

Please do not redistribute or copy this preprint without permission of Hanfeng Zhai.



上海大学

SHANGHAI UNIVERSITY

毕业设计（论文）

UNDERGRADUATE PROJECT (THESIS)

题目：基于物理深度学习的微气泡系统动力学预测

学 院：力学与工程科学学院

专 业：理论与应用力学

学 号：17121632

学生姓名：翟晗锋

指导教师：胡国辉

起讫日期：2021.1.18 - 2021.6.18

基于物理深度学习的微气泡系统动力学预测

摘要

微气泡及气泡群动力学在为管道中的流动在生物医学，物理化学领域有着极其广泛的应用和研究。微环境下气泡运动涉及到单气泡流动变形，气泡间的相互融合及剥离以及两相流作用等复杂力学问题，为相关研究提出挑战。为研究微流体环境下气泡运动，本文设定两算例进行探究：¹ 微管道中单气泡流动变形及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融合及剥离，算至 $3000\mu\text{s}$ 后大部分气泡已经碰撞融合。其中，单气泡算例与微管道实验中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。微气泡群算例整体流体速度分布符合泊肃叶流动规律。对两算例，我们对组分进行分析印证算例符合前后组分守恒，并对可能的误差进行了分析。

针对计算过程，计算多相流对精度需求很高，因若网格精度不够则会导致计算过程中某一相流体出现组分丢失；因此，数据驱动的方法很有必要。随着机器学习快速发展物理深度学习在近年增长迅猛。基于物理神经网络 (PINN)，我们提出了一种全新的可用于预测气泡动力学的神经网络结构 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可能较大差异会导致特定时间步特征被“剥夺”使得训练神经网络时让网络被“欺骗”；所以时间离散归一器使网络预测时空数据更准确。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。

关键词：机器学习；物理神经网络；多相流；气泡动力学；微流体。

Predicting micro-bubble system dynamics with physics-informed deep learning

Abstract

Micro-bubbles and bubble systems are widely applied in biophysics, medical engineering, chemical physics, etc. Microfluidic bubble movements involve deformation of single bubbles, collision, mixture and rupture of bubbles, etc. These complex problems poses a real challenge for studying such. To investigate the mechanism of micro-bubbles dynamics, we here set up two cases: ¹single bubble movement confined in micropipe and ²micro-bubbles group movement in microfluids. The related parameters are given referred to their biological counterparts. Simulation results indicate that single bubble front interface will flow outwards as an increasing parabolic shape while the tale gets flow inwards till two attached smaller bubbles get ruptured from the main bubble. Grouped bubbles collides to be fused or ruptured. The single bubble deformation agree with red blood cell deformation shape confined in pipe experiment. The fluid phase velocity distribution agree with general distribution of the Poiseuille flow. For both the cases, we analyze the gas-liquid component to ensure correct calculation of simulations and estimate the possible errors.

Multiphase flow simulation requires high computation accuracy due to possible component losses may be caused by sparse meshing during iterations. Hence, data-driven methods can be adopted as a useful tool. Based on physics-informed neural networks (PINN), we proposed a novel deep learning architecture BubbleNet, which entails two main parts: a deep neural net (DNN) and inner-contained continuum equation as physics information. We also elicit Time Discretized Normalizer (TDN), an algorithm to normalize field data per time step before training. We applied and DNN and BubbleNet algorithms, respectively, to predict the physical distribution (u, v, p, ϕ) of the bubble movement. For the two cases, we aim to predict the distribution at $2000\mu\text{s}$ for single bubble case and $1500\mu\text{s}$ for multi bubbles case. Our BubbleNet algorithms exhibits higher accuracy for predictions and requires less iterations. the TDN can effectively improve the accuracy with regards to due to the data scale variance among the time-space field may 'confuse' the training of the NN. The proposed algorithms can be applied to various fields including electrochemistry, electromagnetic, combustion and related mathematical physics problems with wide engineering backgrounds.

Keywords: Machine learning, physics-informed neural network, multiphase flow, bubble dynamics, microfluids.

目 录

摘 要	I
Abstract	II
第 1 章 绪论	1
1.1 本文研究背景与意义	1
1.2 机器学习与人工智能	1
1.3 机器学习在计算物理领域的应用	2
1.4 多相流与气泡动力学	3
第 2 章 理论背景	4
2.1 机器学习	4
2.1.1 神经网络	4
2.1.2 物理深度学习	7
2.2 多相流与气泡产生	9
2.2.1 流体力学基本理论	9
2.2.2 多相流理论	10
第 3 章 微气泡流动	12
3.1 模型构建	12
3.1.1 单气泡模型	12
3.1.2 复杂多气泡系统	14
3.2 动力学分析	15
3.2.1 单气泡计算结果	15
3.2.2 多气泡计算结果	19
第 4 章 数据驱动预测与学习	23
4.1 DNN: 深度人工神经网络	23
4.2 BubbleNet: 气泡物理神经网络	26
4.3 训练 & 计算结果	27
结 论	43
附 录	53
附录 A N-S 方程的推导	53
附录 B 多相流理论的数学基础	54
致 谢	56

第 1 章 绪论

1.1 本文研究背景与意义

近年来，机器学习和深度学习因为其在学术界、工业界甚至娱乐界的强大表现获得大量关注。因为其针对特定问题的精度和解决问题的广度越来越受到人们的关注以及资本的投资。同时，在计算物理领域，机器学习也在快速的改变着传统算法。但是机器学习在该领域内却并没有互联网，社交软件中使用的那么广泛和深入。在计算科学领域中，计算流体力学算法因为涉及到大量的工业科学技术应用，所以常年受到主要关注。这其中，多相流，特别是气泡流在生物，医学，化学等领域有着大量的应用价值；同时也具有相对完善的理论研究。因此，该问题的研究很有意义，也很适合在相应问题上进行创新。本文就微观尺度下的气泡流动进行研究，通过物理深度学习的方法对其进行学习预测。

1.2 机器学习与人工智能

机器学习是一个通过经验和数据可以自动提高的计算机算法^[1]。近年来，随着科技不断进步，计算资源和硬件的不断提升，以及大量数据的易于获取，机器学习研究领域取得飞速进展和进步。同时，随着 AlphaGo 的横空出世^[2,3]，又随着机器学习和深度学习以其巨大的潜能和其在医疗^[4-6]，公共卫生^[7,8]，商业广告^[9,10] 等领域取得的巨大成功，针对不同问题提出的机器学习算法不断更新出现并推动着机器学习的进步。

机器学习在各领域的成功离不开其背后大量研究的支持。在医疗领域中，AlphaFold 可以自动识别蛋白质结构的能力更是颠覆传统医学的限制^[11]；同时，对于新型冠状病毒（SARS-CoV-2）的 CT 感染预测也使得机器学习快速，通用性强，广泛等优点充分体现^[12,13]。在公共卫生领域，随着 COVID-19 疫情的爆发，基于机器学习的整体疫情传染预测更是为疫情发展提供重要参考^[14,15]。在商业广告领域，机器学习基于用户大量数据的训练和学习使其可以精准有效给特定用户群体推送广告，极大的促进商业行为^[16-18]。同时，基于 Google 开发的深度学习开源平台 TensorFlow^[19] 已经大量的被国内外知名公司机构使用。

随着互联网的蓬勃发展和智能电子设备的普及化，普通民众更易在网络平台上

产生数据，数据正在以前所未有的速度增长^[20, 21]。基于海量数据下，机器学习算法得以发挥高水准。基于大数据的深度学习（DL）广受关注^[22]。而人工神经网络（ANN）作为最成熟，最有效的学习方法之一，更是被集中研究^[23, 24]。其中，最为简单却得到广泛应用的人工神经网络框架就是前向传播神经网络（FNN）^[25]。同时，循环神经网络（RNN）因其可以提取序列中随时间变化的特征等优势^[26]被广泛应用在自然语言处理（NLP）^[27]、计算机视觉（CV）^[28]、和计算生物学（CB）^[29]等领域。但是，针对图像识别和图像处理问题，卷积神经网络（CNN）被更加广泛的使用^[30]。更为重要的是，基于 CNN 开发的 ImageNet 因其精准和有效使得 CNN 被更多计算机视觉领域的研究人员青睐^[31]。针对不同的图像处理方法，基于对图片特征进行识别和分割的 U-Net 也成为计算机视觉领域得力工具之一^[32]。基于以上深度学习算法和工具，Google 公司于 2015 年发布开源深度学习计算平台 TensorFlow^[19]，其被广泛应用于工业和学术界。而后的 2016 年，Facebook AI 实验室也接连发布了深度学习开源平台 PyTorch^[33]。现如今，这两大平台已成为计算机机器学习领域内研究人员广泛使用和开发。

1.3 机器学习在计算物理领域的应用

流体力学最早起源于古希腊时期，从亚里士多德和阿基米德对浮力和流静力学的研究^[34, 35]。经过长时间的发展到从欧拉到 Claude-Louis Navier 和 Sir George Gabriel Stokes 提出 Navier-Stokes (N-S) 方程具有相对完备理论基础。因为 N-S 方程的非线性，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进行数值求解。上世纪，大量方法如有限差分 (Finite Difference Method, FDM)^[36, 37]，有限体积 (Finite Volume Method, FVM)^[38-42]，有限元 (Finite Element Method, FEM)^[43]，光滑粒子 (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)^[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。但是其缺点为通用性差，计算速度和精度难以同时保证。因此，对于不同的物理问题，计算科学研发人员开发了各种基于机器学习数据驱动计算物理场对算法。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)。而后的 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] 也提出了相似功能对于控制方程不明确通过深度学习进行运算的物理数据驱动模型 DeepONet。上述物理数据驱动的深度学习模型均采用对数据进行直接处理并运算。同时，DeepONet 也被广泛应用于生物学，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）对于空间映射进行学习的深度学习方法，具有快速高效和低误差的特点。基于前文提到的 CNN，因计算后处理的飞速发展，基于 CV 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）。其他相关的物理深度学习模型也在近些年快速增加。

