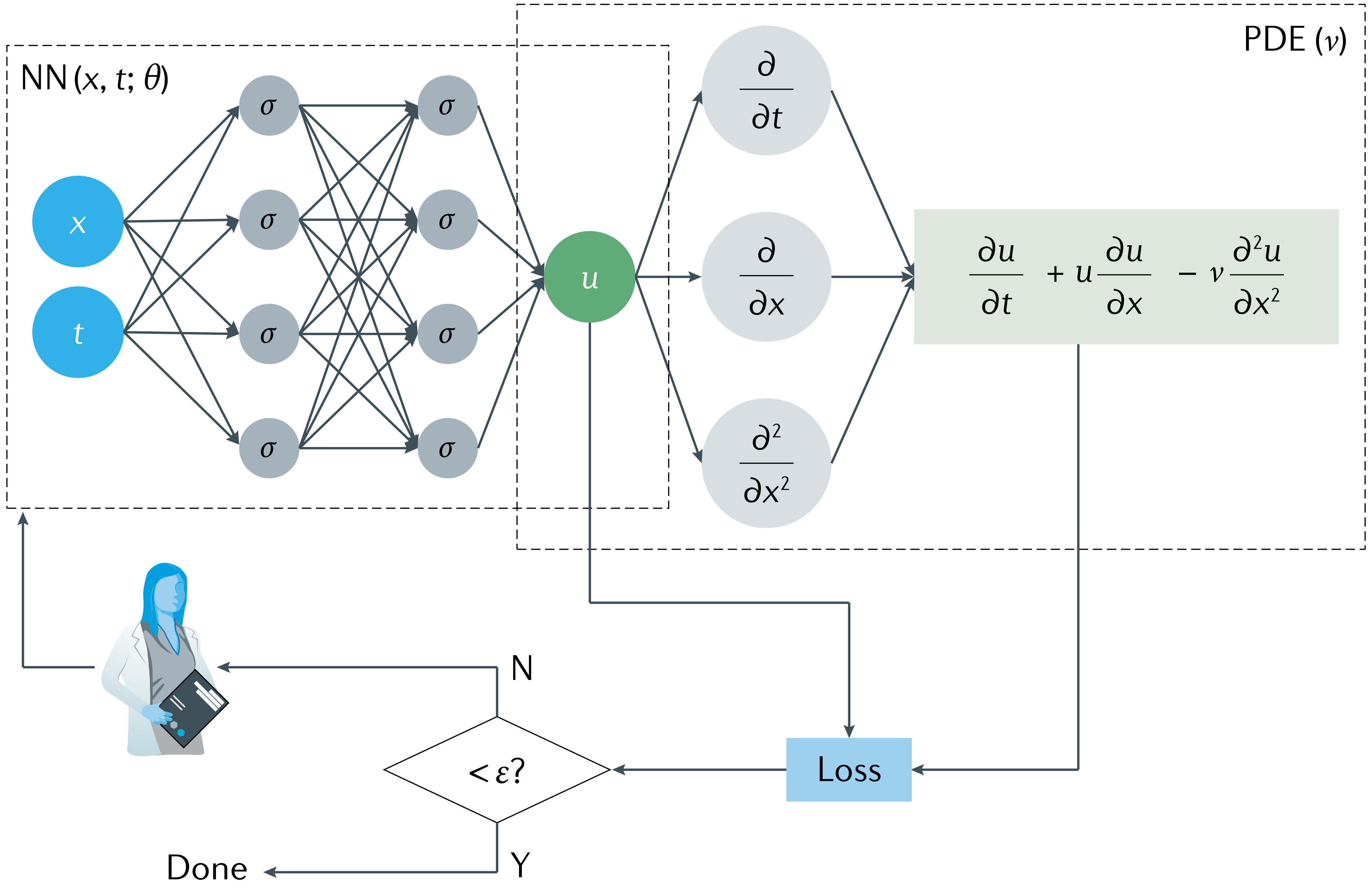


Raissi *et al.*, *Science*, 2020

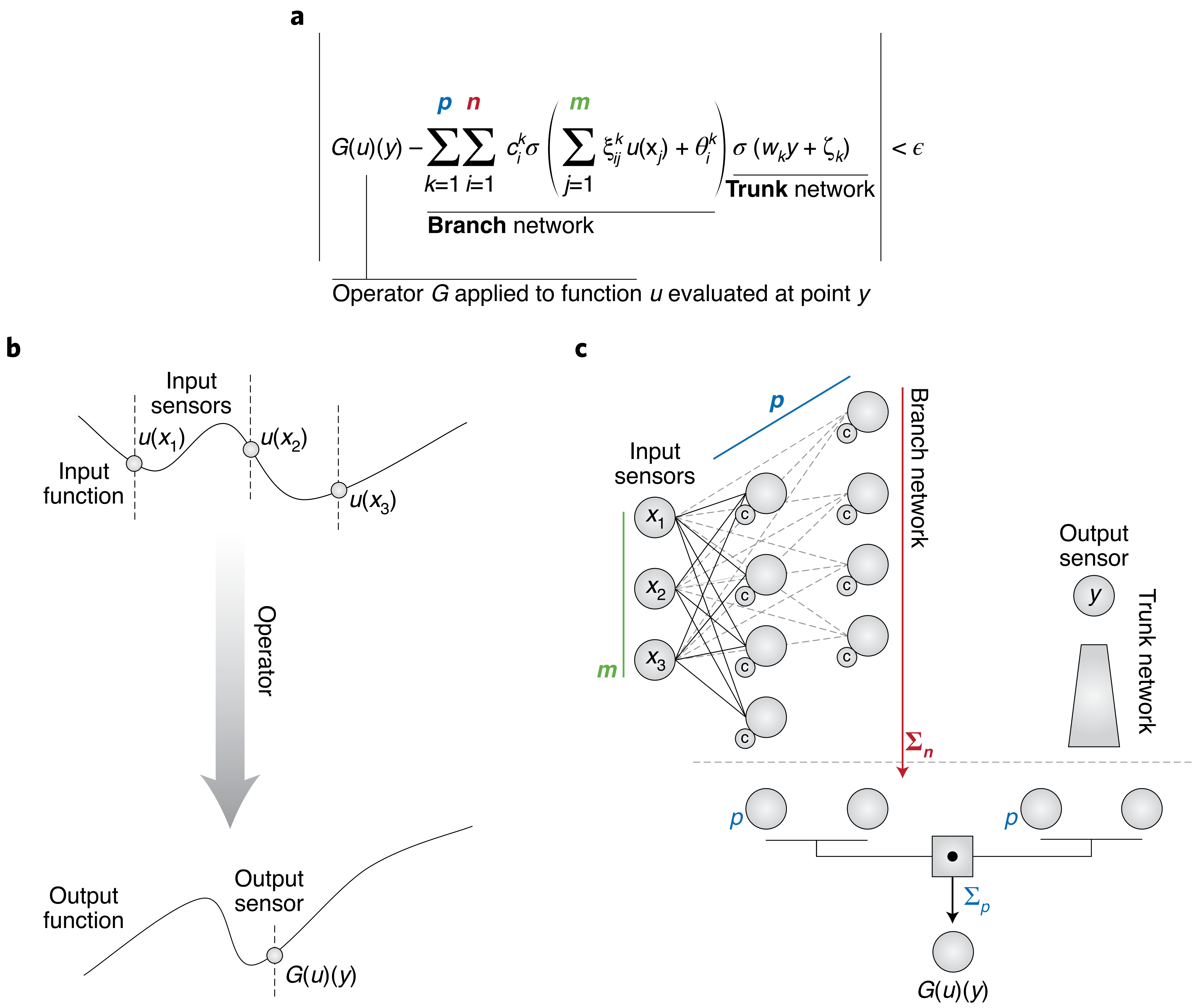
神经网络的物理应用

Higgins, 2021

- 引入物理损失使训练结果逼近真实物理
- 神经网络的自动求导巧妙匹配物理系统

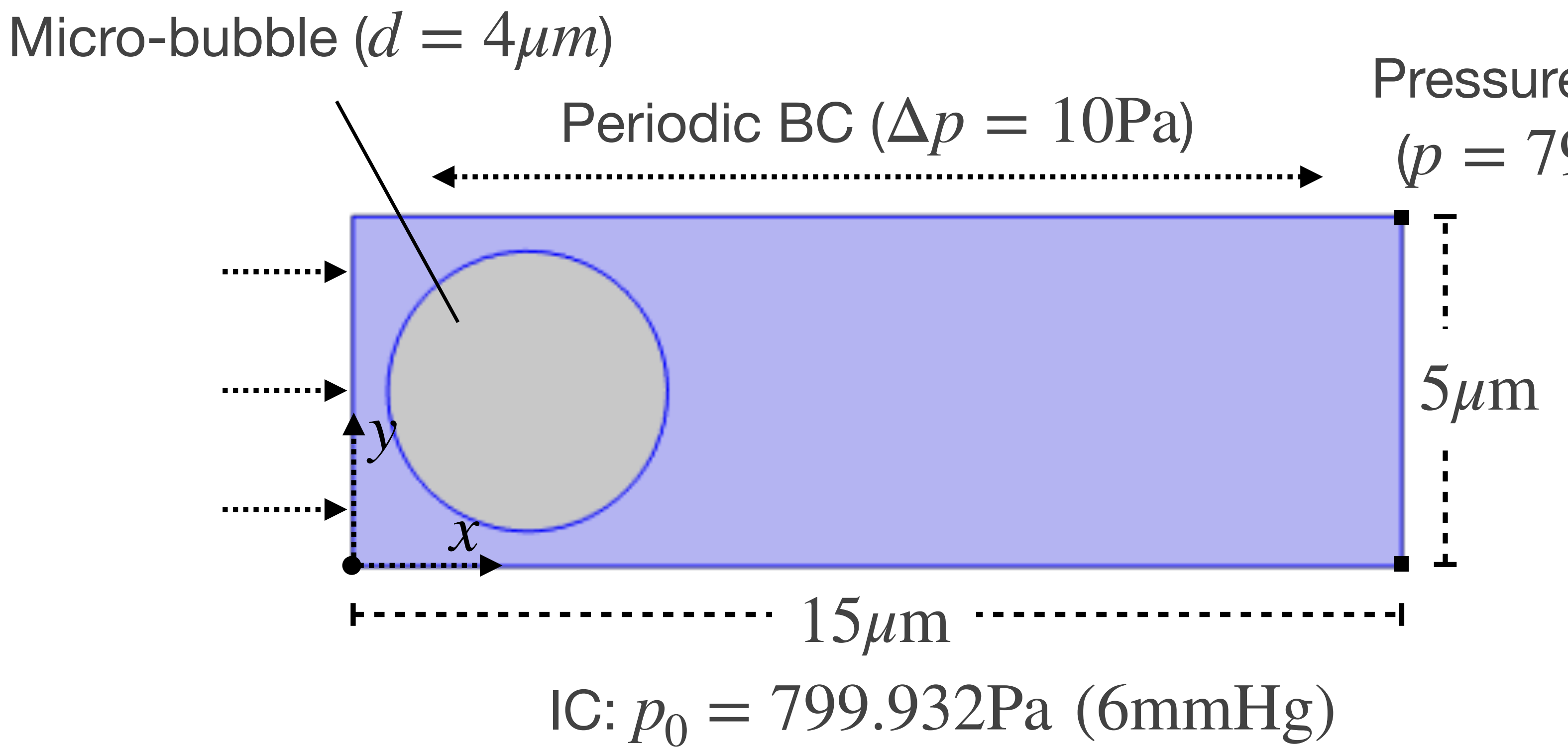


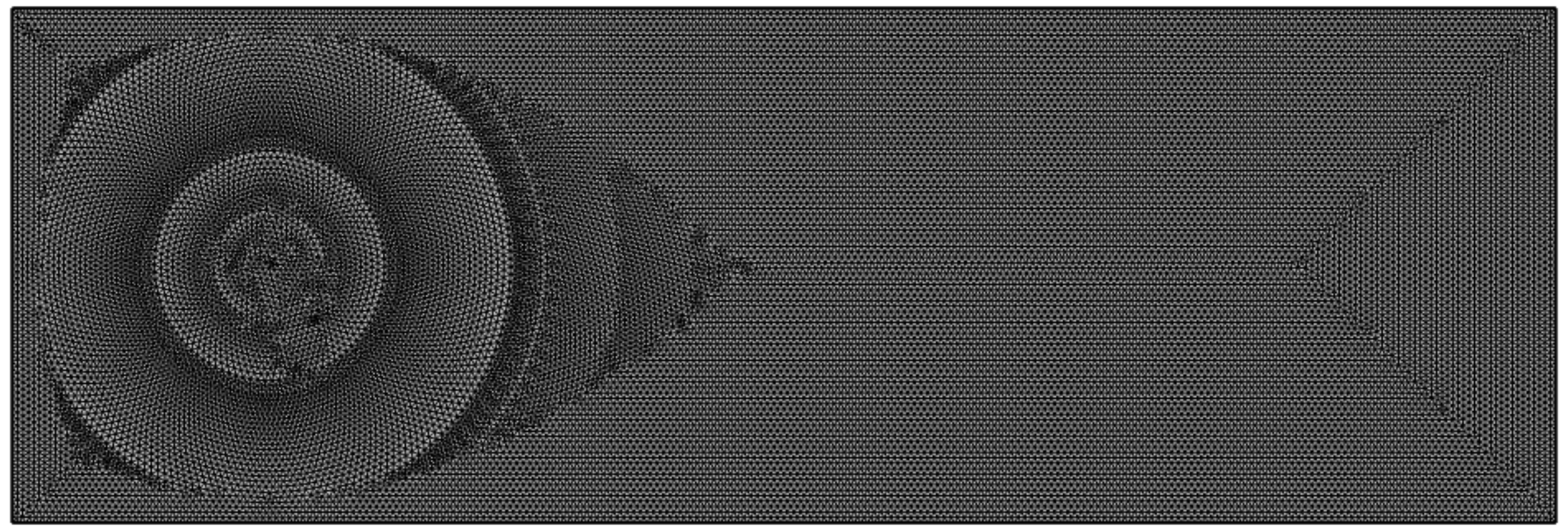
