

# 基于神经算子模型加速两相流模拟——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

两相流动在相变换热、石油开采等领域有广泛涉及，发展准确且快速的模拟方法对促进该领域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两相流动问题的快速求解，考虑的具体案例为密度驱动流动两相流。该案例可视为石油开采过程中原油与水在重力作用下流动过程的简化。其控制方程如下：

$$\begin{aligned}\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) &= \nabla \cdot M_\phi(\nabla \mu), \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= -\nabla P + \nabla \cdot [\nu \rho(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F}_s + \mathbf{G},\end{aligned}$$

其中第一个方程描述流体相态演化过程，后两个方程为描述流动的控制方程。在以上方程组中， $\phi$  表示描述相态的序参数； $M_\phi$  为迁移率； $\mu$  为化学势； $\mathbf{u} = (u, v)$  表示  $x$ - 和  $y$ - 方向的速度； $P$  为流体压力； $\nu$  为动理学粘度； $\mathbf{F}_s = \mu \nabla \phi$  表示表面张力； $\mathbf{G}$  表示重力。更多细节参见 [1]。

如图 1 所示，在  $x \times y = [0, d] \times [0, 4d]$  的计算区域内充满了密度不同的两种流体，其中红色和蓝色表示密度相对更大和更小的流体，两种流体初始分界面为  $h = 2d + 0.05d \cos(2\pi x/\lambda)$ 。据此给出初始时刻流体相态参数及序参数为  $\phi(x, y) = \tanh(2(y - h)/D)$ 。在重力作用下 ( $y$  的负方向)，密度大的流体将会向下运动，流体相态随之发生变化。该流动控制可由以下两个无量纲参数描述：

$$Re = \lambda \sqrt{Ag\lambda/(1+A)}/\nu, \quad A = (\rho_l - \rho_g)/(\rho_l + \rho_g)$$

我们采用 [1] 中提出的格子 Boltzmann 模型对该流动过程进行模拟，生成训练和测试数据集。其中， $d = \lambda = 256$ ， $\sqrt{g\lambda} = 0.04$ ， $A = 0.1$ ， $D = 40$ 。我们以 20 为步长在  $Re \in [20, 1000]$  时模拟了  $t \in [0, 80000dt]$  范围内的流体运动过程 (对应无量纲时间约为 4)；此外，我们以 55 为步长在  $Re \in [55, 550]$  时模拟了  $t \in [0, 80000dt]$  范围内的流体运动过程 (对应无量纲时间约为 4)，分别作为训练和测试数据集。在训练和测试数据集中，计算网格与 [1] 保持一致，为  $x \times y = 256 \times 1024$  均匀网格。

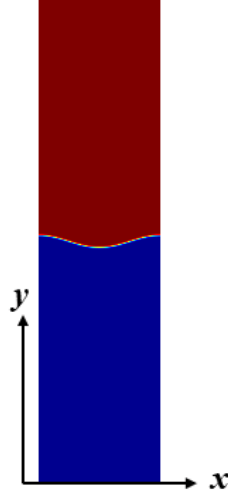


Figure 1: 计算区域及初始条件示意图

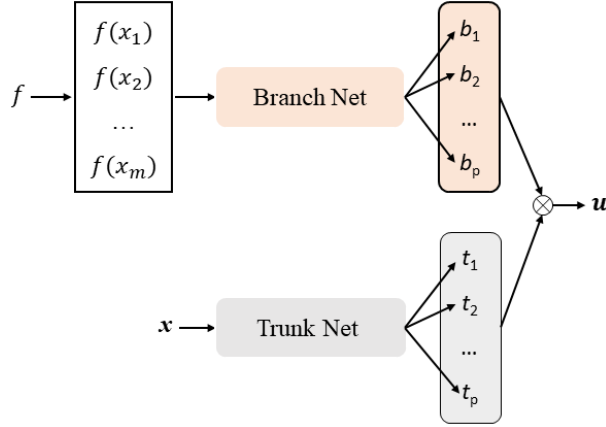


Figure 2: DeepONet 示意图

## 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 2 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  $(x_1, x_2, \dots, x_m)$  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 近似无量纲参数  $Re$  到给定时刻的流体界面分布，即  $\phi(t \approx 4)$ ，对应的解算子。具体而言，我们采用 100 个不同  $Re$  作为 DeepONet 的输入， $t \approx 4$  时候流场序参数为输出。在训练完成后，我们将测试数据集的  $Re$  作为输入，预测测试数据中不同  $Re$  对应的  $t \approx 4$  时候流场序参数。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。