1.4 多相流与气泡动力学

多相流，特别是气泡流是一个经典流体力学问题。多相流是指一个以上的液相同时通过多孔介质流动^[57]。它具有非常广泛的应用背景，其中也涵盖大量的科学问题，包括悬浮的谷物粉尘或煤粉，液滴和喷雾，推进剂燃烧，炭化，烟灰，烟雾形成，淤浆，液体中的气泡，雨水和沉降^[58]。在物理上，我们经常通过质量平均混合速度和扩散通量来表示混合流动速度和单相速度的区别^[59]。在大量多相流物理现象中，气泡流动问题常被研究。因为气泡流具有大量的生物学和物理化学的应用背景，其已经成为流体力学乃至生物物理领域中主要问题之一。其中，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领域内最主流的问题之一^[60-64]。微气泡在管道中的运动被广泛应用于靶向输药^[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^[70, 71]。因此，基于上述研究，在本文中作者针对两种情形下的管道流动进行研究，一种为微观道内部单气泡流动，建模参考 Hosseinkhah et al.^[69] 的工作。另一种为微管道内多气泡的系统动力学，参考了 Lea et al.^[72] 提出的建模思路，为：管道几乎完全充满液体。游离气体以小气泡的形式存在，并在液体中流动。液体接触壁表面，气泡仅起到降低密度的作用。

第 2 章 理论背景

2.1 机器学习

2.1.1 神经网络

在前文中，我们简要概括了神经网络的历史和概况。本章我们着重介绍神经网络数学基础。神经网络是一个多非线性回归模型。人工神经网络是基于模拟生物学神经元之间传播原理启发构建的计算系统^[73]。

一个基本的人工神经单元结构如图2-1所示：其中， x_1, x_2, \dots, x_n 为输入量， w_1, w_2, \dots, w_n 为拟合输入量的权重，经过阈值 b 输出为 y 。而对于神经网络来说，基本的神经元模型是基于线性多重回归模型所建立的：

$$y_w(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + \dots + w_nx_n + b \quad (2-1)$$

其中 w_n 为回归权重， b 为阈值。

基于回归模型，每个神经元经过激活函数被“激活”传入下一层神经元中：

$$\hat{y}(x) = \sigma(w^T \mathbf{x} + b) \quad (2-2)$$

其中 $\hat{y}_i = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_n)$ 可看作网络产生的预测值， $\sigma = \sigma(z)$ 为激活函数。

激活函数作为将输入信息通过非线性变换传输给另一个神经元的工具，选取和使用主要依靠经验。在实际应用中，常用的三种激活函数有 sigmoid，ReLU 和线性激活：

$$\sigma_{sigmoid}(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}; \quad \sigma_{ReLU}(z) = \max(0, z); \quad \sigma_{linear}(z) = z \quad (2-3)$$

而在实际运算中（i.e., TensorFlow, PyTorch, Keras 等主流深度学习平台），神经网络的初始权重是随机生成的，而后随着梯度下降 & 优化过程拟合训练集。权重的

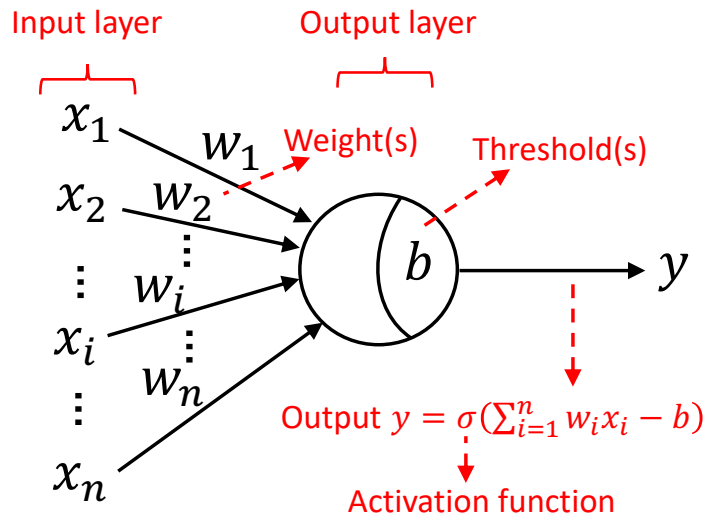


图 2-1 基本神经元的结构图^[74]。

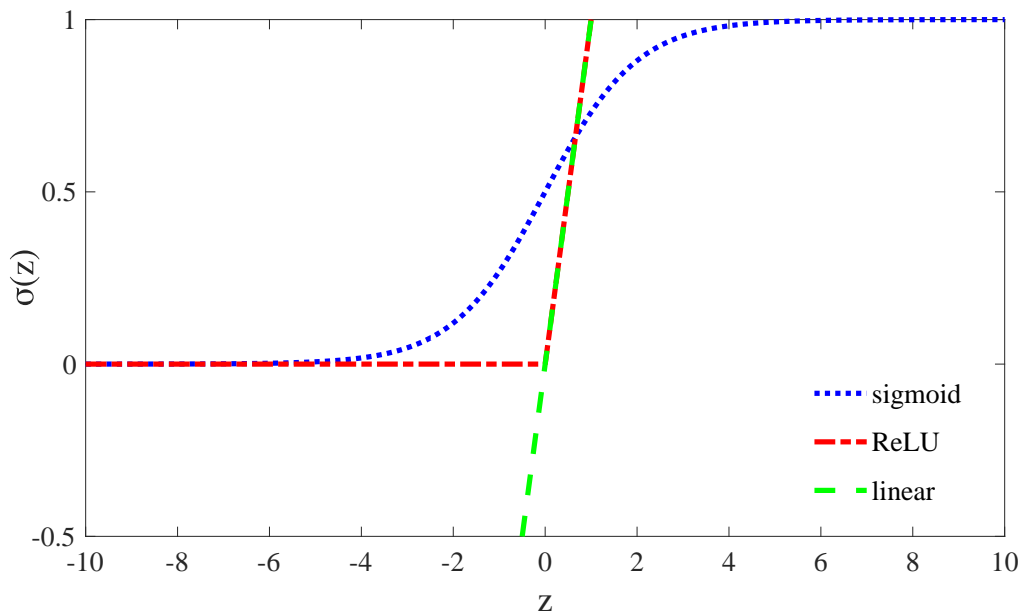


图 2-2 三种激活函数的示意图。

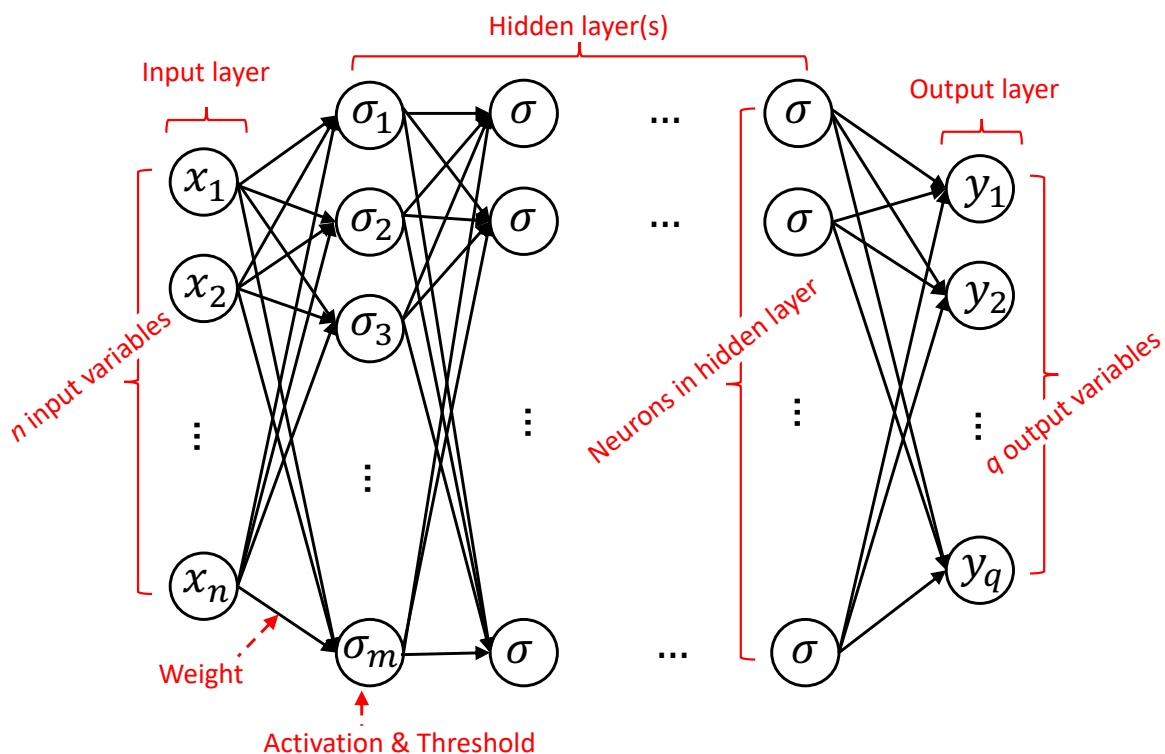


图 2-3 深度神经网络的结构图。

迭代过程可以写作：

$$w_i \leftarrow w_i + \Delta w_i; \quad \Delta w_i = l_r (y - \hat{y}) x_i \quad (2-4)$$

其中 l_r 为网络的学习率。基于方程2-4，我们通过设置学习率可以可以改变全中的更新迭代过程，以此控制回归模型训练的快慢和准确度。

在神经网络训练中，我们通常采用均方根误差（MSE）作为损失函数来训练；而训练迭代神经网络的过程就是通过不断减小 MSE 的过程实现的。

$$MSE = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (y_i - \hat{y}_i)^2$$

在训练中，MSE 在前后迭代的不断减小过程会产生误差，而误差则是通过反向传播（back-propagation）算法传递给上一层网络进行迭代，迭代后会更新权重 w_n 促使网络再次进行迭代。

• 训练过程

现设置一深度神经网络 DNN，由前文定义： $\hat{y}_i = (\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_n)$ 可看作为网络的输出值（预测值）；在此我们将其写为：

$$\hat{y}_{nj} = \sigma(\beta_j - b_j) \quad (2-5)$$

其中 β_j 是第 i 个神经元的输入值， b_j 为阈值。

在本章中我们采取梯度下降方法为例，在 DNN 中连接第 h 和 j 隐层的权重因此可以写作：

$$\Delta w_{hj} = -l_r \frac{\partial MSE}{\partial w_{hj}} \quad (2-6)$$

而方程2-6 可以进一步展开为：

$$\frac{\partial MSE}{\partial w_{hj}} = \frac{\partial MSE}{\partial \hat{y}_j} \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial \beta_j} \frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}} \quad (2-7)$$

而又由 β 的定义，我们可以写出： $\frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}} = b_h$ 因此，根据方程2-5以及均方根误差的定义，我们可以写出：

$$\begin{aligned} g_j &= -\frac{\partial MSE}{\partial \hat{y}_j} \frac{\partial \hat{y}_j}{\partial \beta_j} \\ &= -(\hat{y}_j - y_j) \dot{\sigma}(\beta_j - b_j) \\ &= \hat{y}_j(1 - \hat{y}_j)(y_j - \hat{y}_j) \end{aligned}$$