Karniadakis *et al.*, *Nat. Rev.*, 2021



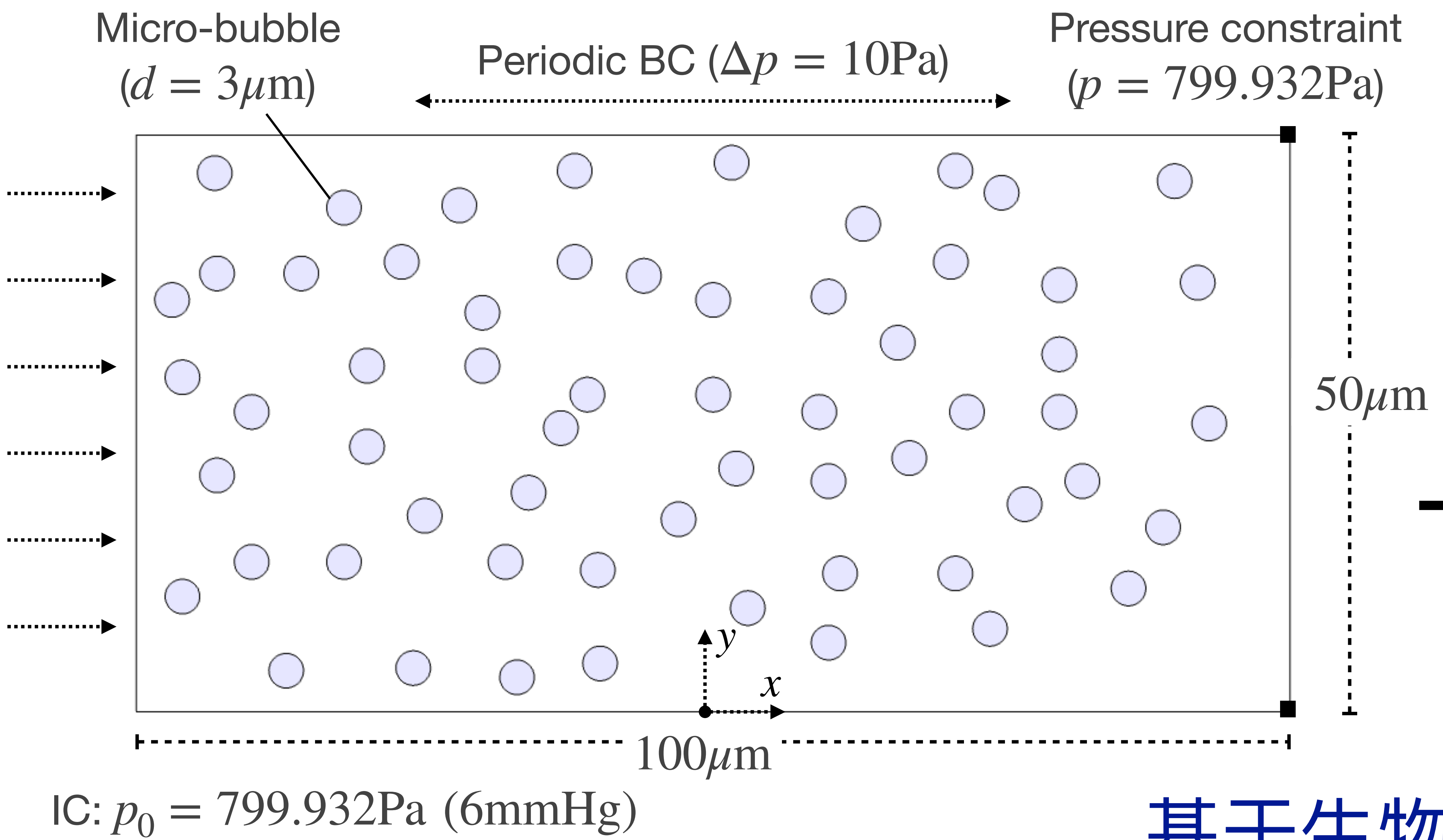
Lu *et al.*, *Nat. Mach. Int.*, 2021

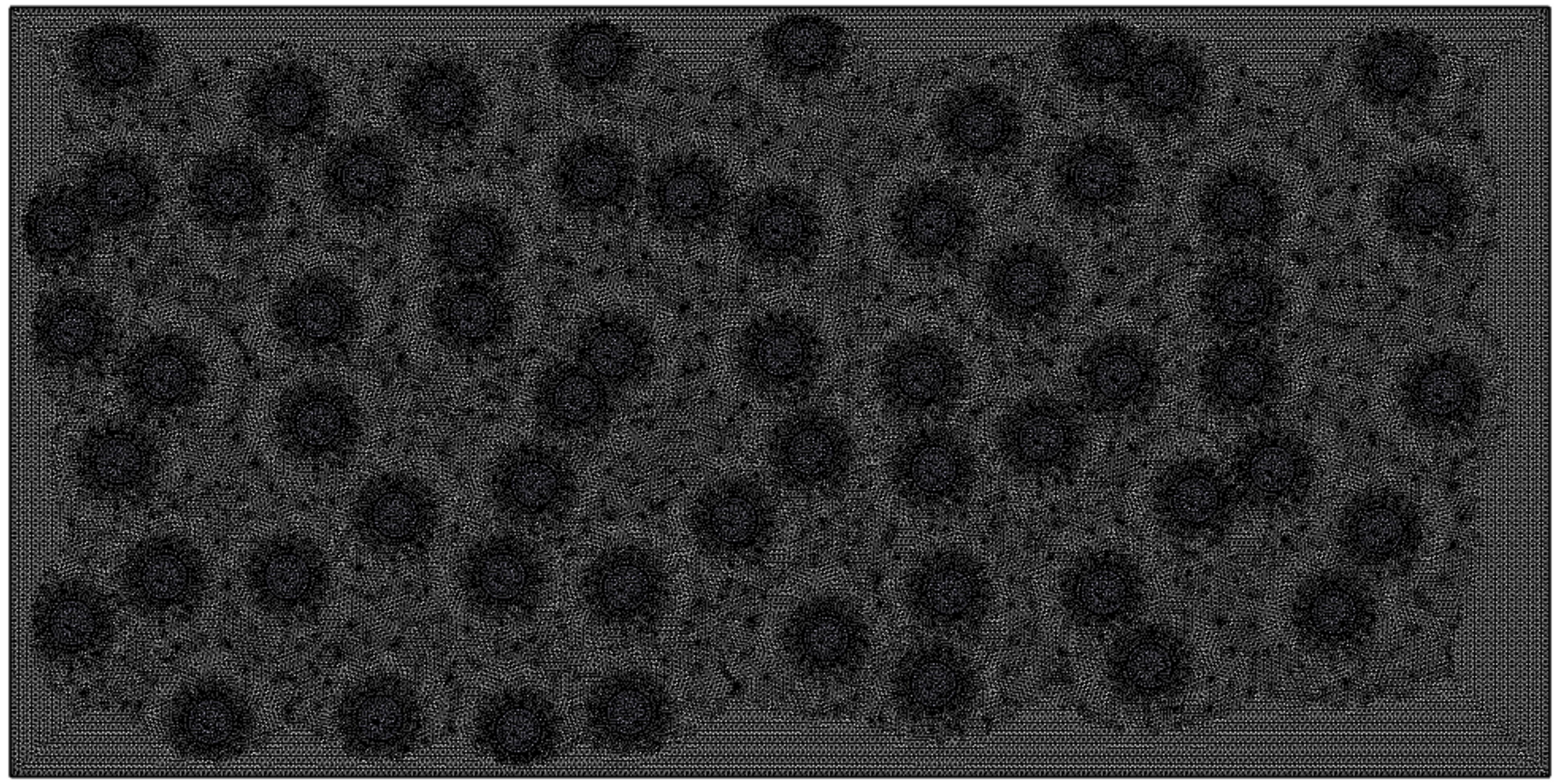
气泡流系统建模





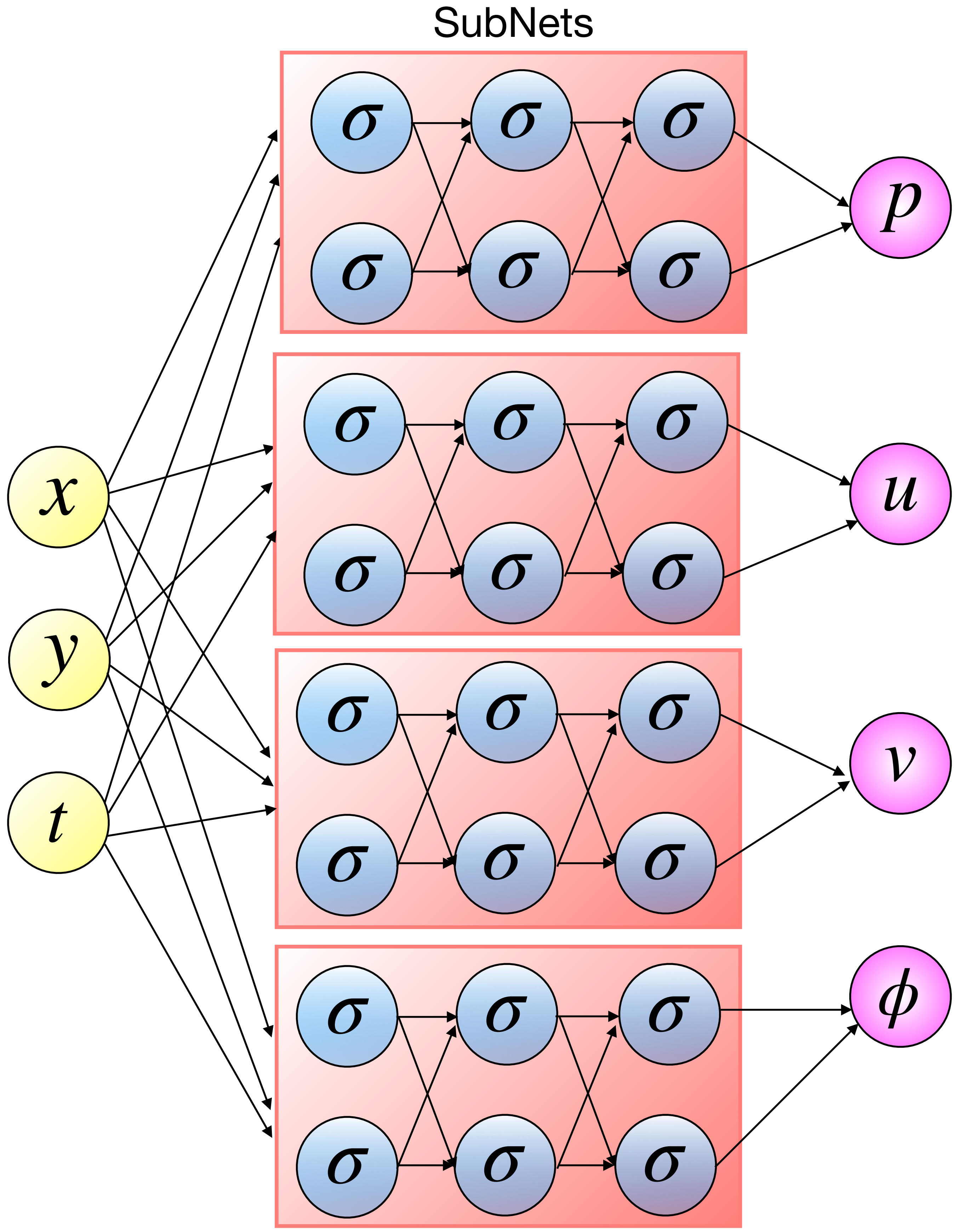
精密网格计算多相流



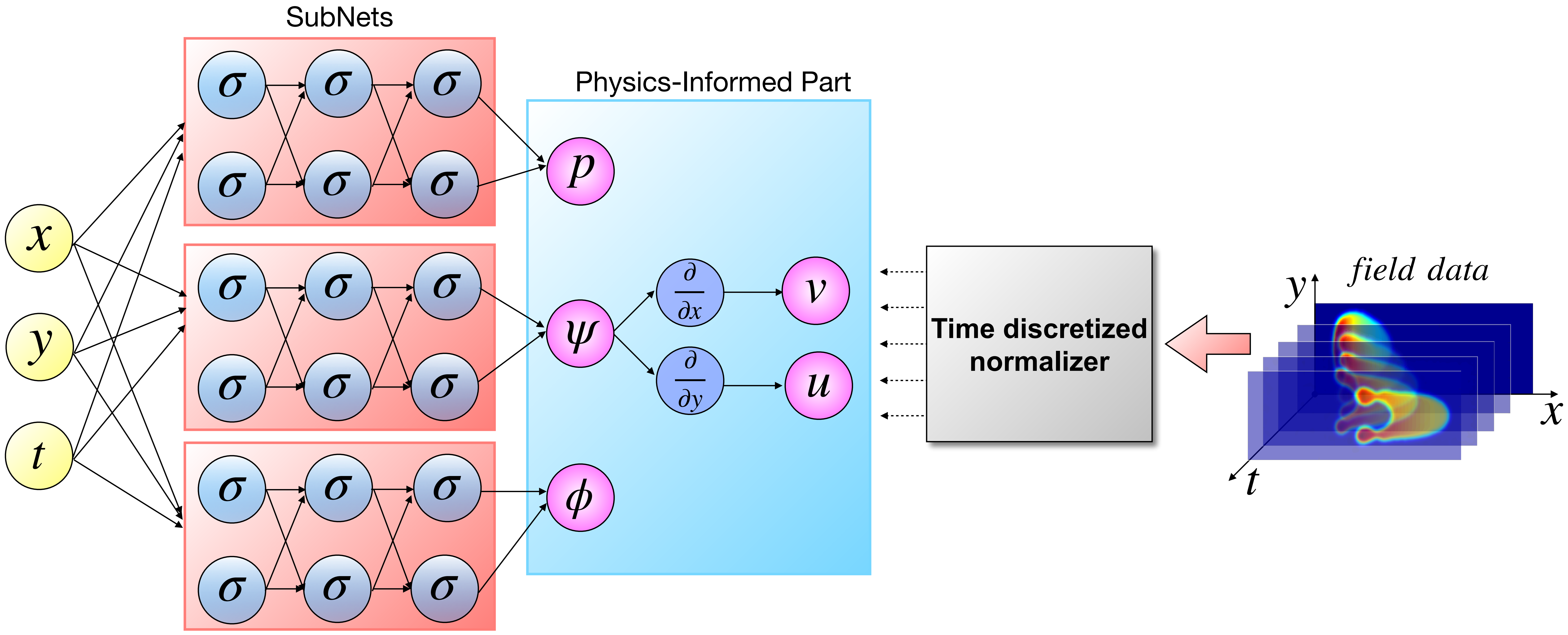