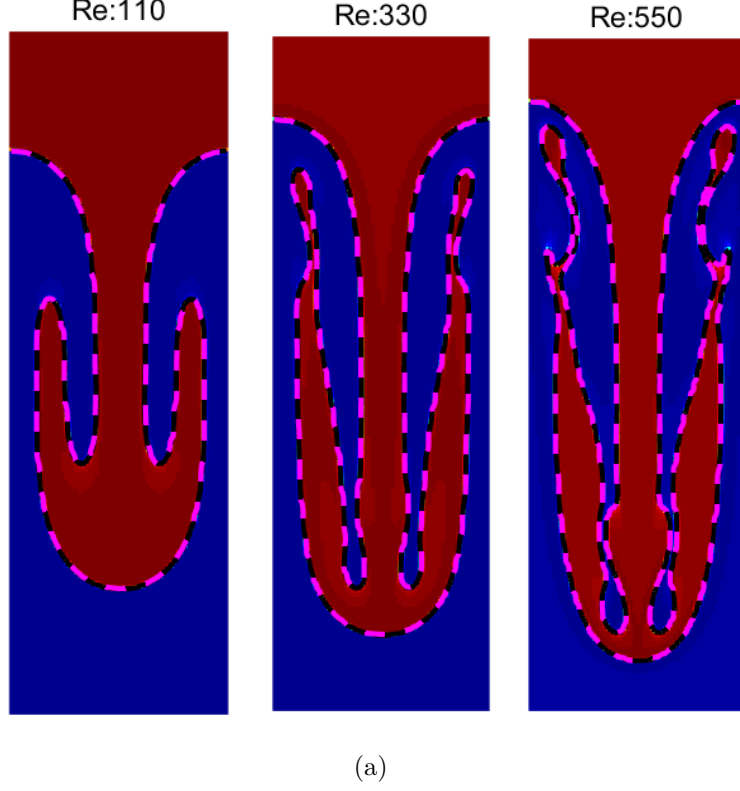


Figure 3: DeepONet 在不同 Re 时预测的界面位置, 即  $\phi(t \approx 4)$ 。粉色虚线: DeepONet 预测值; 黑色实线: 格子 Boltzmann 模型模拟结果

### 3 结果分析

在 DeepONet 的训练和预测中, 为减少存储量, 我们从  $[0, 256] \times [100, 900]$  的网格中均匀选取  $64 \times 200$  个点进行计算。其中, LBM 模拟和 DeepONet 的训练与预测均在以下硬件进行, GPU 型号:NVIDIA Geforce RTX 3090。DeepONet 的训练耗时约为 33 秒, 训练完成后预测 10 组不同 Re 对应的流场约为 0.01 秒; 而 LBM 计算测试数据集上 10 组 Re 耗时约为 600 秒; 加速比达到了指南要求。

此外, 我们在图 3 中画出来 DeepONet 在不同 Re 时预测界面位置和参考解的对比, 结果显示 DeepONet 和 LBM 模拟结果高度吻合。在 10 组测试数据集上, 相对  $L_2$  误差约为 7.8%。需要注意的是, 由于计算区域界面分布中存在部分为零的值, 导致其计算相对误差时数值较大。如排除该因素, 预测值与参考值的均方误差约为  $4 \times 10^{-3}$ 。

### References

- [1] H. Liang, B. C. Shi, Z. L. Guo, and Z. H. Chai. Phase-field-based multiple-relaxation-time lattice boltzmann model for incompressible multiphase flows. *Phys. Rev. E*, 89:053320, May 2014.

- [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.