

基于内嵌物理机理神经算子模型加速空腔流模拟 ——测试报告

孟旭辉

华中科技大学数学与应用学科交叉创新研究院

1 问题设置

Navier-Stokes 方程是流体力学的基本控制方程，发展针对该方程的快速求解器对流体力学的研究具有重要意义。本项研究将尝试采用神经算子模型实现对典型流动问题的快速求解，考虑的具体案例为不可压缩顶盖驱动方腔流，其控制方程如下：

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u},\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{u} = (u, v)$ 表示 x - 和 y - 方向的速度; $x, y \in [0, L]$; P 为流体压力; ν 为动理学粘度。在该流动问题中，除了上板外，其余边界均静止不动。上板拖动速度如下：

$$u = U \left(1 - \frac{\cosh[r(x - \frac{L}{2})]}{\cosh(\frac{rL}{2})} \right), \quad v = 0,$$

其中 U, r 及 L 均为常数，且 $r = 10, L = 1$ 表示方腔长度。

在该问题中，我们采用格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) [1] 生成了 100 个不同雷诺数 ($\text{Re} = UL/\nu$) 时对应的流场，具体为 $\text{Re} \in [20, 2080]$ ，步长为 20，并以此为训练数据。随后我们在 $\text{Re} \in [100, 2080]$ 范围内随机生成 10 个与训练数据不同的 Re ，以此作为测试数据检验神经算子模型的精度与计算效率。**指南要求在计算精度相当时，相比于 LBM，内嵌物理机理神经算子模型计算效率提升达到 150% 以上。**

2 内嵌物理机理 DeepONet 简介

在本次研究中，我们采用的模型为内嵌物理机理的 Deep Operator Networks (PI-DeepONet) [2]。其中，DeepONet 示意图如 1 所示，**内嵌物理机理即类似 PINN 采用自动微分将问题设置中的不可压方程嵌入网络**。如图，DeepONet 由两个子网络组成，即 Branch 网络 (BN) 和 Trunk 网络 (TN)。其中，BN 的输入是由一系列在固定坐标处函数

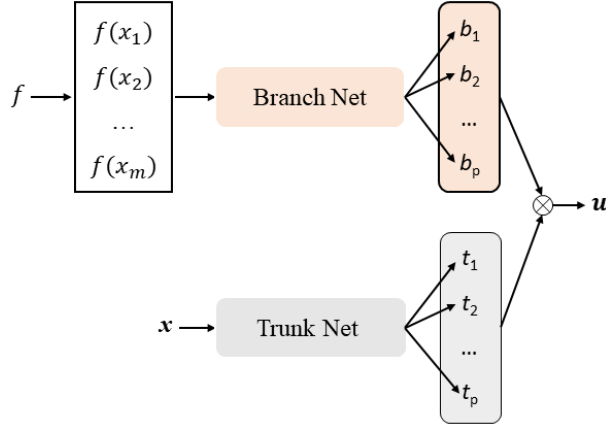


Figure 1: DeepONet 示意图。

值 (x_1, x_2, \dots, x_m) 表示的函数，其输出为如下向量: $[b_1, b_2, \dots, b_p]$ 。此外，TN 以 \mathbf{x} 为输入，输出为如下向量: $[t_1, t_2, \dots, t_p]$ ；DeepONet 的输出为此两向量的点积，即 $\mathbf{u} = \sum_{j=1}^p b_j t_j$ 。理论结果表明，该模型能近似任意非线性算子。

在该研究中，我们采用 DeepONet 近似空腔流中的上板边界条件到整个计算区域内流场的算子。具体而言，我们采用 100 个不同 Re 下的边界条件作为 DeepONet 的输入，整个计算区域内流场速度为输出。在训练完成后，我们将测试数据集的边界条件作为输入，预测测试数据中不同 Re 对应的流场。最后，我们将采用 LBM 的计算结果验证 DeepONet 预测结果的准确性，并比较两种方法的计算精度。与任务一不同，此处每一个不同工况下我们采用 (16×16) 格点上的速度值作为训练数据)，通过嵌入的方程实现流场的超分辨重构。

3 结果分析

我们首先采用 LBM 计算得到训练及测试数据，在计算中采用 256×256 的均匀网格。在 DeepONet 的训练中，我们从 256×256 的网格中均匀选取 16×16 的流场进行计算。在预测集中，我们预测 64×64 均匀网格点上的速度，实现流场超分辨重构。PI-DeepONet 的训练在 NVIDIA RTX 4090 上进行，耗时约为 4700 秒。LBM 模拟和 PI-DeepONet 的预测均在相同硬件 (NVIDIA RTX 4090) 进行。DeepONet 训练完成后预测 10 组不同 Re 对应的流场约为 0.0014 秒；而 LBM 计算测试数据集上 10 组 Re 耗时约为 60 秒。此外，DeepONet 和 LBM 模拟在测试数据集上相对 L_2 误差约为 3.17%。

References

- [1] Liang Wang, Jianchun Mi, Xuhui Meng, and Zhaoli Guo. A localized mass-conserving lattice boltzmann approach for non-newtonian fluid flows. *Communications in Computational Physics*, 17(4):908–924, 2015.

- [2] Lu Lu, Pengzhan Jin, Guofei Pang, Zhongqiang Zhang, and George Em Karniadakis. Learning nonlinear operators via deeponet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature machine intelligence*, 3(3):218–229, 2021.