基于生物背景设定参数

BubbleNet: 预测气泡流的神经网络



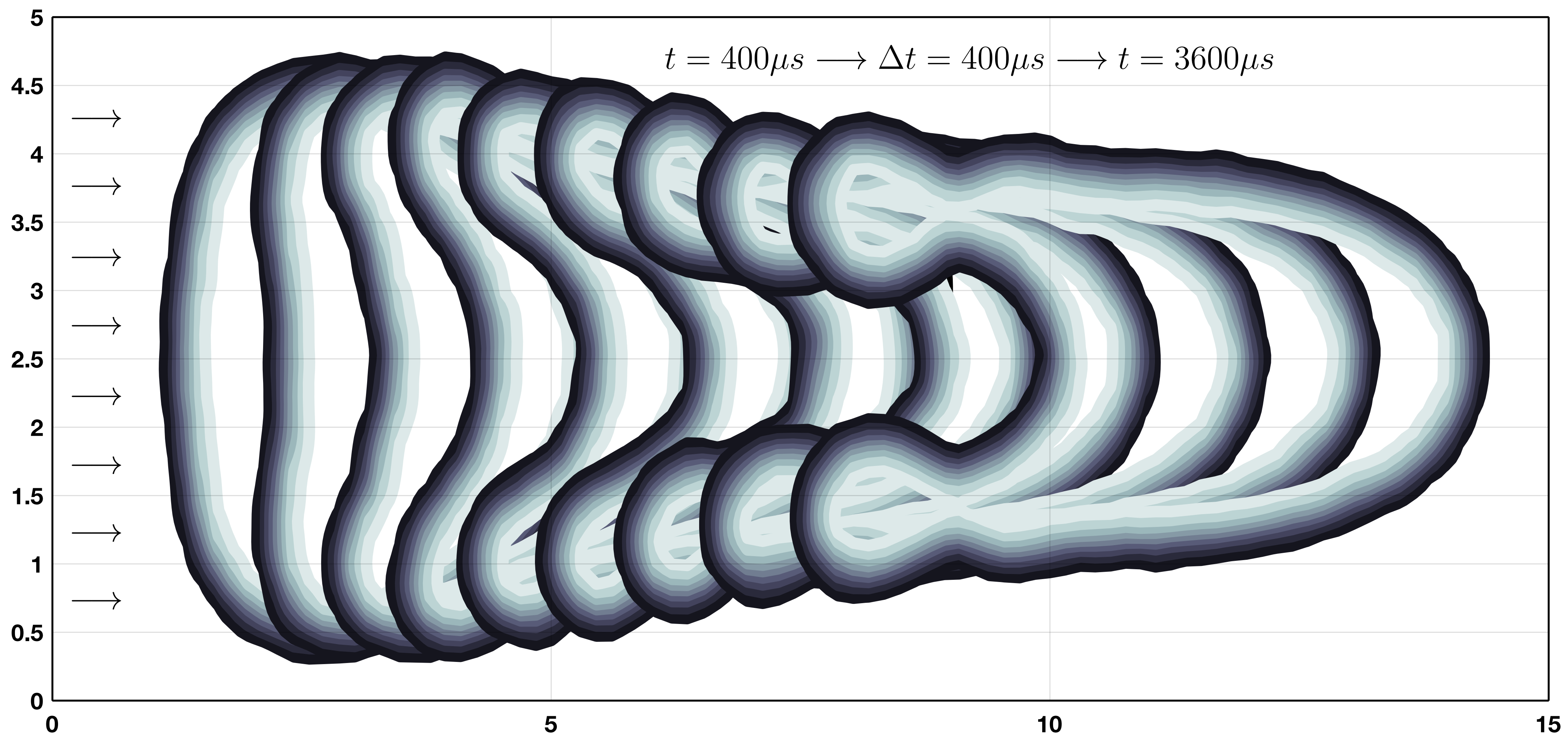
深度神经网络

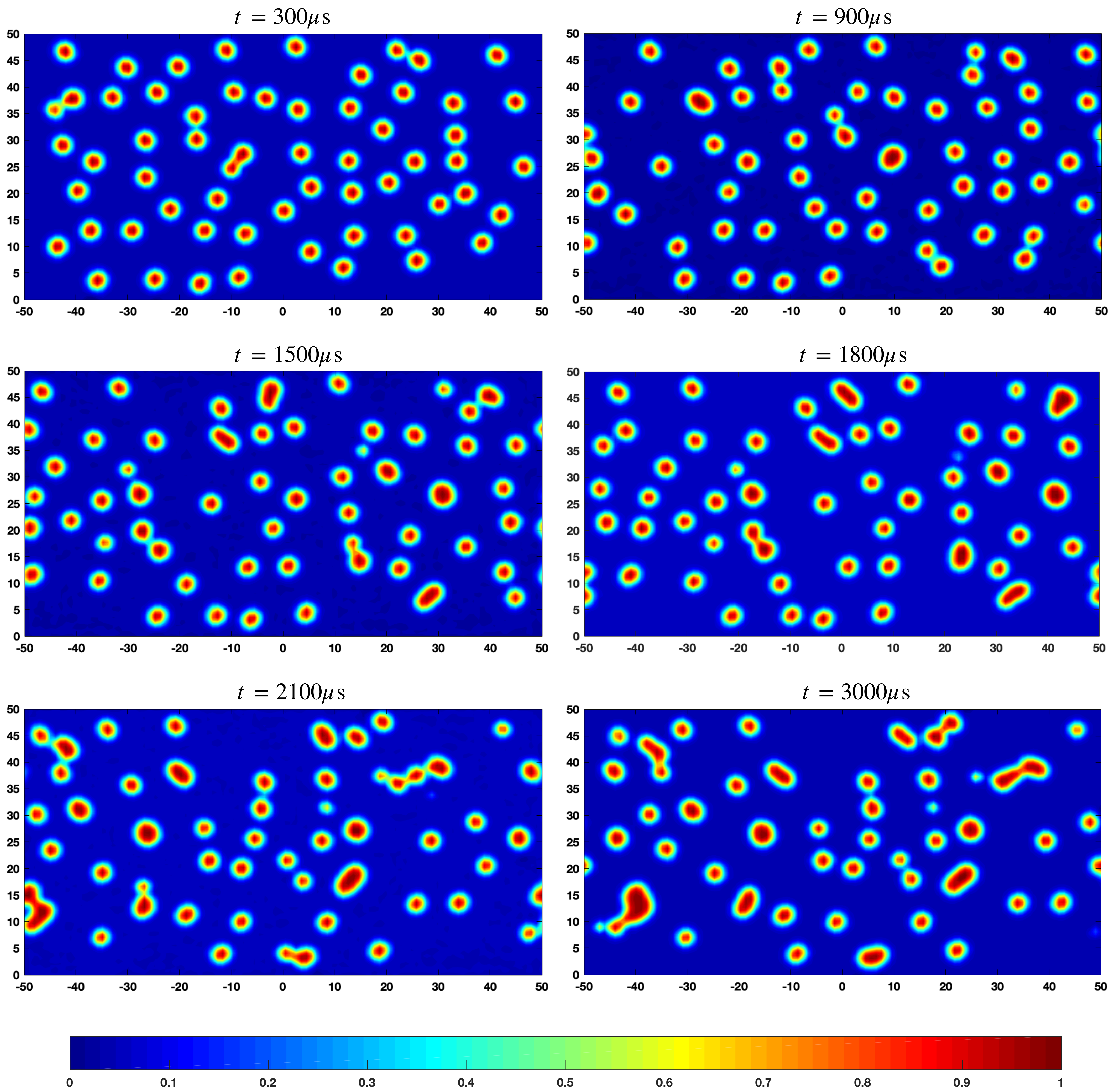


物理编码的气泡流神经网络

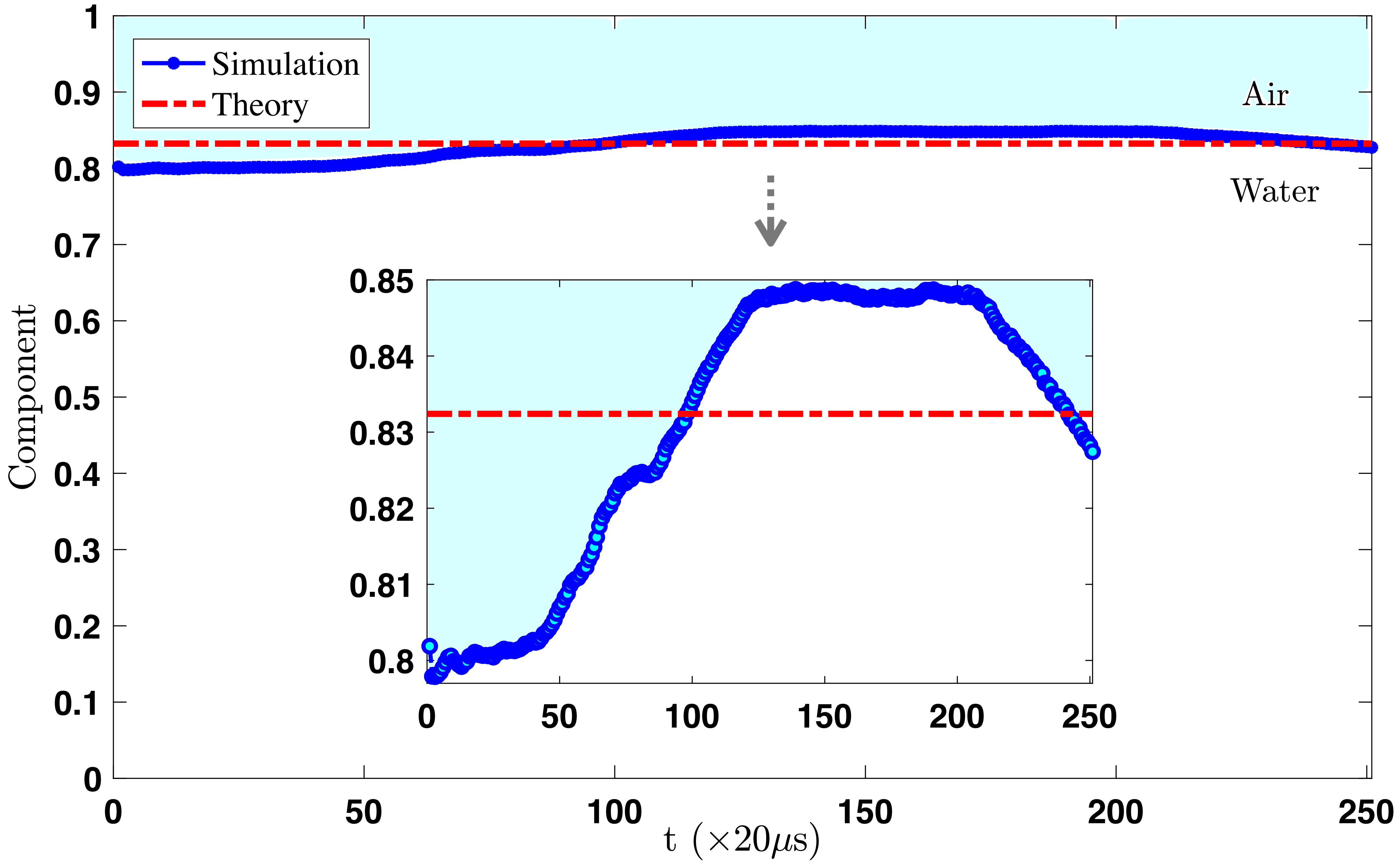
数值计算结果

- 单气泡 & 多气泡算例气泡 & 气泡群整体运动形态 & 趋势
- 单气泡运动符合单红细胞在微管道中运动趋势 (Tomaiuolo *et al*., 2009)