因此，由上述方程，我们可以获得由隐层 h 传至隐层 j 的权重的更新方程：

$$\Delta w_{hj} = l_r g_j b_h \quad (2-8)$$

这便是神经网络训练更新过程的数学描述。

2.1.2 物理深度学习

2019 年，基于神经网络的梯度下降拟合参数原理，Raissi et al.^[47-49] 提出了基于物理信息的深度神经网络模型。在本文中，作者简称物理神经网络。其思路为：构造一个含有物理方程的损失函数 $Loss_{Phys}$ ，并将该函数带入神经网络整体的损失

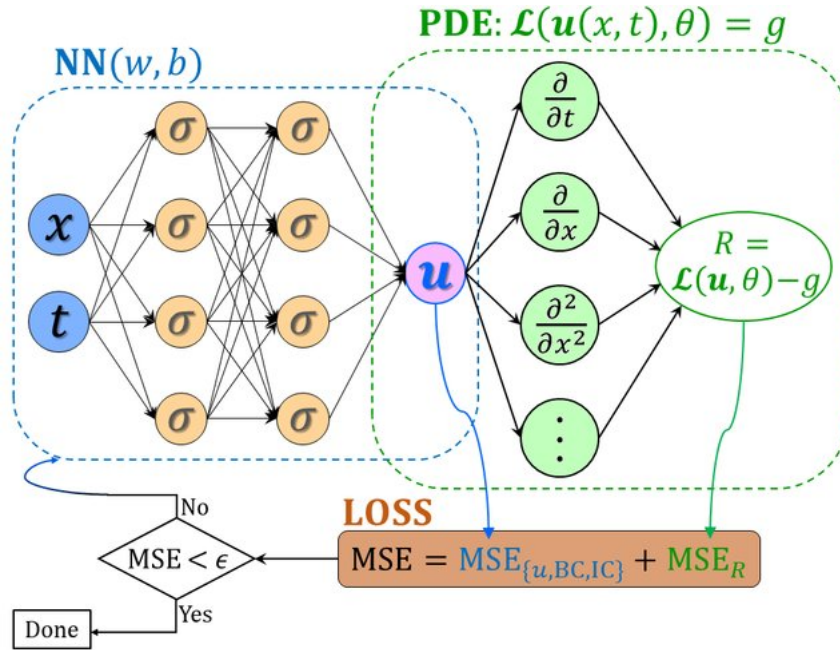


图 2-4 物理神经网络的示意图，来自 Meng et al., 2020^[75]。

函数中: $\text{Loss} = \text{Loss}_{NN} + \text{Loss}_{Phys}$ 。举例来说，若我们采取均方根误差作为梯度下降指标，采用 N-S 方程作为引入的物理方程，那么该物理神经网络形式可写作 $\text{Loss} = \text{MSE}_{NN} + \rho D_t \mathbf{u} - \mathbf{f} + \nabla p - \mu \nabla^2 \mathbf{u}$ 。因此在神经网络进行梯度下降训练时，物理方程被作为一个“弱限制”加入了训练过程，使得最后训练出来的结果逐渐逼近真实物理方程。

首先，根据偏微分方程（PDE）的定义，我们可以将一般偏微分方程写成如下形式：

$$u_t + \mathcal{N}[u; \mu] = 0, \quad x \in \omega, \quad t \in [0, T]$$

因此，我们可以构建一含有 PDE 的函数 f ，并将其引入神经网络的迭代中：

$$f := u_t + \mathcal{N}[u]$$

在实际神经网络训练迭代过程中，若采用均方根误差作为迭代标准，损失函数可写作^[47-49]：

$$MSE = MSE_u + MSE_f$$

其中

$$MSE_u = \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |u(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2$$

$$MSE_f = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2$$

在本文中，我们要研究二维微气泡流动，我们因此采用物理神经网络的思路，将二维情况下的连续性方程 $u_x + v_y = 0$ 引入深度神经网络中用于“物理限制”气泡流的训练过程。我们将对应的深度物理神经网络命名为 BubbleNet。

2.2 多相流与气泡产生

2.2.1 流体力学基本理论

流体力学是力学的一个分支，涉及流体在各种状态下的性质以及它们对作用在其上的力的反应^[76]。流体力学广泛应用涉及航空航天，车辆工业，生物医学等；在前文中我们已经对流体力学进行了简概介绍，在此不过多赘述。

流体力学的控制方程 Navier-Stokes (N-S) 方程可由 Lagrange 和 Euler 坐标系下分别推出^[77]。N-S 方程是由动量方程推导而得出，具体推导过程详见附录 A。一般形式下的 N-S 方程写为：

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \mathbf{f} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2-9)$$

在本文中，我们主要考虑二维情况下微气泡的流动，所以推导基于二维直角坐标系。在二维情况下，N-S 方程可写作：

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = f_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

其中， x, y 为二维坐标系的坐标轴， t 为时间， ρ 为流体的密度， u, v 为流体运动时在上的速度分量， f_x, f_y 为在两轴上的外力， p 为压强， μ 为流体的粘性。

在实际描述流体运动时，除动量方程，为满足基本物理定律，流体的性质还包括连续性，能量守恒以及状态方程。连续性方程可写为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2-10)$$

在二维不可压情况下，该方程可写作 $u_x + v_y = 0$ 。

能量方程写为：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{tot}) + \nabla \cdot [\mathbf{u} (\rho E_{tot} + p)] = 0 \quad (2-11)$$

其中 E_{tot} 为系统内的总能量。流体的状态方程写为：

$$p = f(\rho, T)$$

其构建了流体中压强与密度和温度之间的关系。

上述方程构建并控制了流体运动的基本物理规律；其中，流体既包括水，油等流动态物质，也包括空气，微颗粒物等广义的流体。但是值得注意的是，要利用流体理论建模，物质要满足上述连续方程，既基本单元（分子，原子等）的运动在整体分析时可忽略不计。

2.2.2 多相流理论

在流体力学中，多相流是指具有两个或多个热力学相的材料同时流动^[78]。而多相流可简化为常见两相流系统；其中包括气-液两相流；气-固两相流和液-固两相流。

在本文中，我们主要考虑气液两相流中的气泡流（bubble flow）。为气体占比较小的气-液两相流。

气泡流动中，气体和液体均满足上述流体力学基本方程，而气液界面则由表面张力控制。在模拟仿真时，我们引入相函数 ϕ 描述两相运动，N-S 方程因此写为：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot \mathbf{u} = 0$$

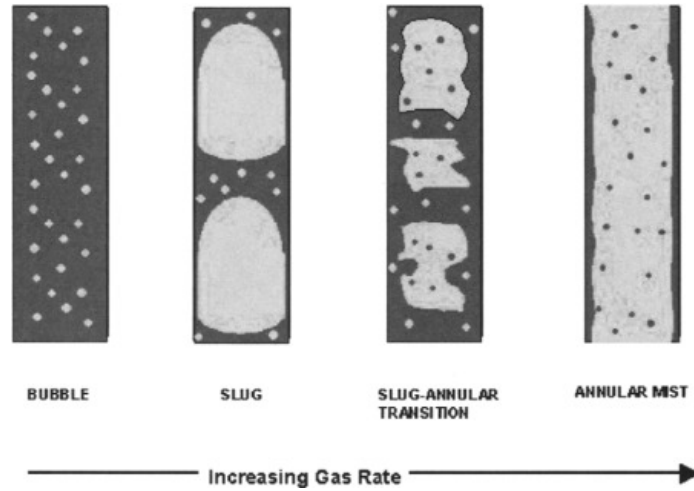


图 2-5 不同气-液两相流动示意图^[72]。

现设气、液的密度和粘性分别为 ρ_1, ρ_2 和 μ_1, μ_2 。则气-液混合流体的密度和粘性可由相函数 ϕ 表示为：

$$\rho = \rho_1 + \phi(\rho_2 - \rho_1)$$

$$\mu = \mu_1 + \phi(\mu_2 - \mu_1)$$

对于气泡流，我们采取 COMSOL Multiphysics[®] 中的 Level Set 模型，其中时间相关的控制方程写为：

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

其中 γ 为计算参数，为保证函数在时间迭代中始终保持在气液界面区域；而 ϵ_{ls} 则控制两相交界面的区域厚度。上述方程就为控制气泡流动的数学基础。在此处我们略过多相流基本理论，对于两相流组分关系数学模型的基本推导详见附录 B。

本章节中，我们简要介绍了物理神经网络的构建和数学基础以及多相流理论；下一章节中，我们将通过介绍并分析两个微气泡流算例分析微流体环境下气泡动力学的物理性质。

第3章 微气泡流动

3.1 模型构建

为了探究微流体环境中气泡的运动形式，以及考虑到实际应用场景，我们本次共设置了两个算例：单气泡微管道流动和多气泡管道流。其中，单气泡管道流动主要对应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]；建模主要参考 Hosseinkhah et al.^[69]的工作：单气泡限制在管壁（血管壁）内运动。而多气泡模型则主要对应但不限于组织液内多细胞运动^[81, 82]以及药物输运^[66]。具体建模参考 Talu et al.^[66]的实验图以及 Lea et al.^[72]的工作定义（在第一章节已介绍）。

3.1.1 单气泡模型

单气泡微管道二维建模方法如图3-1所示：坐标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。微管道设置长度为 $15\mu\text{m}$ ，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^[65-71, 79-81]我们发现，细胞与气泡大多直径处在 $1 \sim 5\mu\text{m}$ ，因此此处我们给定气泡直径 $d = 4\mu\text{m}$ ，以符合应用背景。给定周期性边界条件：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，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。气泡（气相材料）设为空气（Air）；流体（液相材料）设置为水（ H_2O ）。

给定模型后，针对多相流我们采用 Level Set 算法^[84]（相关算法已在第 2 章给出介绍）；我们采用时间相关（Time-Dependent）的求解器，总共计算 $5000\mu\text{s}$ 内单气泡的运动，其中，每 $20\mu\text{s}$ 输出一次结果。温度为室温（ 293.15K ）。

对于气泡沫型的网络，因多相流的两相接触界面需要高精度计算，否则则会造成其中一相的成分损失致使迭代后时间步计算误差增大，使结果不可信；因此，在本算例中我们采用系统定义的加密网格，选用“Extra Fine”网格。具体初始网格效果如图3-2所示。

