基于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:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0,$$

$$\partial_t \boldsymbol{u} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \boldsymbol{u},$$

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:

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

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 (Re = UL/ν) 时对应的流场,具体为 Re \in [20,2080],步长为 20,并以此为训练数据。随后我们在 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,神经算子模型计算效率提升达到 150% 以上**。

2 DeepONet 简介

在本次研究中,我们采用的神经算子模型为 Deep Operator Networks (DeepONet) [2],其示意图如 1所示。其中,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值 $(x_1, x_2, ..., x_m)$ 表示的函数,其输出为如下向量: $[b_1, b_2, ..., b_p]$ 。此外,TN 以 \boldsymbol{x} 为输入,输出为如下向量: $[t_1, t_2, ..., t_p]$; DeepONet 的输出为此两向量的点积,即 $\boldsymbol{u} = \sum_{j=1}^p b_j t_j$ 。理论结果表明,该模型能近似任意非线性算子。

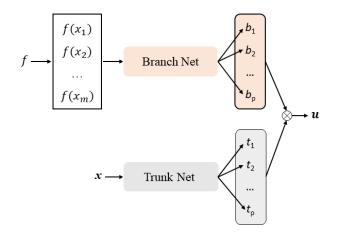


Figure 1: DeepONet 示意图。

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。

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 的训练和预测中,为减少存储量,我们从 256×256 的网格中均匀选取 64×64 的流场进行计算。其中,LBM 模拟和 DeepONet 的训练与预测均在以下硬件进行,CPU 型号: Intel (R) Xeon (R) Gold 6133 CPU @ 2.50GHZ (双核 40 线程)。DeepONet 的训练耗时约为 95 秒,训练完成后预测 10 组不同 Re 对应的流场约为 0.03秒;而 LBM 计算测试数据集上 10 组 Re 耗时大于 3200 秒。此外,DeepONet 和 LBM 模拟在测试数据集上相对 L_2 误差约为 0.33%。

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.