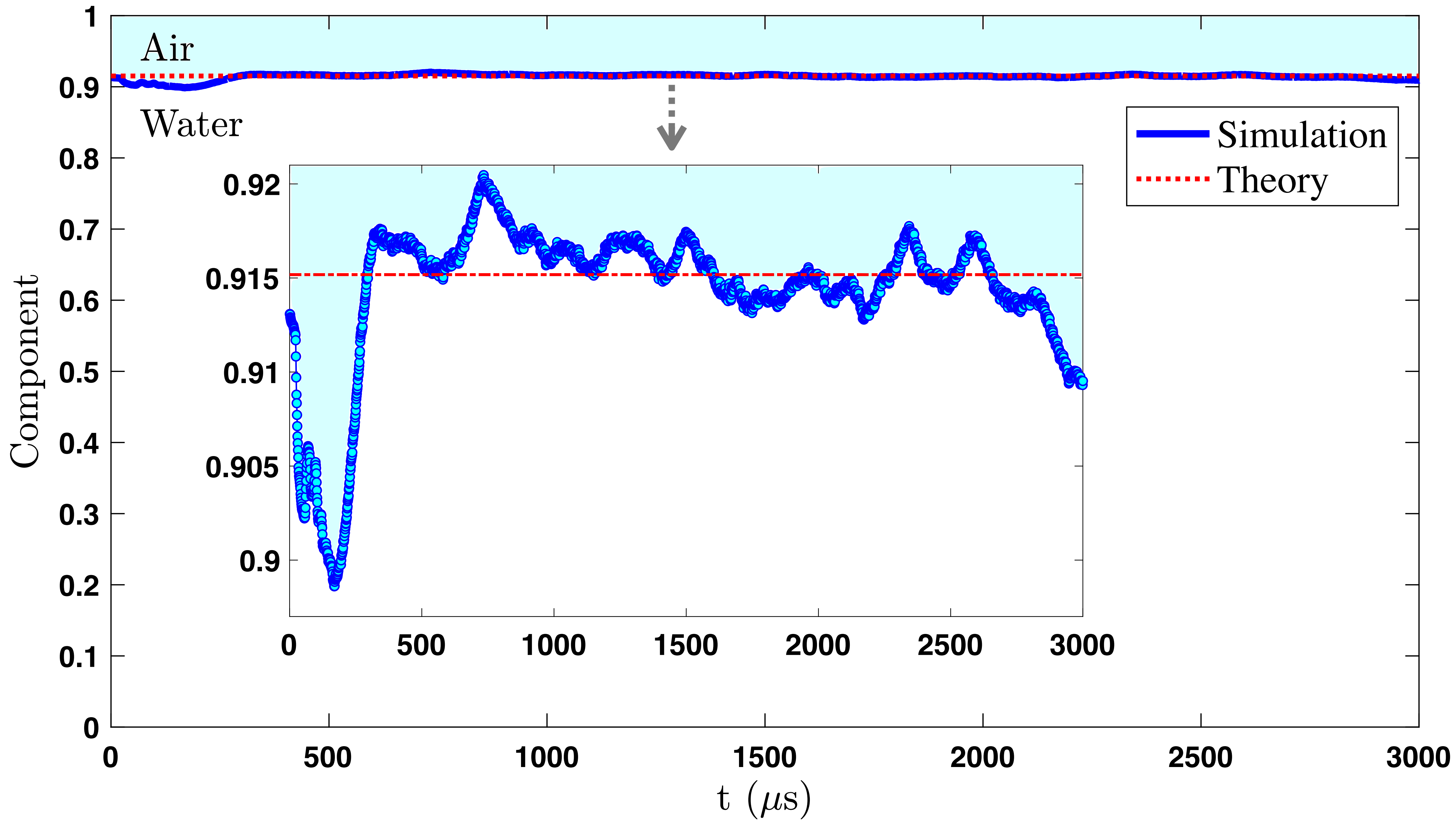




确保仿真计算准确



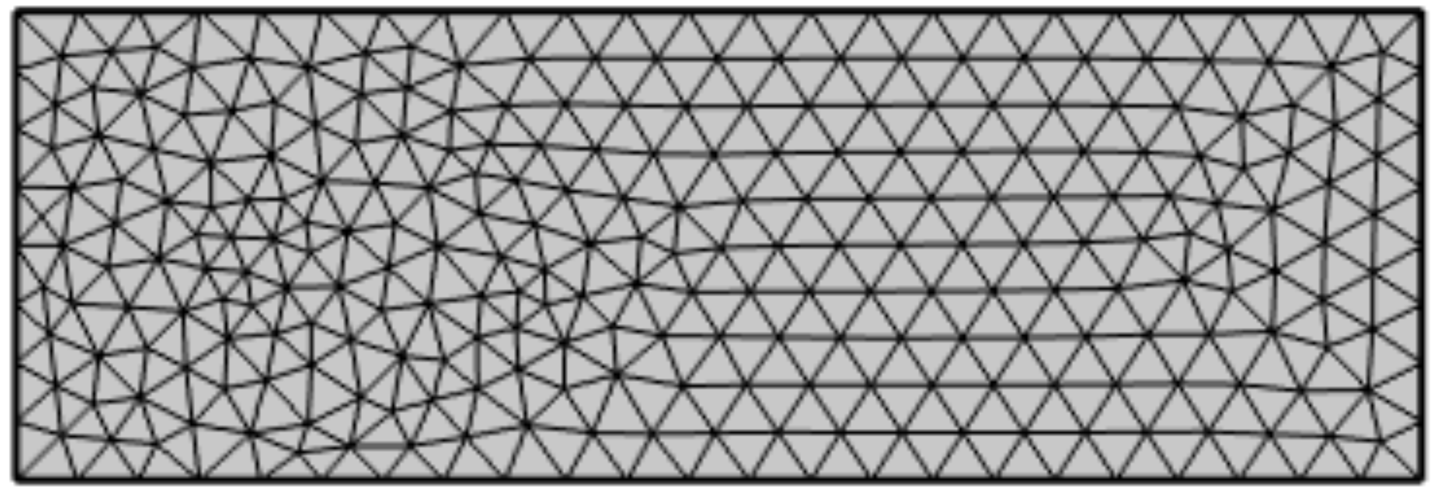
单气泡算例的组分比

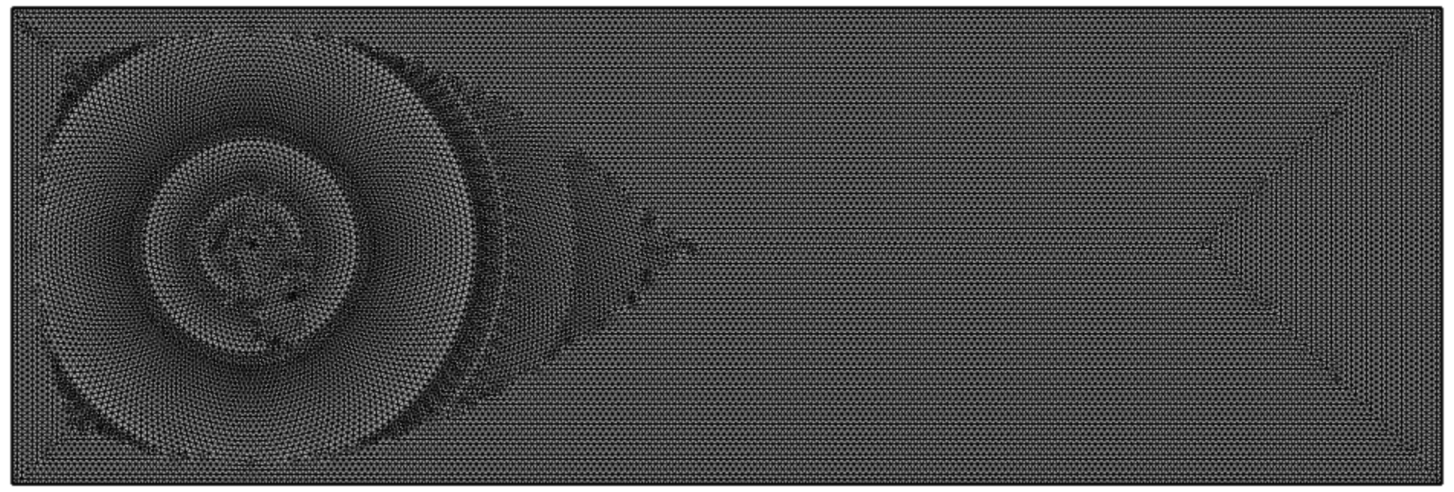


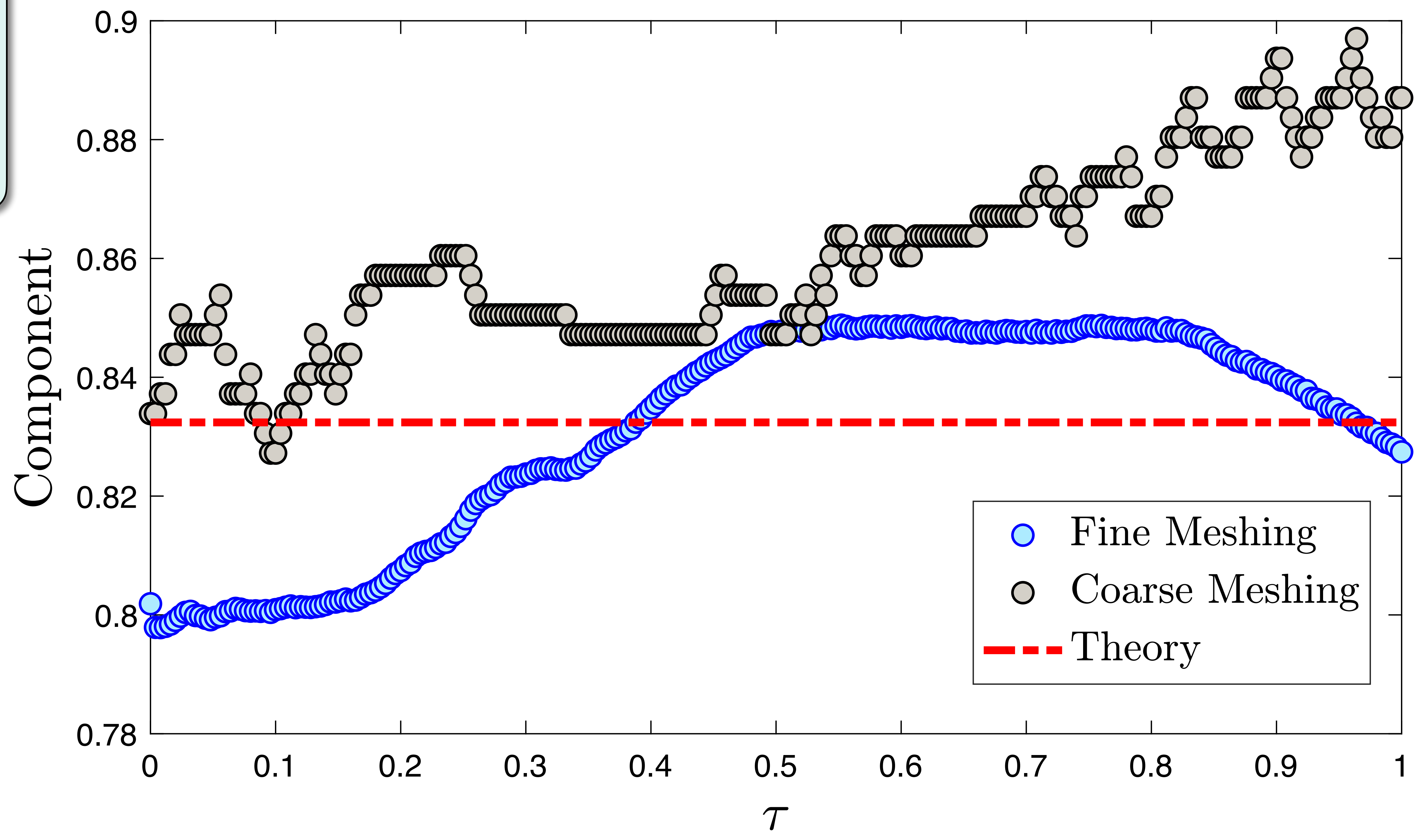