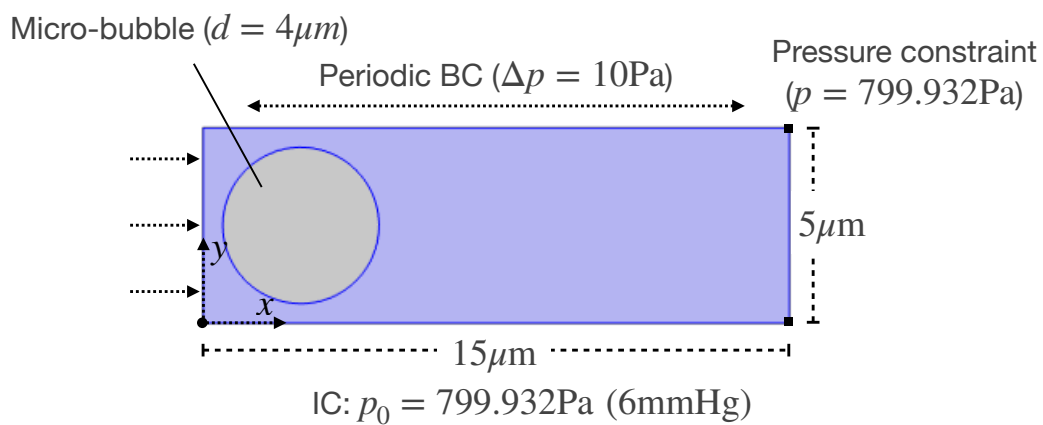


图 3-1 单气泡模型的建模。

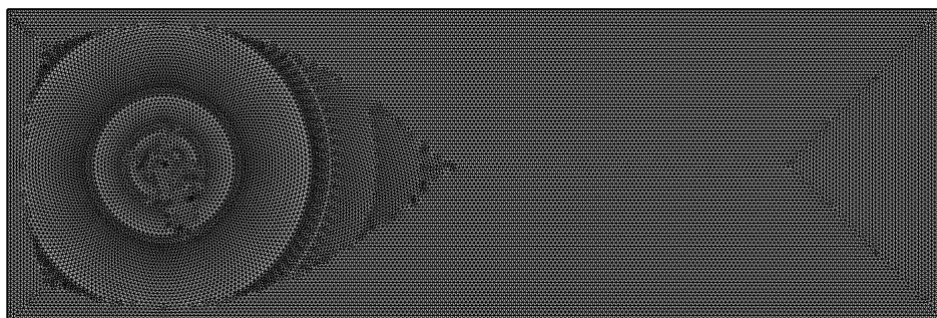


图 3-2 单气泡模型的初始网格构建。

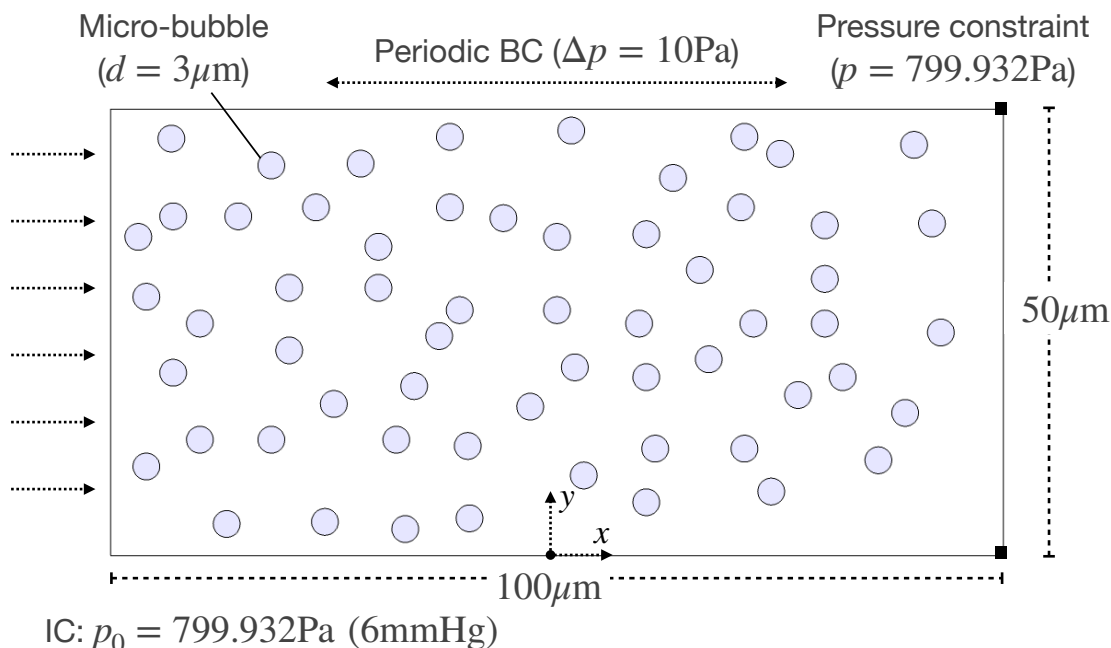


图 3-3 多气泡模型的建模。

3.1.2 复杂多气泡系统

多气泡系统的二维建模方法如图3-3所示。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^[70, 71]，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，我们将气泡设定较为密集并且较为均匀的设定在流域内以满足应用背景。设定管道长度为 $100\mu\text{m}$ ，管壁直径为 $50\mu\text{m}$ 。坐标定为下管壁中点处。60 个直径为 $3\mu\text{m}$ 的微气泡均匀分布在管道内部。参考上一小节应用背景设定，初始条件给定 $p_0 = 799.932\text{Pa}$ ，管道出口压力限制点 $p = 799.932\text{Pa}$ 。给定周期性边界条件 $\Delta p = 10\text{Pa}$ 。

对于算例，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。温度为室温 (293.15K)。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)。网格示意图如图3-4所示。

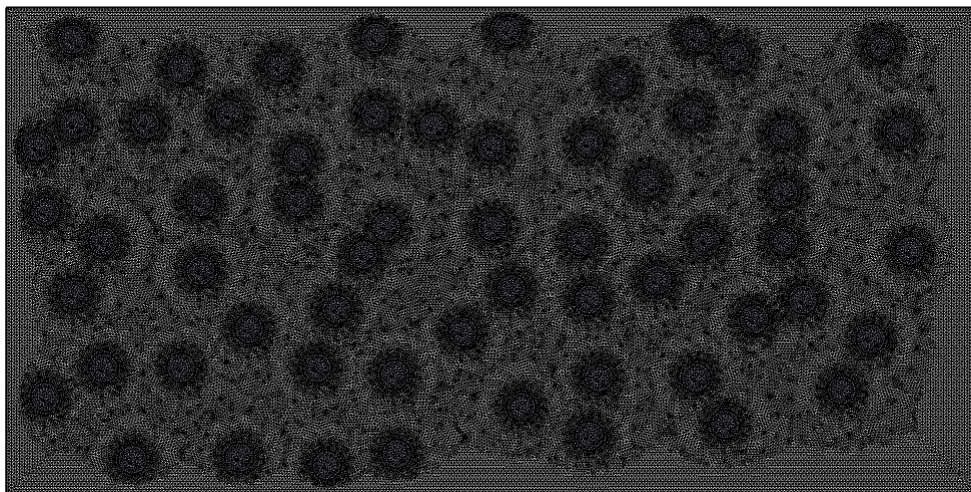


图 3-4 多气泡模型的初始网格构建。

3.2 动力学分析

3.2.1 单气泡计算结果

单气泡计算后气泡运动轨迹如图3-5所示。其中显示单气泡运动从 $400\mu\text{s}$ 开始，每隔 $400\mu\text{s}$ 记录气泡形态，记录九个气泡形态直至 $3600\mu\text{s}$ 。在 $3600\mu\text{s}$ 时的气泡形态和 Tomaiuolo et al.^[80] 实验中红细胞在微管道流动中的变形对应。其中，在我们的仿真中，由定性分析可观测到在 $3600\mu\text{s}$ 时的单气泡变形与 Tomaiuolo et al., 2009 论文中 **Fig. 2** 的红细胞限制在 $6.6\mu\text{m}$ 微管道中流速为 1.12cm/s 的单红细胞变形形貌基本一致。

从图3-5中可观测，我们可以观测到单气泡运动变化形式。气泡左端迎流处最先向内凹，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，左端迎流界面内凹至形成一定空间形成两个尾端泡张力面；在此处可以看作是产生了两个将剥离主气泡的“附着气泡”。

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“拖拉”效应，使得单气泡变形的尾迹被拖出两个附着气泡。由前文，单气泡该变形模式和 Tomaiuolo et al.^[80] 实验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

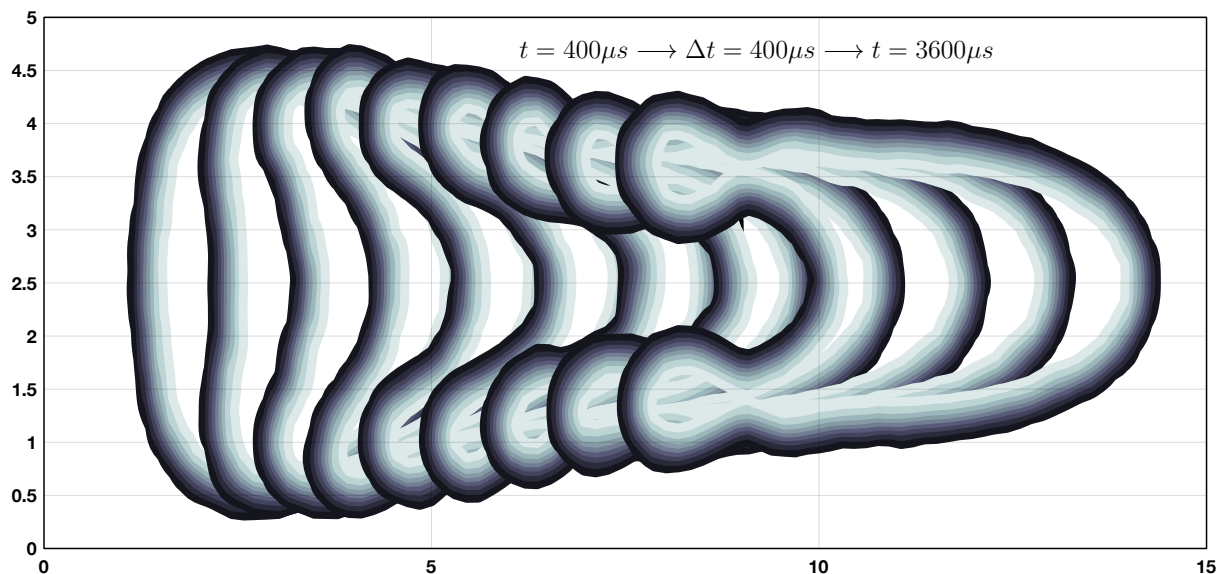


图 3-5 单气泡模型的运动轨迹。

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。

为研究及验证气泡管道流动的规律及机理，如图3-6展示单气泡管道流管道尾端在前 $3600\mu s$ 的速度分布。时间选至 $3600\mu s$ 的原因为单气泡在 $3600\mu s$ 之后会流经管道尾端（如图3-5），致使速度分布不符合一般管道流。