气泡群算例的组分比

网格精度对计算结果的影响

- 粗网格情况下计算结果会产生组分偏离现象，计算结果不准确
- 精密网格运算量需求大



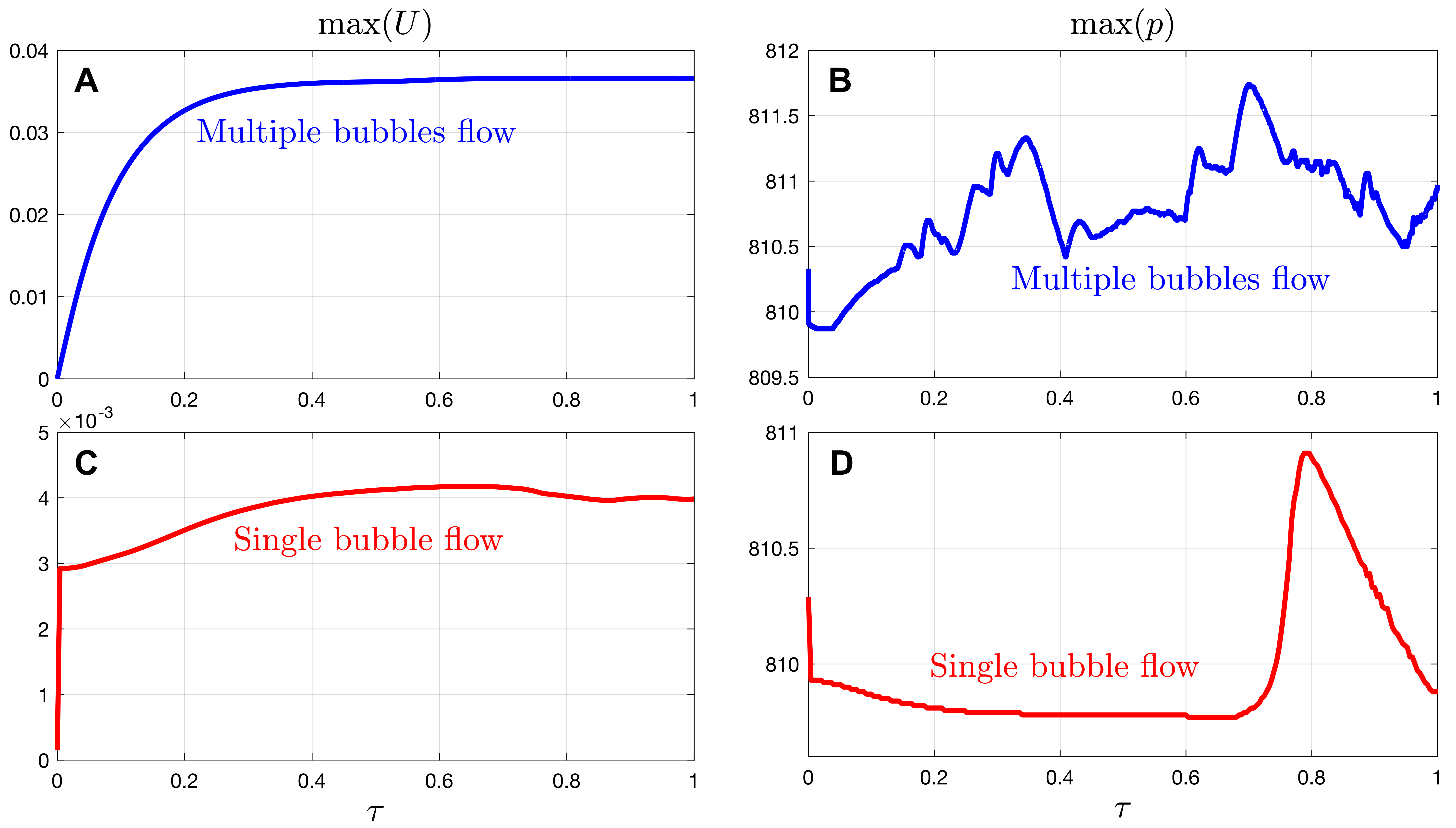




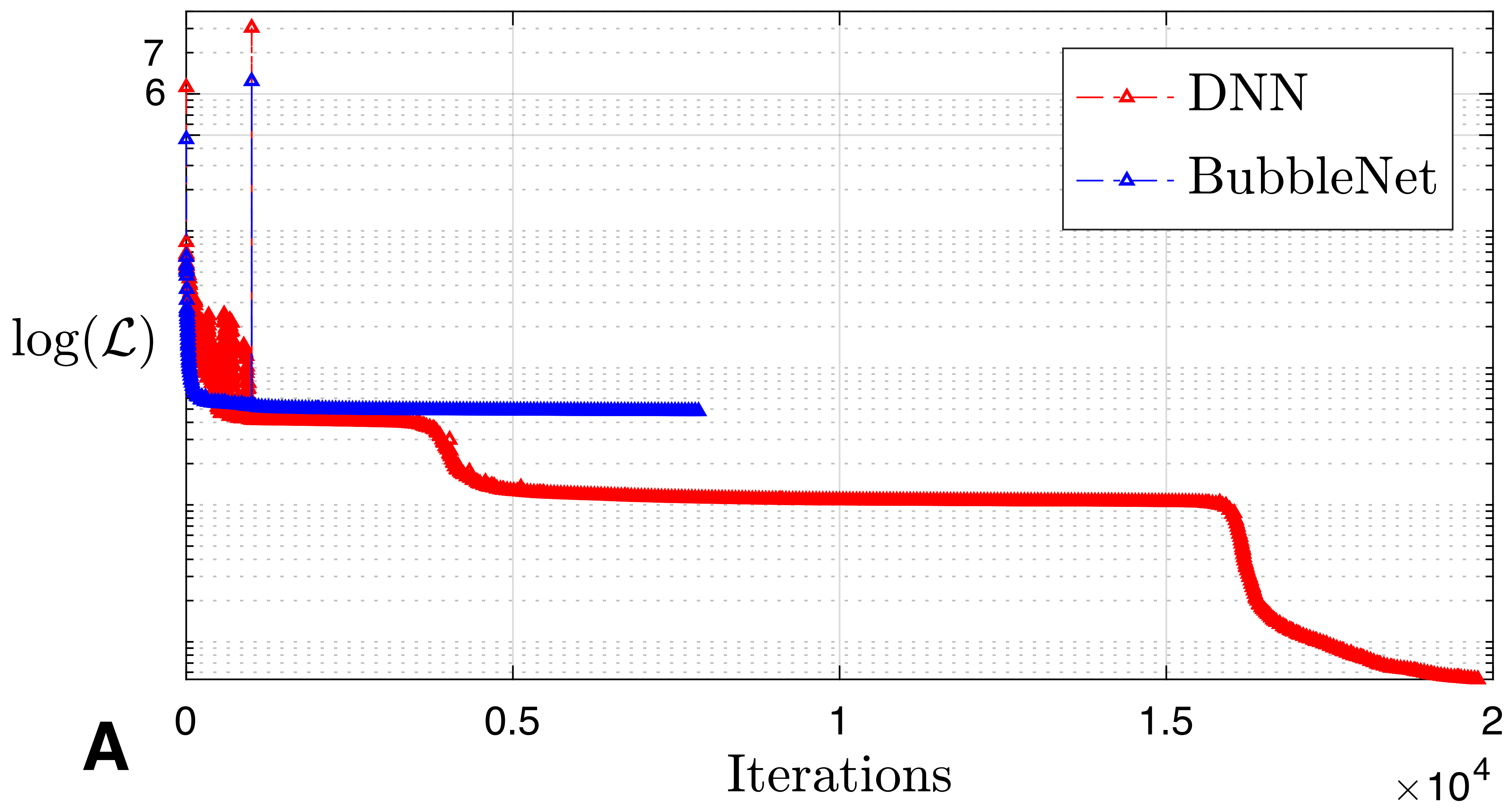
为什么要引入TDN?

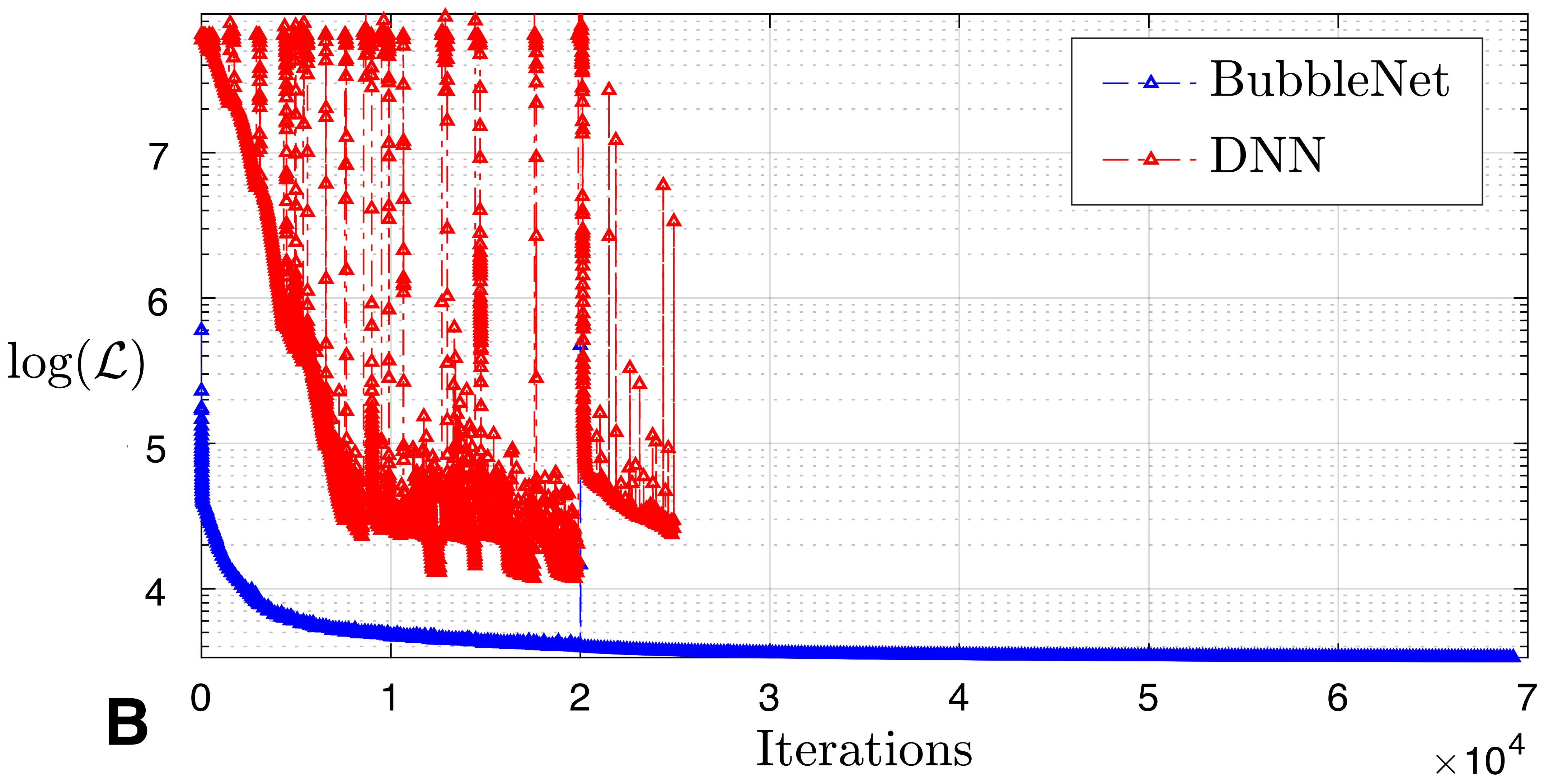
时间离散归一化器

- 最大值随时间变化明显
- 对整个时空域进行归一化会导致特定时间段物理特征被剥夺
- 不进行归一化训练耗费时间资源更大



神经网络：迭代 & 训练

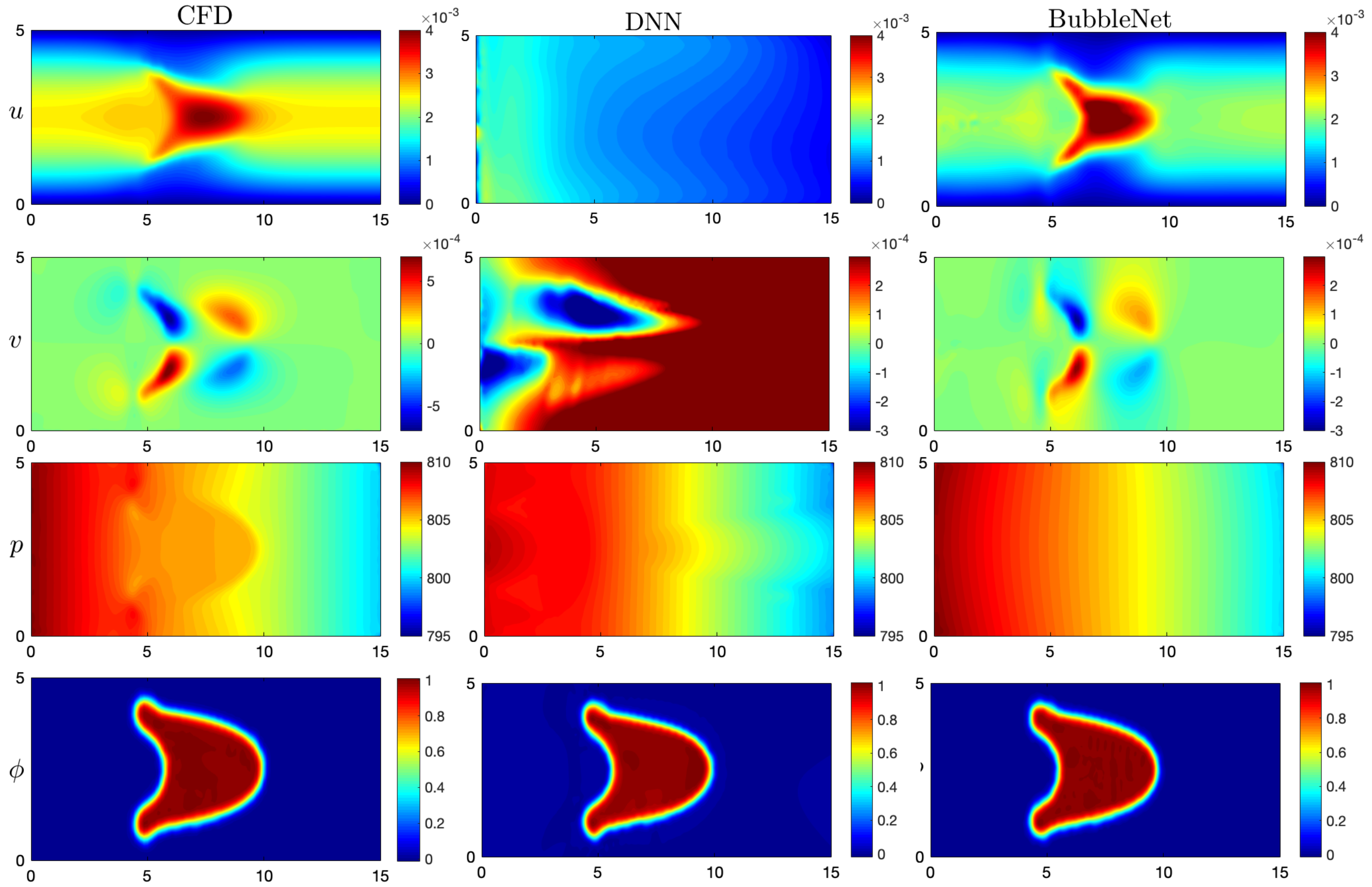




- 对于单气泡算例BubbleNet损失更大，训练更快结束
- 对于多气泡算例BubbleNet损失更小，训练时间更长

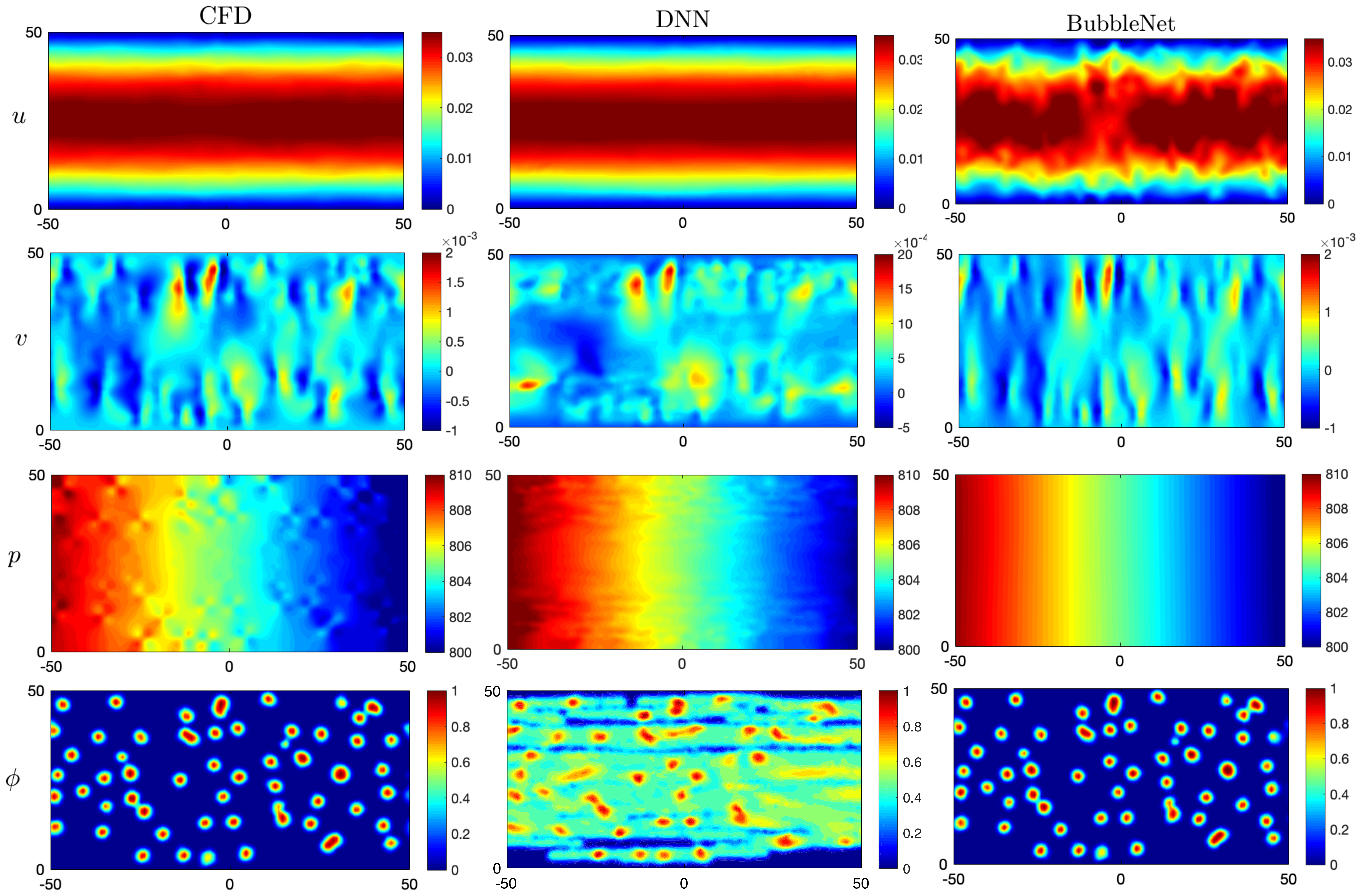
机器学习预测

- 单气泡流动：BubbleNet训练效果显著高于DNN
- 预测结果数值上存在偏差，但是物理趋势基本捕捉

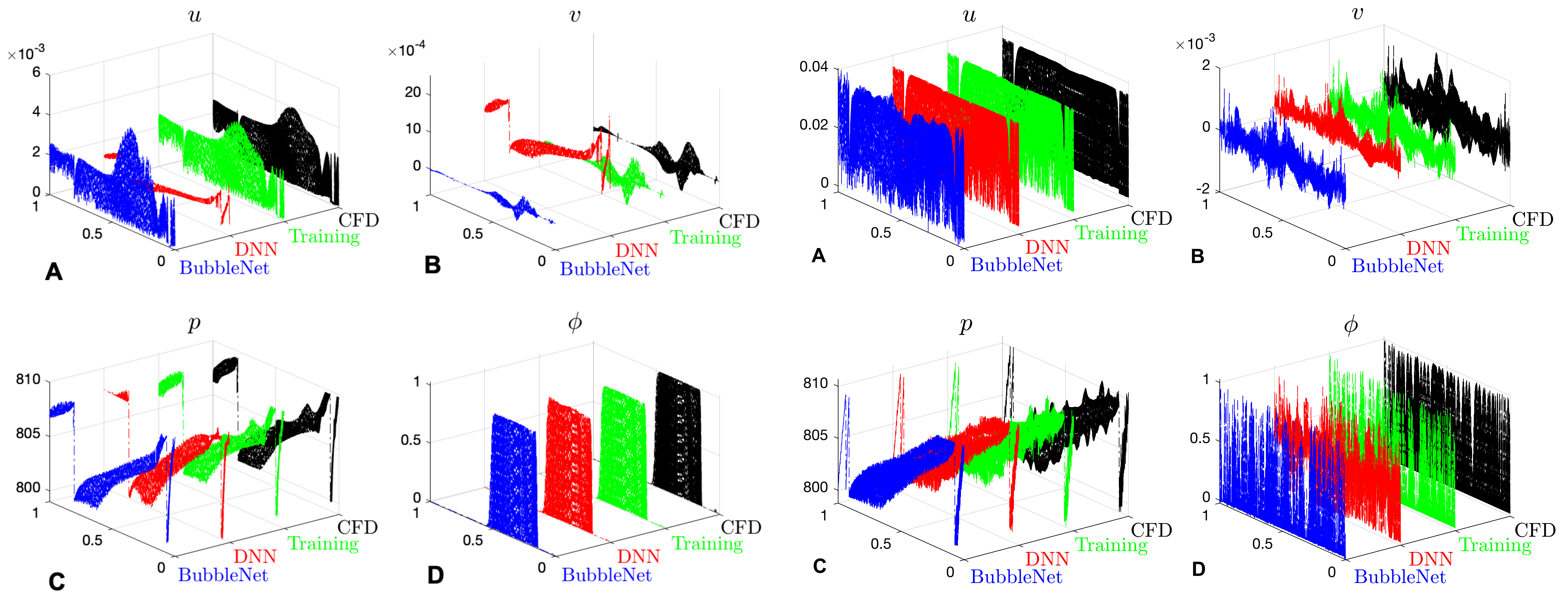


机器学习预测

- BubbleNet在预测数值上更加准确
- 气泡运动形式也被BubbleNet精准捕捉
- 内嵌流函数以及BubbleNet过度关注v，导致速度场u产生波动
- DNN基本捕捉到流场趋势和信息，对v数值上有偏差