由图3-6，我们可以观测到管道右段速度在 $40\mu s$ 后便符合抛物线的速度分布，之后直至 $3600\mu s$ 都符合该分布规律；该抛物线分布符合一般泊肃叶流动基本规律^[86, 87]。抛物线在 $40 \sim 1000\mu s$ 内基本符合同一抛物线参数，而后在 $2000 \sim 3600\mu s$ 内进入另一抛物线分布：抛物线顶端斜率导数减小速度降低，靠近管壁测速度分量减小，管道中心处速度分量增大。

为了更加完整的分析气泡流经时（气泡运动过程）捕捉相变化过程的物理信息，我们在记录在气泡右端处（ $x = 5\mu m$ ）速度分布，如图3-7所示。我们可观察到，初始 $t = 20\mu s$ 时，气泡并没完全开始运动，直至 $t = 600\mu s$ 时，气泡右侧顶端开始穿过我们设定的记录数轴，为中间外凸的抛物线；后至 $t = 1000\mu s$ 时，气泡一大部分都穿过“观察轴”，使得抛物线中间外凸部分数值增大，外凸趋势更加明显；至 $t = 1400\mu s$ 时，抛物线外凸趋势消失，此时气泡主体部分开始流经观测轴，抛物线的外凸顶点

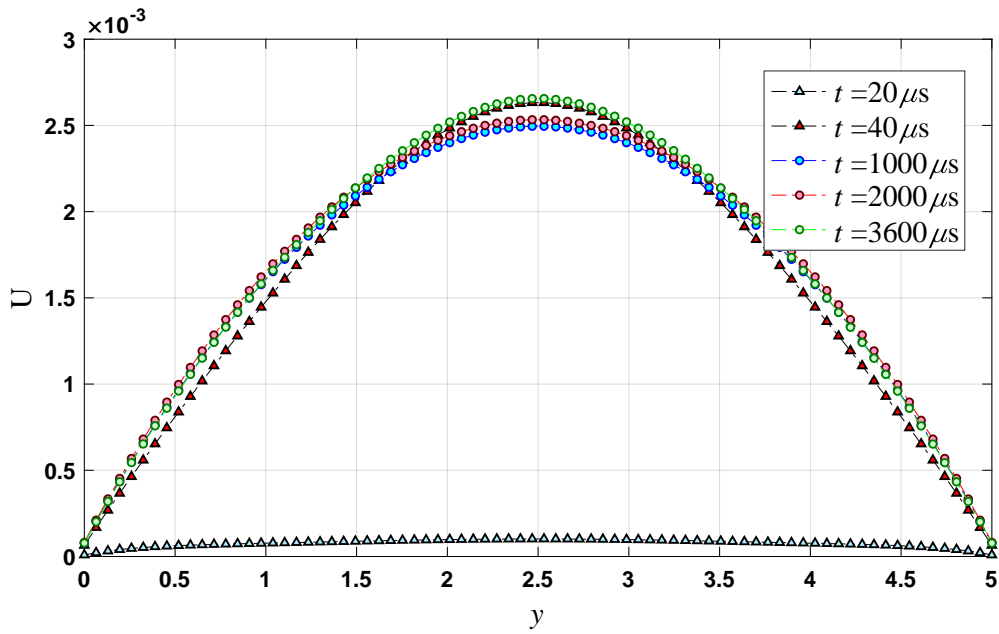


图 3-6 单气泡模型流场末端的速度分布。

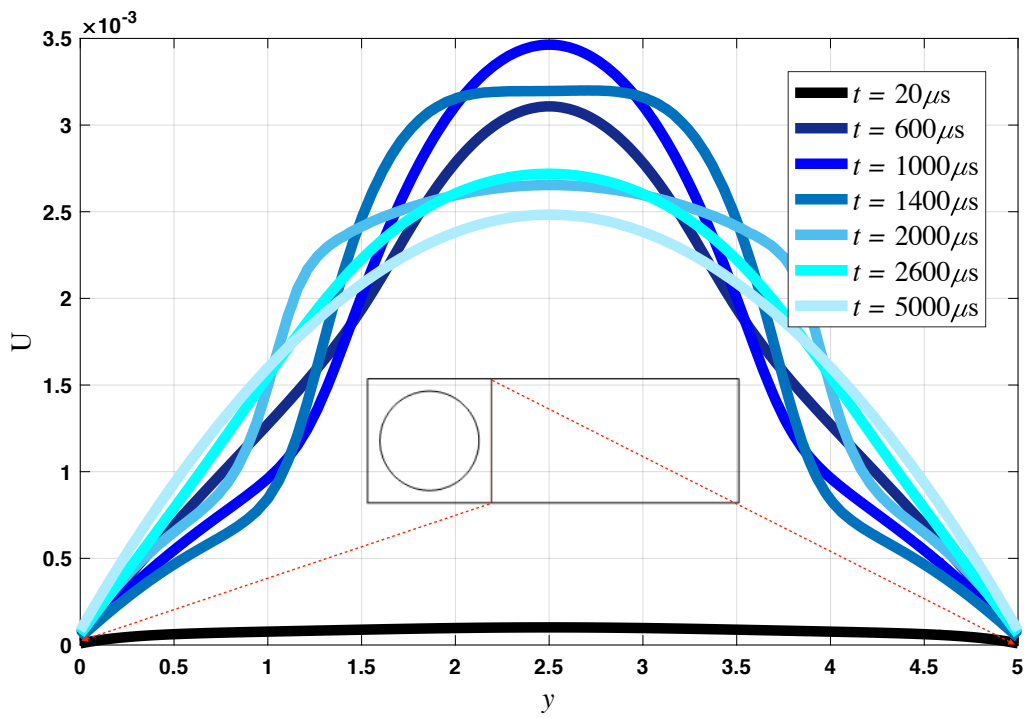


图 3-7 单气泡模型气泡右端的速度分布。

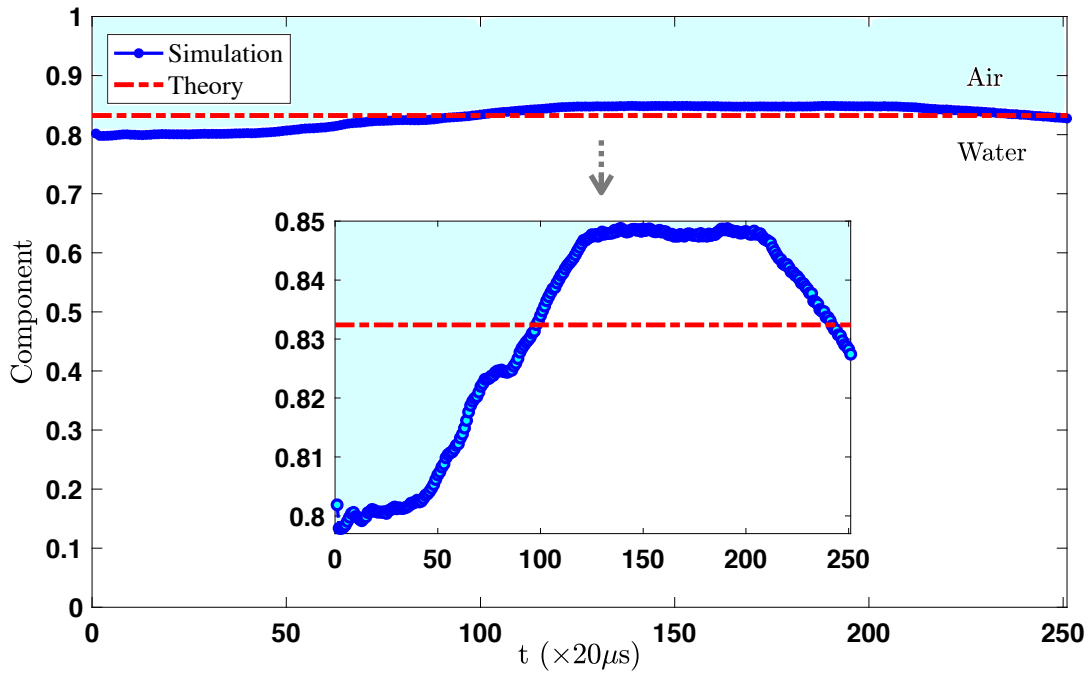


图 3-8 单气泡模型运算过程中气-液组分分布。

下凹；至 $t = 2000\mu s$ 时，气泡主体部分正在记录数轴上，抛物线的外凸呈“宽大状”，气泡的尾端（左侧）也即将流经观测轴；而后至 $t = 2600\mu s$ 到 $t = 5000\mu s$ 时，气泡已经流过观测数轴，管道速度分布已经与图3-6纯液相管道流分布相似，满足抛物线基本特征。其中，每一时刻速度分布可参考图3-5气泡整体运动形态变化并对应相应速度分布。

由前文，多相流计算中对网格需求较高因稀疏网格可能导致在计算迭代过程中某一相流体组分丢失致使误差增大使结果不可信；因此，我们选择较密网格确保运算准确。但在结果分析时我们仍需验证两相组分分布确保结果精准。如图3-8所示展示了对单气泡算例气-液两相的组分在整个计算迭代过程的分布。其中浅蓝色区域为空气（气泡），白色区域为水（液体）。红色为根据气液面积（二维体积）比计算理论值；举例来说，空气相计算公式可写为：

$$Component_{Air} = \frac{Area_{Air}}{Area_{Air} + Area_{Water}}$$

在实际计算中，由第 2 章节介绍，我们用相函数 $\phi \in [0, 1]$ 来描述气-液两相占比。在实际计算得出的场分布中，相函数分布在 (0, 1) 之间，极少存在数值为 0 或 1

的情况。这也是符合真实物理规律的：在实际的空气-水混合体系中，水中会混合一定量的空气或气体分子微团，而空气（气泡）中也会混合一定量的水分子微团（游离液态水），既纯粹的空气或水（或纯气态 & 液态）几乎不存在；符合仿真结果。实际操作中，对于 $\phi \in [0, 1]$ ，我们取 $\phi \in [0.5, 1]$ 属于气相，取 $\phi \in [0, 0.5]$ 属于液相，记录组分随时间变化。计算所得两相比为如图所示蓝色波动量。由图我们可以得出在整个气泡运动过程中气-液相分布基本符合理论值，在理论值上下波动。理论计算结果为 $Component_{Water}/Component_{Air} = 0.8324$ ，仿真计算结果最大值不足 0.85，最小值约在 0.8，均在接受误差范围内。