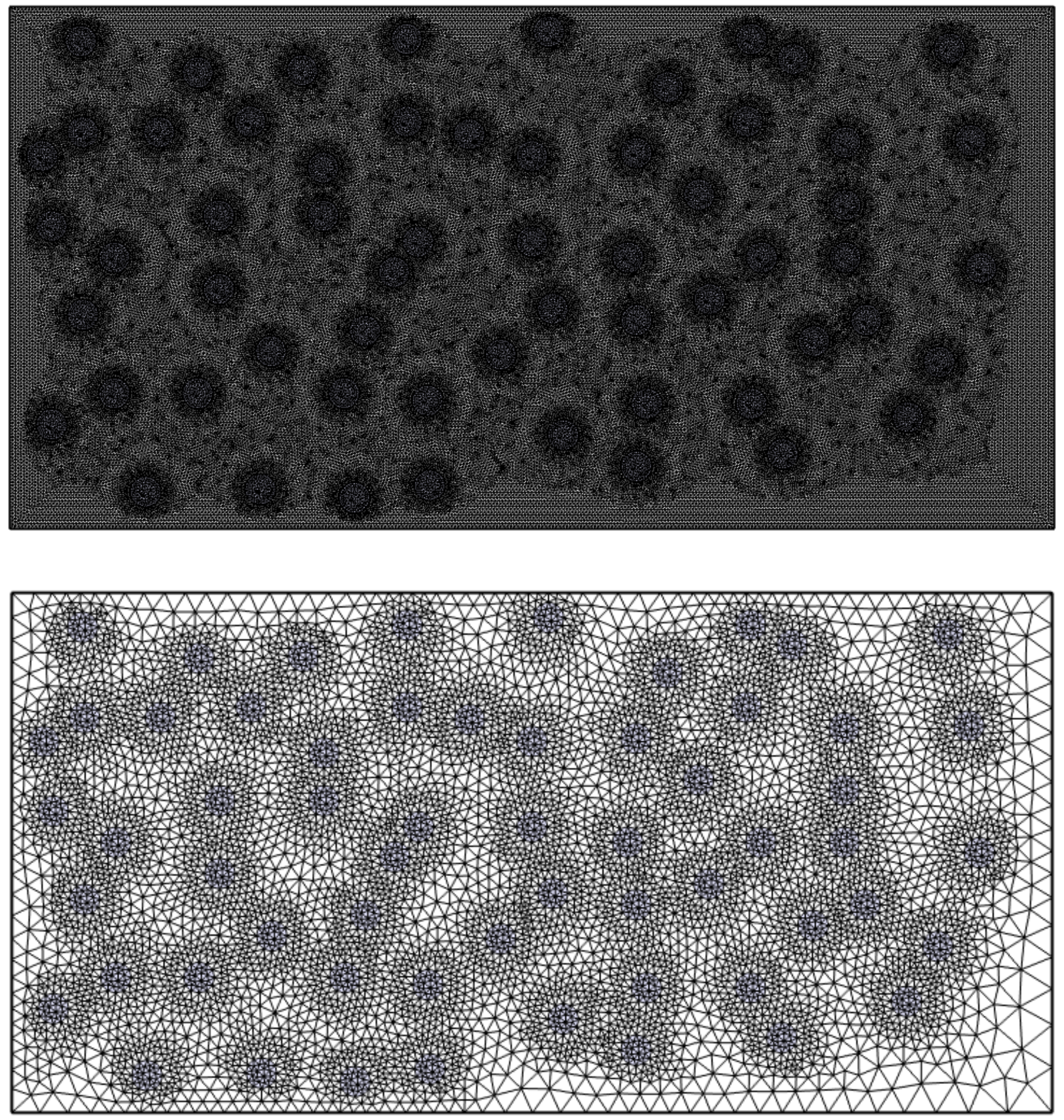
机器学习：数据粗化的验证

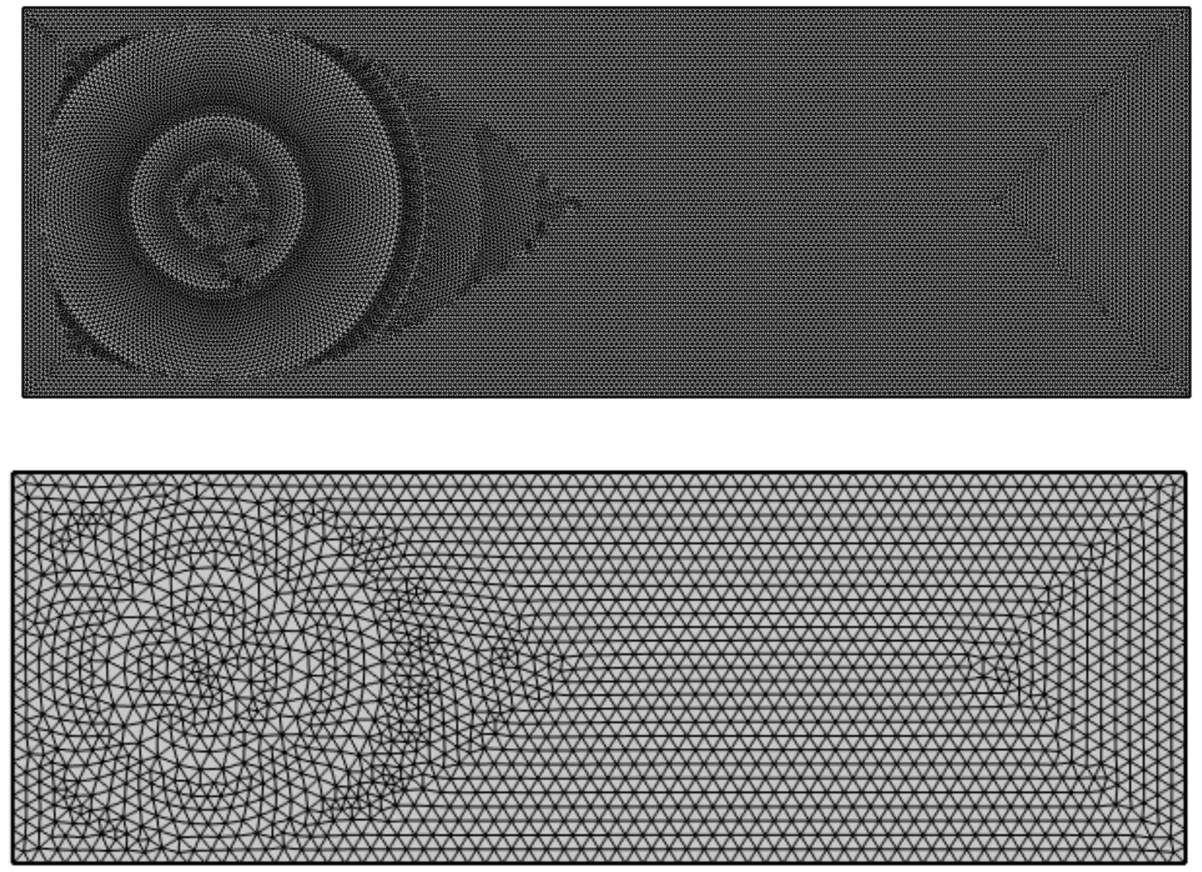


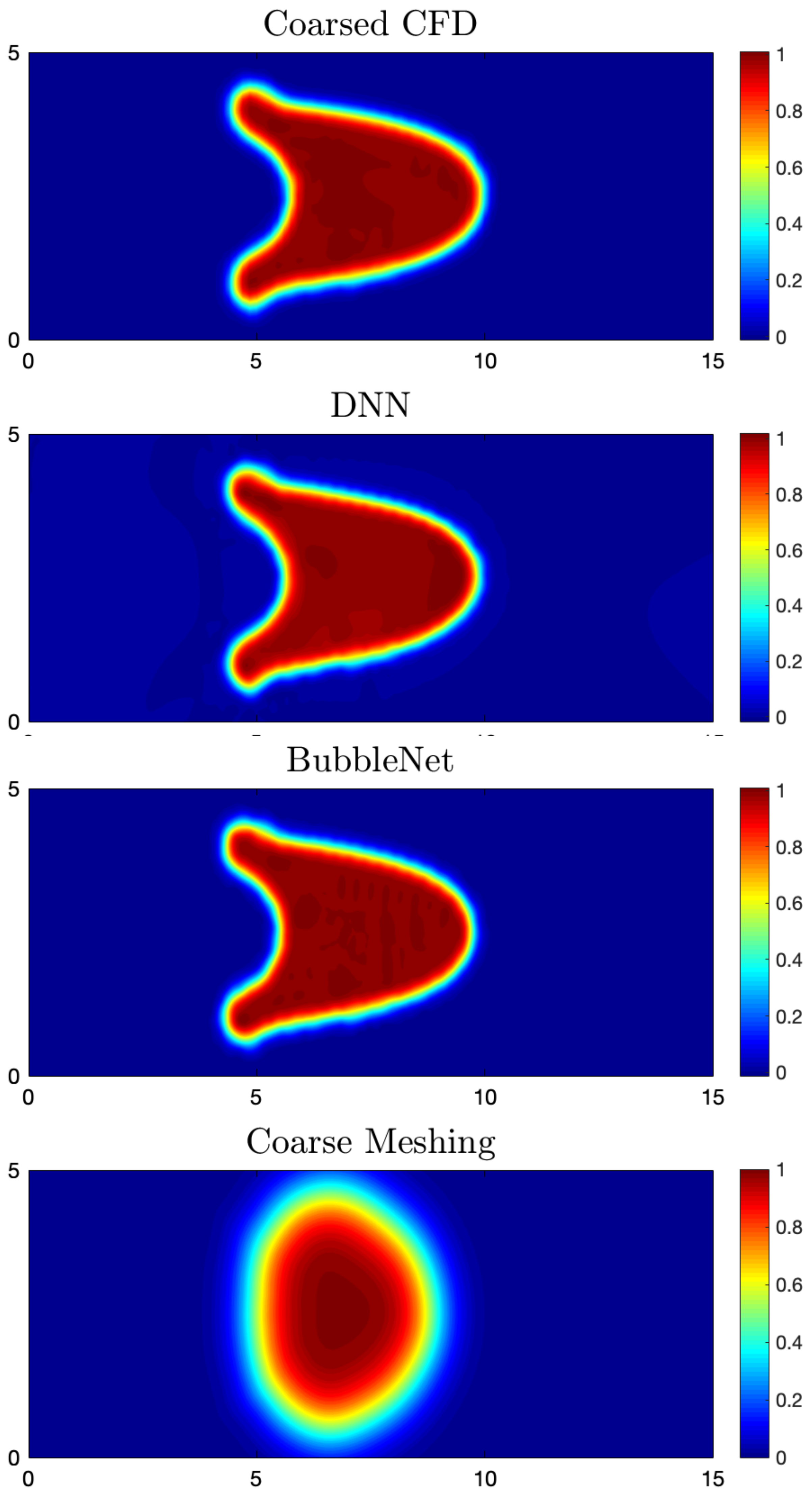
为什么要使用数据粗化

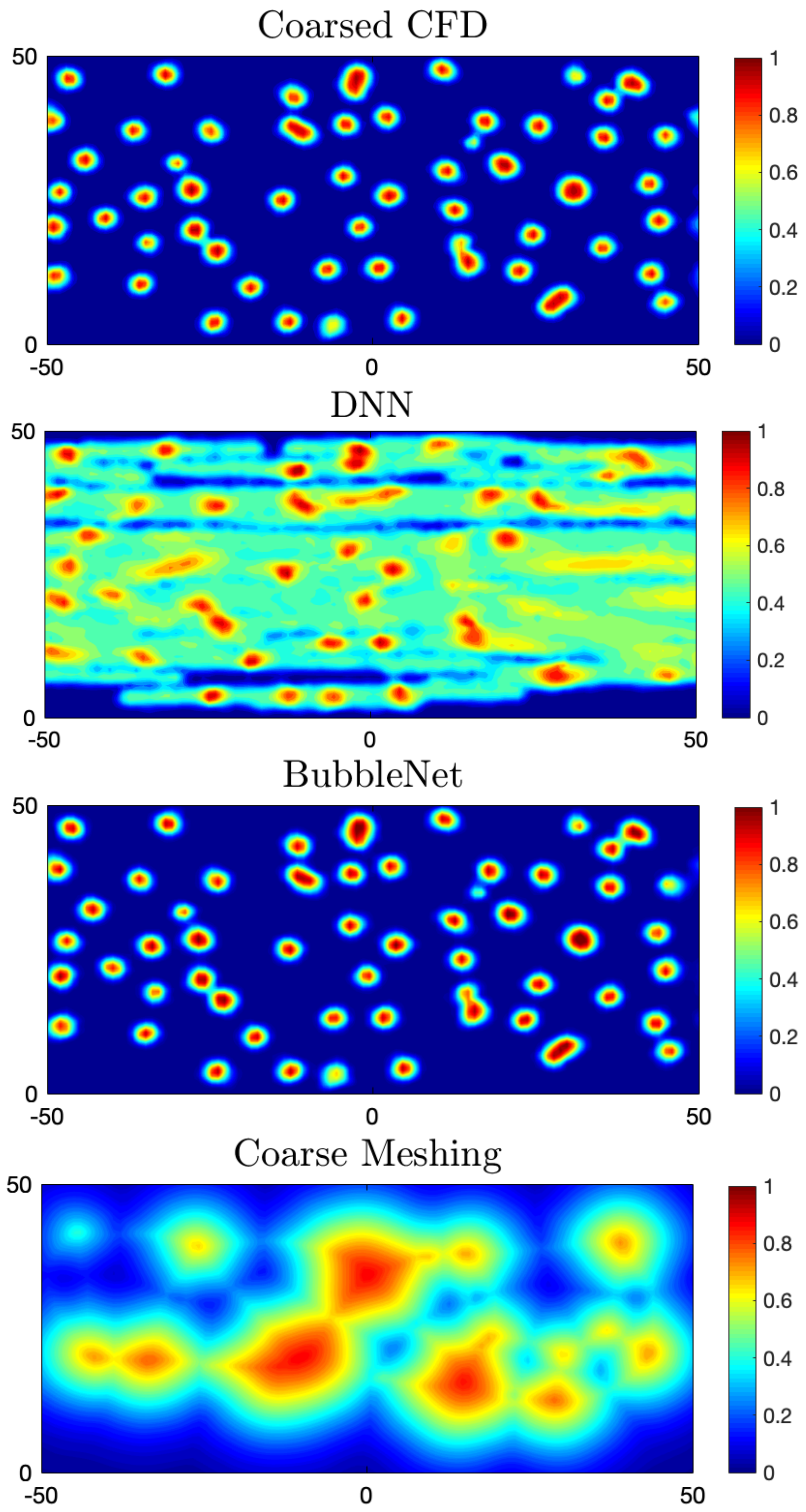
- 精密网格： 75302
- 训练数据： 3766
- 粗化网格： 7833

- 精密网格： 24182
- 训练数据： 2419
- 粗化网格： 2102

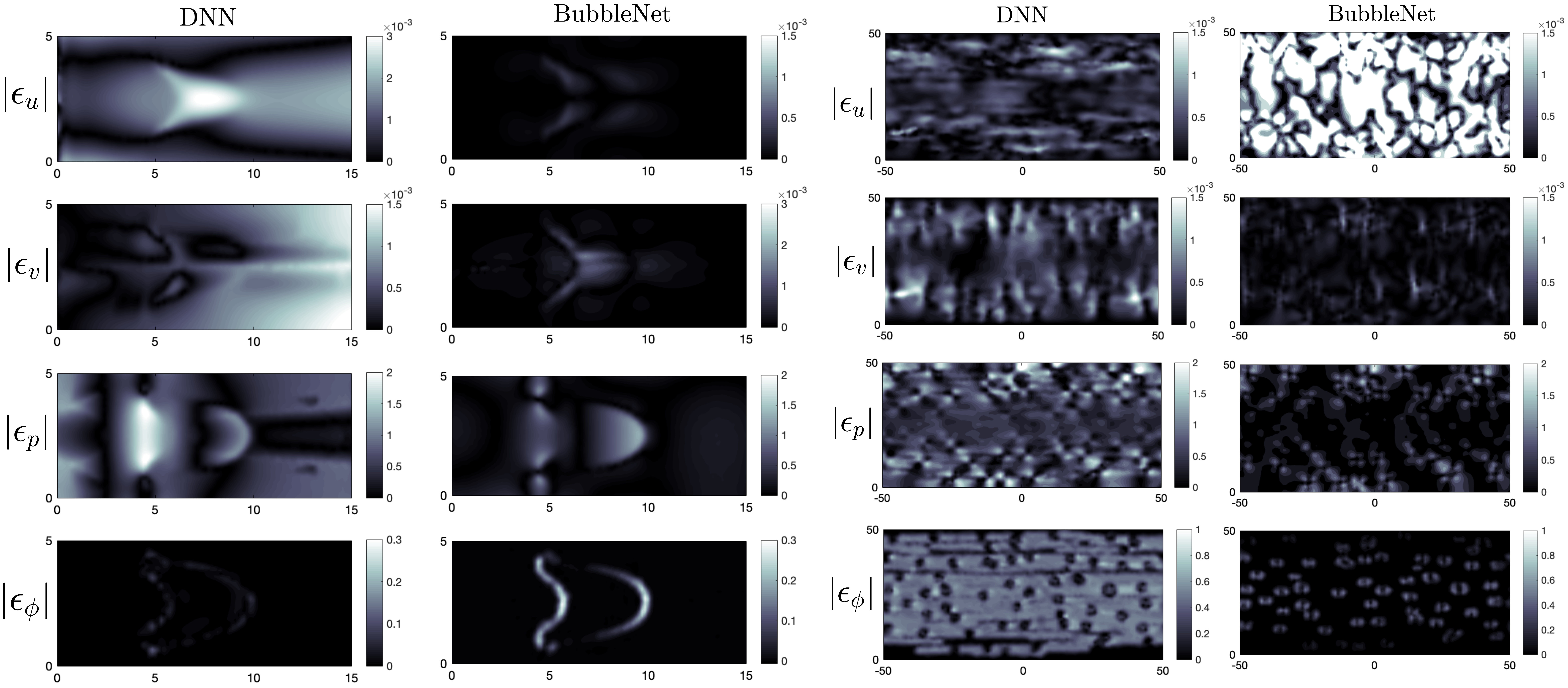








机器学习：误差分析


DNN
BubbleNet
DNN
BubbleNet
$|\epsilon_u|$