而除前文中我们提到的计算迭代致使某一相流体含量过少被忽略丢失导致的计算误差外，在计算气泡运动过程中气泡运动本身也会造成组分比产生误差。因为真实物理运行在三维空间，在进行二维计算时，二维物理变量的数值在二维空间内体现在第三维度上；例如，假如将气-液组分作为分析量，在第三维度上产生 $[0, 1]$ 的数值取样，接近 1 为气相，接近 0 为液相；在涉及到气泡融合 & 分离时，两气泡主体间会产生介于 $(0, 1)$ 间的气-液界面；对于本小节单气泡算例，该界面在运动过程中可能因为数值趋向于 0 而被算作液相部分被损失掉。对于涉及到气泡融合情况（多气泡算例），当两气泡融合瞬间，在三维空间内应在第三维度上产生气相数值的增大；但是对于二维计算情况描述两相的数值只在 $[0, 1]$ 内，且两相含量只体现在二维面积上，因而使得在该瞬间气体部分在数值上被少算了一部分，此时也产生了计算误差。

3.2.2 多气泡计算结果

分析多气泡算例时，我们采用和上一小节相同分析方法。整个多气泡系统运动趋势如图3-9所示：初始状态下 60 个微气泡均为分布在流场各点，至 $t = 900\mu s$ 时，可观测到极个别气泡已经融合，少量呈现融合趋势；至 $t = 1500 \sim 1800\mu s$ 时，可以看到已经有少部分气泡已经融合，且分别对应 $t = 1500$ & $1800\mu s$ 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 $t = 2100$ & $3000\mu s$ 时，大部分气泡已经发生了融合以及附着气泡的剥离；在 $3000\mu s$ 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。

同样的，采取同样方式，如图3-10我们在微管道尾端（右侧）设置观察数轴记录微气泡群流经管道时速度分布。由图我们可以得出，在微气泡群管道流情况下，尽管有气-液两相混合，但是与单气泡算例不同，管道速度分布基本符合泊肃叶流的抛物线速度分布；这是因为当气体含量占比较小并均匀混合在液体中时，此时仍符合流

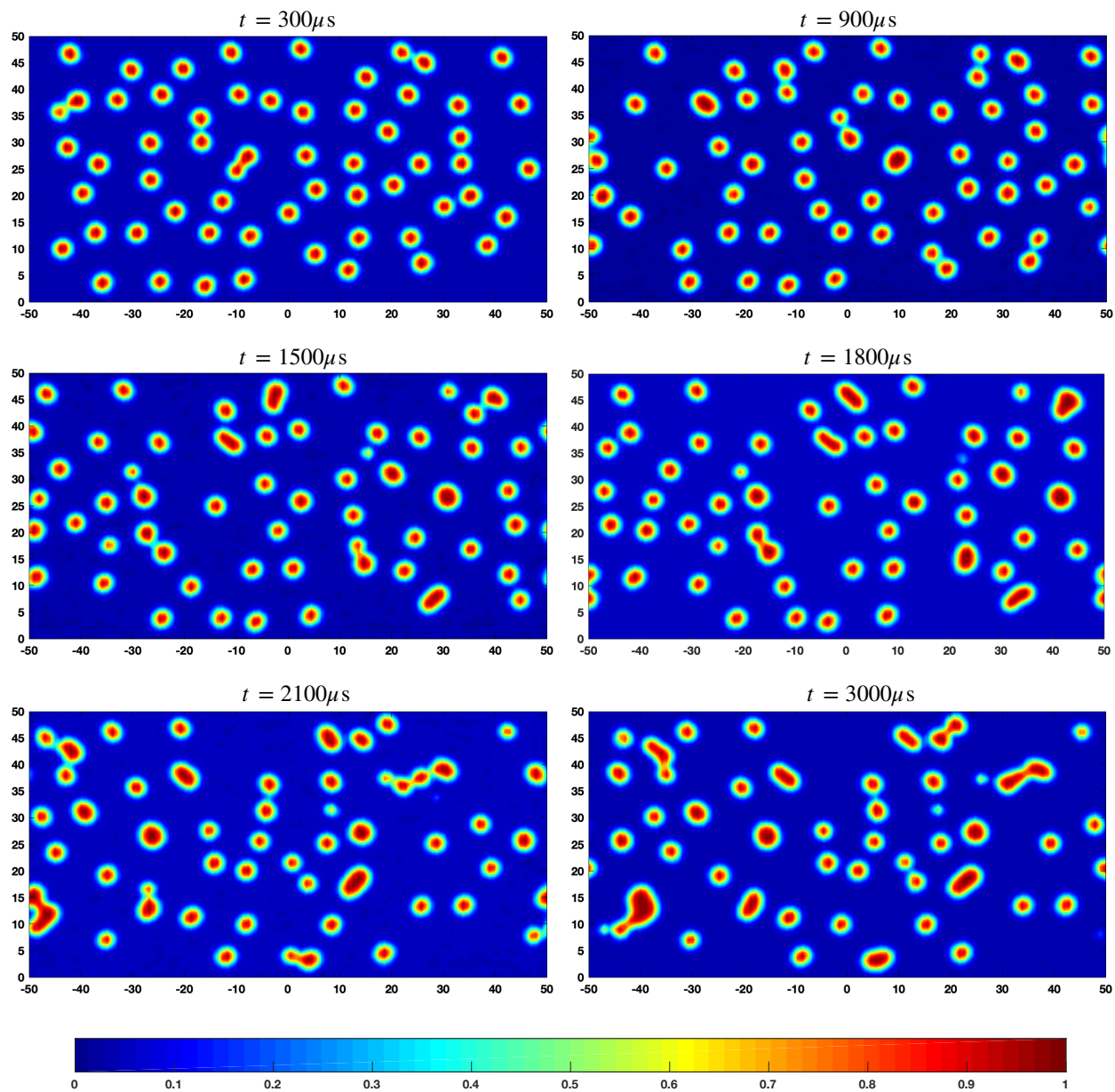


图 3-9 多气泡系统的运动趋势。

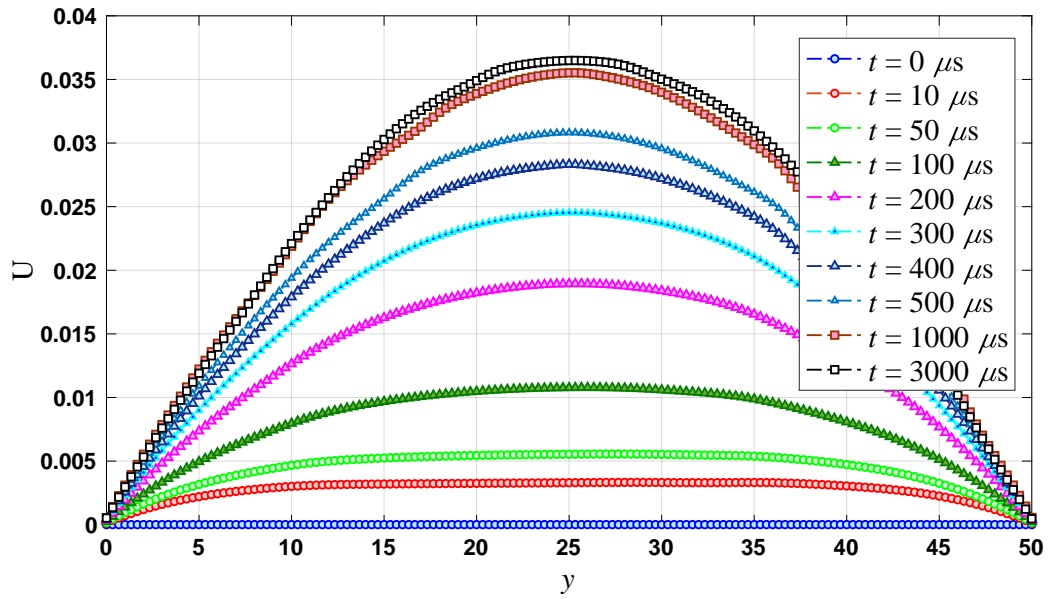


图 3-10 多气泡模型流场末端的速度分布。

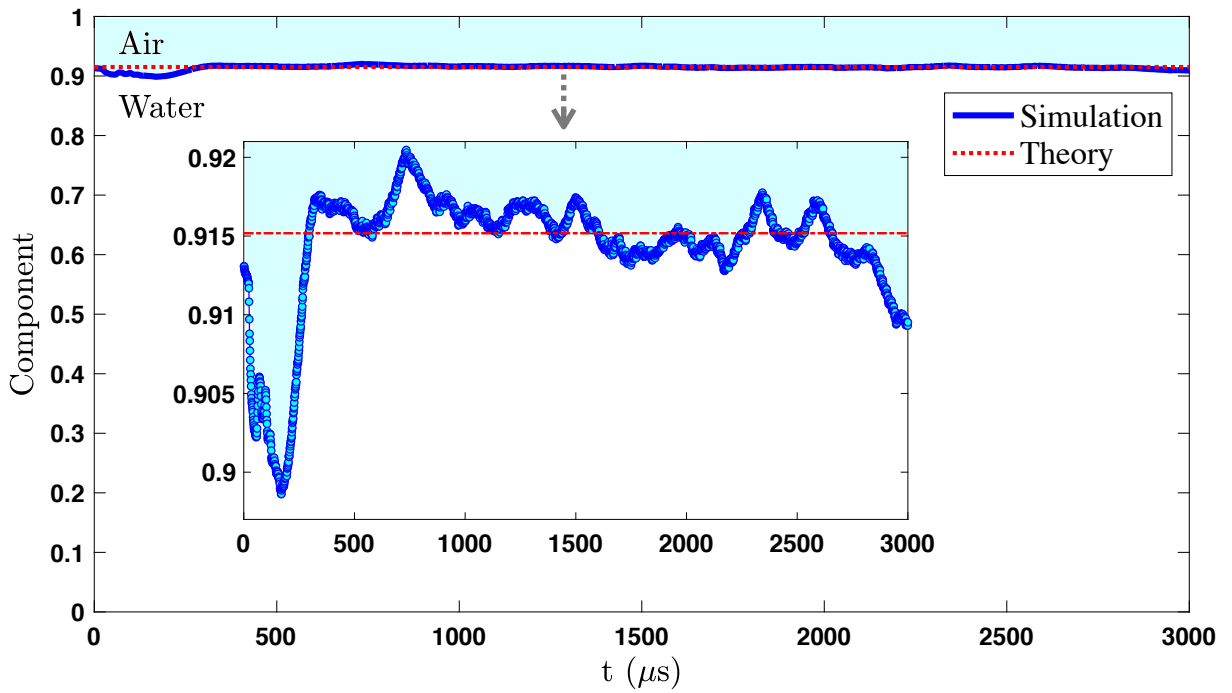


图 3-11 多气泡模型运算过程中气-液组分分布。

体流动规律，该种流动被定义为传统的气泡流 (bubble flow)^[72]。这也与 Wang and Hu 工作中对于生物细胞环境下当微气泡较小时可以将两相流用单向流进行建模的思路吻合^[85]。在计算至 $1000\mu\text{s}$ 后，我们观测到流体速度分布几乎不发生改变，既说明气泡群管道流在 $1000\mu\text{s}$ 后流动稳定，满足相似速度分布规律直至在 $3000\mu\text{s}$ 算例计算完成。

同样，采用上一小节对单气泡分析方法，我们也要验证气泡群动力学在计算过程中组分是否符合物理规律。如图3-11所示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，记录所得组分变化规律如图3-11中蓝色波动量所示。其中浅蓝色区域为空气，白色区域为水。其中理论值对应初始情况下液相在整体占比： $Component_{\text{Water}} = 0.915$ ，由图3-11可得 $Component_{\text{Water}} \in (\sim 0.9, \sim 0.92)$ ，符合误差范围。

本章节中，我们分别介绍了单气泡和微气泡群的算例应用背景、建模及计算；而后对计算结果进行了多方面的分析。结合第 1 章节的研究背景及他人成果介绍和第 2 章节理论背景及计算方法的介绍；本章节我们对单气泡和气泡群整个运动过程进行了全面的动力学分析。下一章节，我们将介绍我们对多相流问题提出的深度学习算法以及预测成果。

第 4 章 数据驱动预测与学习

由第 1 章和第 2 章提到，Raissi et al.^[47] 与 2019 年提出了基于引入物理方程损失函数的深度神经网络 PINN；在本章节中，我们将会效仿他的思路提出针对微流体气泡流的神经网络结构。我们首先介绍利用普通深度神经网络预测气泡流的算法以及结果，随后介绍我们提出的框架 BubbleNet 结构与算法和结果。

由第 3 章节中我们介绍的单气泡与多气泡系统两个算例，我们分别针对这两个算例使用了传统深度神经网络（DNN）与我们提出的基于气泡动力学神经网络（BubbleNet）进行计算预测。为是问题具体化，对于单气泡算例，我们目标预测 $t = 2000\mu\text{s}$ 时气泡的运动状态；对于多气泡算例，我们目标预测 $t = 1500\mu\text{s}$ 时气泡的运动状态。运动状态包括当时刻物理场的速度，压力与相函数分布 (u, v, p, ϕ) 。

为了从算例中获取数据用作神经网络训练数据 $(x_{train}, y_{train}, t_{train})$ ，同时为了减小计算资源损耗，我们对于两不同算例采用相同的策略：将场数据分布 (x, y, t) 数据进行稀疏化，对于单气泡算例，我们对场数据进行每隔 10 个数据点取样一次；对于多气泡算例，我们对场数据进行每隔 20 个数据点取样一次。对于时间步，单气泡算例每隔 2 个数据点取样一次；多气泡算例每隔 30 个数据点取样一次。以上稀疏化方法可表述为 $(x_{train}, y_{train}, t_{train}) = (x(1 : \text{interpolate} : \text{end}), y(1 : \text{interpolate} : \text{end}), t(1 : \text{interpolate} : \text{end}))$ 。其中单气泡算例场数据 (x, y) 取样如图 4-1 所示，多气泡算例同理。

4.1 DNN: 深度人工神经网络

由第 2 章节介绍，人工神经网络为一种为模仿人脑中神经元结构的非线性数据拟合器。而深度人工神经网络则是由多个隐层以及多个神经元构成的该结构。本文中我们为了学习并预测气泡的运动，我们采用了具有 9 隐层，每隐层具有 30 个神经元的深度神经网络结构，如图 4-2 所示。其中，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。

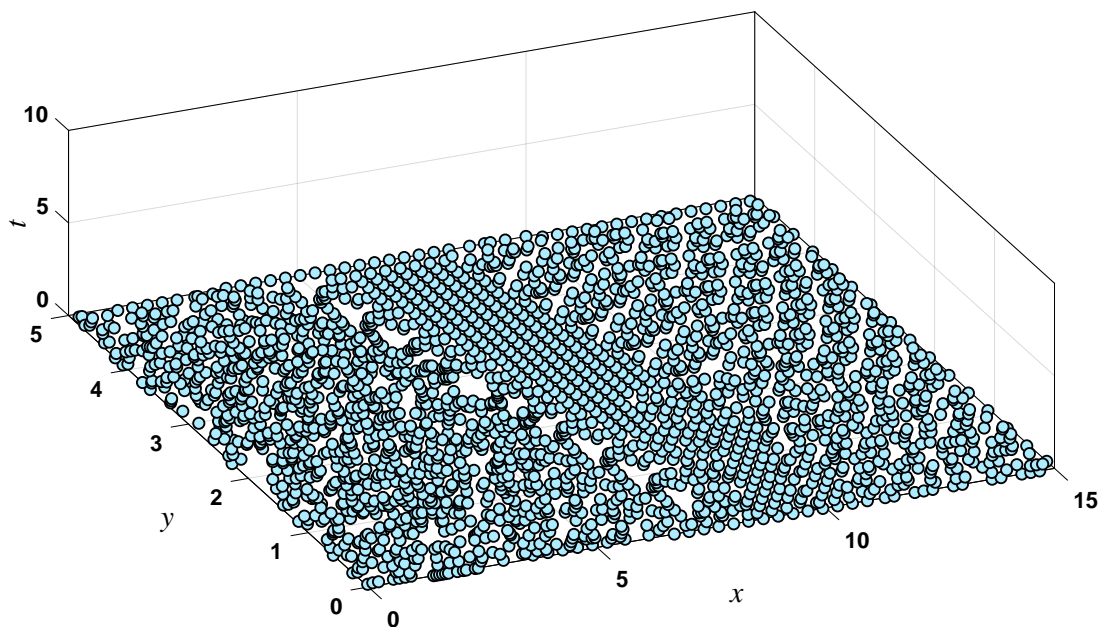


图 4-1 对单气泡模型的场数据取样。

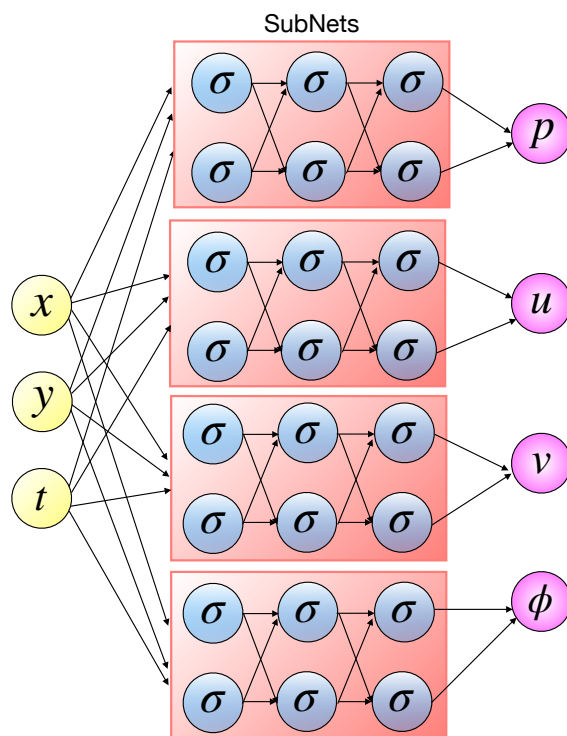


图 4-2 人工深度神经网络的示意图。其中我们用 $[3 \times 2]$ 网络结构做示意图；实际训练网络结构采用 $[9 \times 30]$ 网络结构。

Algorithm 1 DNN for predicting bubble dynamics

```

1: function DEEPNEURALNET(self, x, y, t, u, v, p,  $\phi$ , layers)
2:   ( $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{t}$ ,  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{\phi}$ ) = UPDATE(x, y, t, u, v, p,  $\phi$ )
3:   (weights, biases, layers) = self.INITIALIZENN(weights, biases, layers)
4:   self.Loss = MSE[(u - upred) + (v - vpred) + (p - ppred) + ( $\phi$  -  $\phi$ pred)]
5:   upred = self.Netu(x, y, t)
6:   vpred = self.Netv(x, y, t)
7:   ppred = self.Netp(x, y, t)
8:    $\phi$ pred = self.Net $\phi$ (x, y, t)
9:   Optimization method 'L-BFGS-B' & Optimizer: Adam
10:  def INITIALIZENN(self, layers)
11:    Initialize all the weights & biases for Netu, Netv, Netp, Net $\phi$ .
12:  def NEURALNET(self, weights, biases)
13:    Build NN for u, v, p,  $\phi$  with four sets of weights & biases.
14:  def {Netu, Netv, Netp, Net $\phi$ } (self, x, y, t)
15:    {u, v, p,  $\phi$ } = self.NEURALNET(x, y, t, weights, biases)
16:  def TRAIN(self, iterations)
17:    Obtain training time & Losses; train the NN with Adam optimizer.
18:  def PREDICT {u, v, p,  $\phi$ } (self, iterations)
19:    {upred, vpred, ppred,  $\phi$ pred} = self.sess.run(x, y, t)
20: end function
21: Input = {x, y, t}, Output = {u, v, p,  $\phi$ }
22: Hidden layers = [30 neurons × 9 layers]
23: Load fields data of micro-bubble system dynamics simulation.
24: Set training sets = {xtrain, ytrain, ttrain, utrain, vtrain, ptrain,  $\phi$ train, layers}
   = MaxMinScaler(Simulation Data)
25: model = DEEPNEURALNET(training sets)
26: model.TRAIN(#Iterations)
27: Set target prediction time as tpred
28: Obtain {upred, vpred, ppred,  $\phi$ pred} = model.PREDICT(x, y, t) at tpred.
29: Save all the data & post-processing.