$|\epsilon_v|$
$|\epsilon_p|$
$|\epsilon_\phi|$
$\times 10^{-3}$

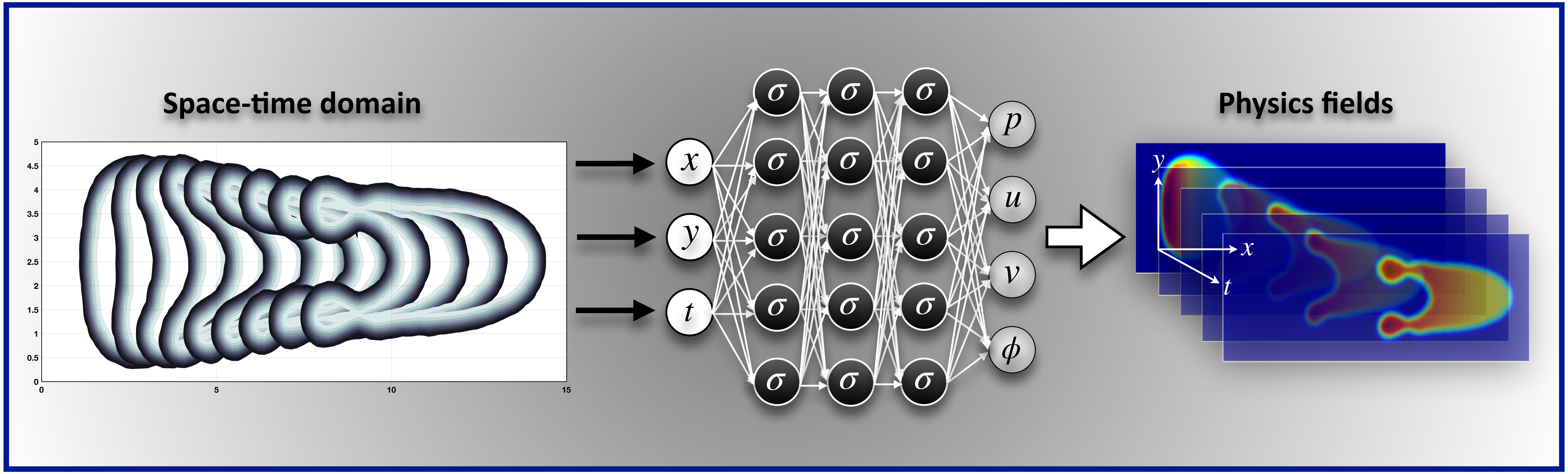
结论

- 粗网格会导致组分丢失，多相流需要精细网格计算
- 气泡流：时空耦合 & 时间域上物理量数值变化范围大
- BubbleNet训练效果更好，更逼近真实物理数据
- 粗化数据的神经网络训练比直接使用粗化网格进行CFD计算精度高

致谢 & 声明

- 项目主页：hanfengzhai.net/BubbleNet
- 开源代码：github.com/hanfengzhai/BubbleNet
- 引用参考：arxiv.org/abs/2105.07179

提问环节 Q&A



Jun. 18, 2021