```

该神经网络基本算法如 **Algorithm 1** 所示。基本思路可以简化为：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。

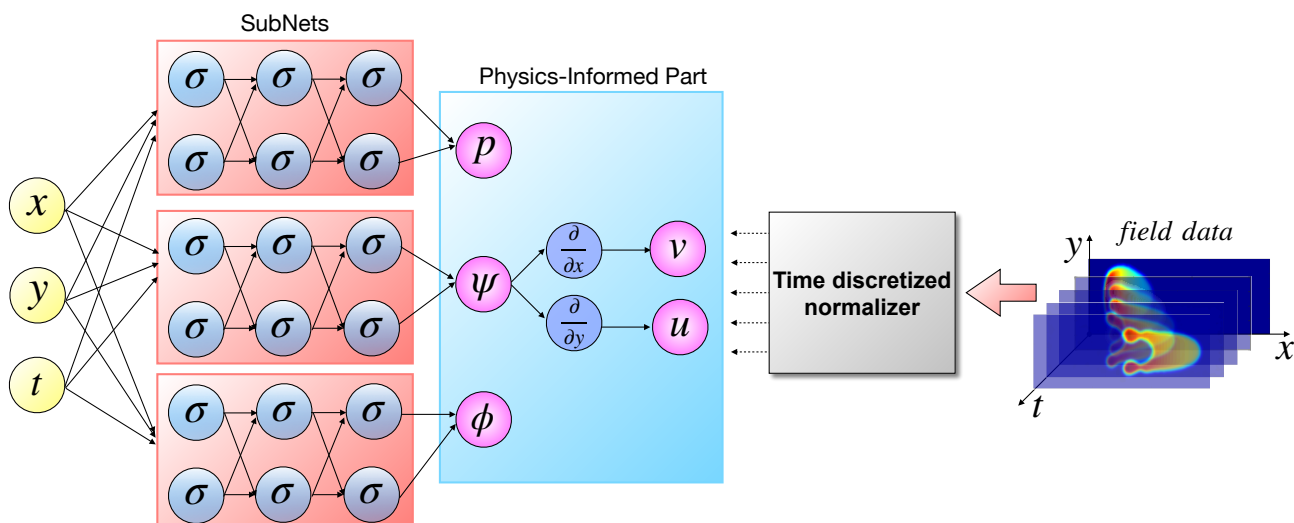


图 4-3 我们提出的物理神经网络 BubbleNet 示意图；结构同图4-2，训练采用 $[9 \times 30]$ 结构。

4.2 BubbleNet: 气泡物理神经网络

根据第 1 章介绍，深度神经网络已经在工业，学术界取得大量成果并证明其应用的广泛性和可靠性。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的并可以更精准预测多相流的神经网络 BubbleNet，基本结构如图4-3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：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 ψ 进行求导求得两速度场： $u = \partial_y \psi$, $v = -\partial_x \psi$ 。这样，我们在通过预测 ψ 因而获得两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。

同时, 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 (MaxMinScaler)，则会造成一部分时间步上物理场的分布会被那些相应数值较大的时刻的“特征剥夺”，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 时刻流场压力分布几乎不受影响，但是 t_2 时刻数值几乎接近为同一数值；而这在训练时会“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。

相应 BubbleNet 的程序算法如 **Algorithm 2** 所示。思路基本同 **Algorithm 1**，我

们先给定网络基本函数，更新网络参量 & 设定网络基本参数和优化器；不同点在于我们预测数值时先通过 Net_p , Net_ψ , Net_ϕ 预测得 p , ψ , ϕ ，在通过求梯度得 u , v 。值得注意的是网络的损失函数依然为 u , v , p , ϕ 训练数据与预测数据的差值，这也说明我们依然用网络逼近四个基本物理量，只是在网络结构“蕴含”了 ψ ，使得连续条件“藏”于其中。另一点不同的是我们在给定数据时使用了时间离散归一化器 TDN。

Algorithm 2 BubbleNet: physics-informed neural network for bubble dynamics

```

1: function BUBBLENET(self, x, y, t, u, v, p,  $\phi$ , layers)
2:   ( $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{t}$ ,  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{\phi}$ ) = UPDATE(x, y, t, u, v, p,  $\phi$ )
3:   (weights, biases, layers) = self.INITIALIZENN(weights, biases, layers)
4:   self.Loss = MSE[(u - upred) + (v - vpred) + (p - ppred) + ( $\phi$  -  $\phi$ pred)]
5:   {upred, vpred, ppred,  $\phi$ pred} = self.{Net $\psi$ , Netp, Net $\phi$ }(x, y, t)
6:   Optimization method 'L-BFGS-B' & Optimizer: Adam
7:   def INITIALIZENN(self, layers)
8:     Initialize all the weights & biases for Net $\psi$ , Netp, Net $\phi$ .
9:   def NEURALNET(self, weights, biases)
10:    Build NN for  $\psi$ , p,  $\phi$  with four sets of weights & biases.
11:   def {Net $\psi$ , Netp, Net $\phi$ } (self, x, y, t)
12:     { $\psi$ , p,  $\phi$ } = self.NEURALNET(x, y, t, weights, biases)
13:     u =  $\partial_y \psi$  & v =  $-\partial_x \psi$ 
14:   def TRAIN(self, iterations)
15:     Obtain training time & Losses; train the NN with Adam optimizer.
16:   def PREDICT {u, v, p,  $\phi$ } (self, iterations)
17:     {upred, vpred, ppred,  $\phi$ pred} = self.sess.run(x, y, t)
18: end function
19: Set training sets = {xtrain, ytrain, ttrain, utrain, vtrain, ptrain,  $\phi$ train, layers}
   = TimeDiscretizedNormalization(Simulation Data, timestep)
20: model = BUBBLENET(training sets)
21: model.TRAIN(#Iterations)
22: Rest procedures same as Algorithm 1

```

4.3 训练 & 计算结果

基于以上两种神经网络结构，我们分别使用并对单气泡和多气泡算例进行了训练和预测。我们首先讨论单气泡算例计算结果。两种神经网络训练结果如图4-4、4-5所示。其中，图4-4显示在训练过程中损失函数出现了“梯度爆炸点”（exploding gradients），但是很快梯度继续正常下降。这主要是由于我们使用的优化器导致的。在训练深度神经网络时，随着隐层增加，权重的误差会呈指数级放大致使训练梯度发生急剧增大^[88]。而在本文中，因为使用了'L-BFGS-B'优化算法以及Adam优化器，神经网络的训练步骤可以理解为：先进行设定次数的迭代次数（单气泡算例10000，多气泡200000），在迭代完成后进行L-BFGS-B优化器的迭代。在优化器迭代至一定

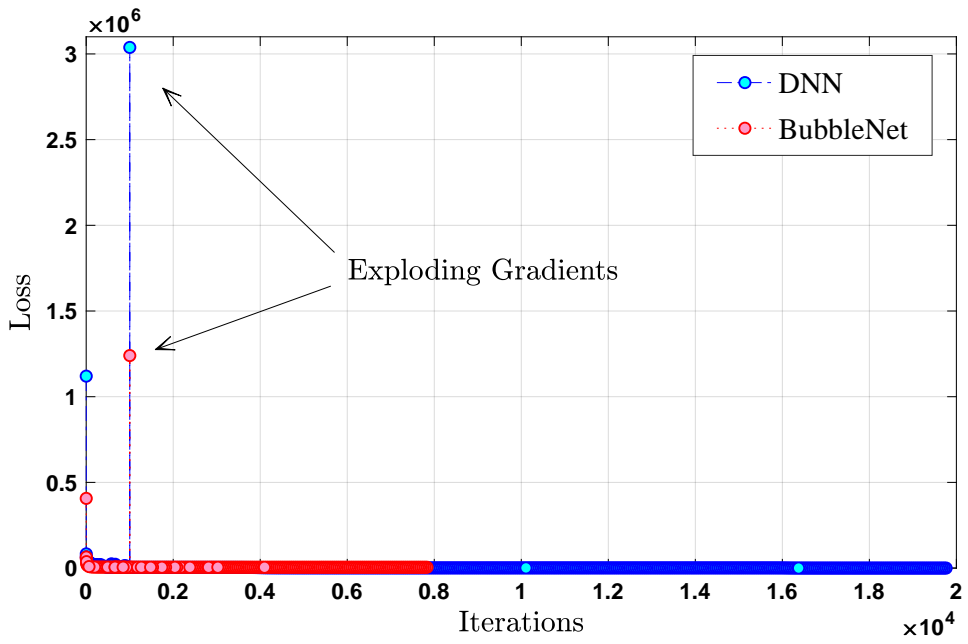


图 4-4 两种网络结构训练的损失函数。

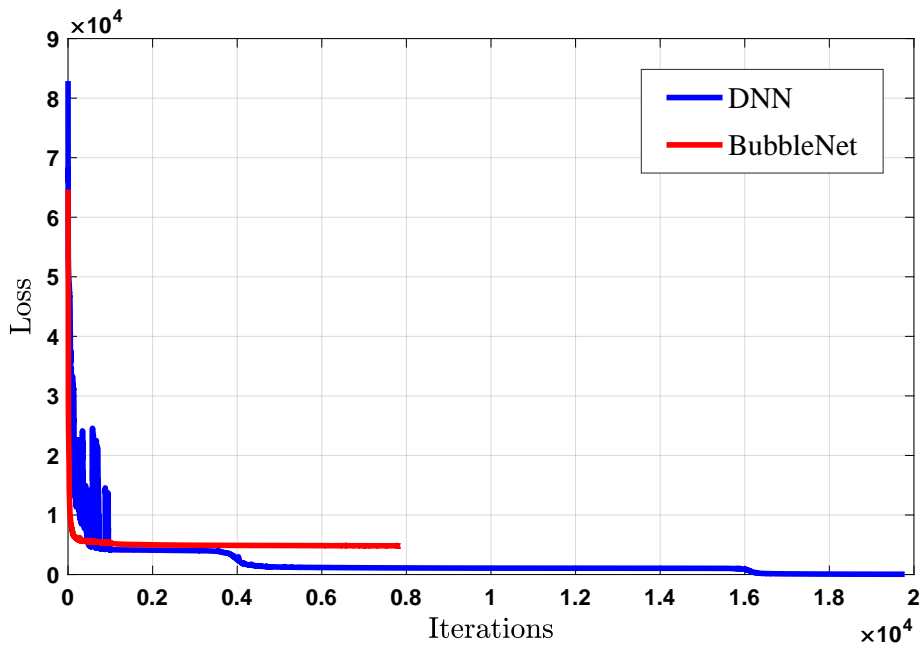


图 4-5 去掉梯度爆炸点后两种网络结构训练的损失函数。

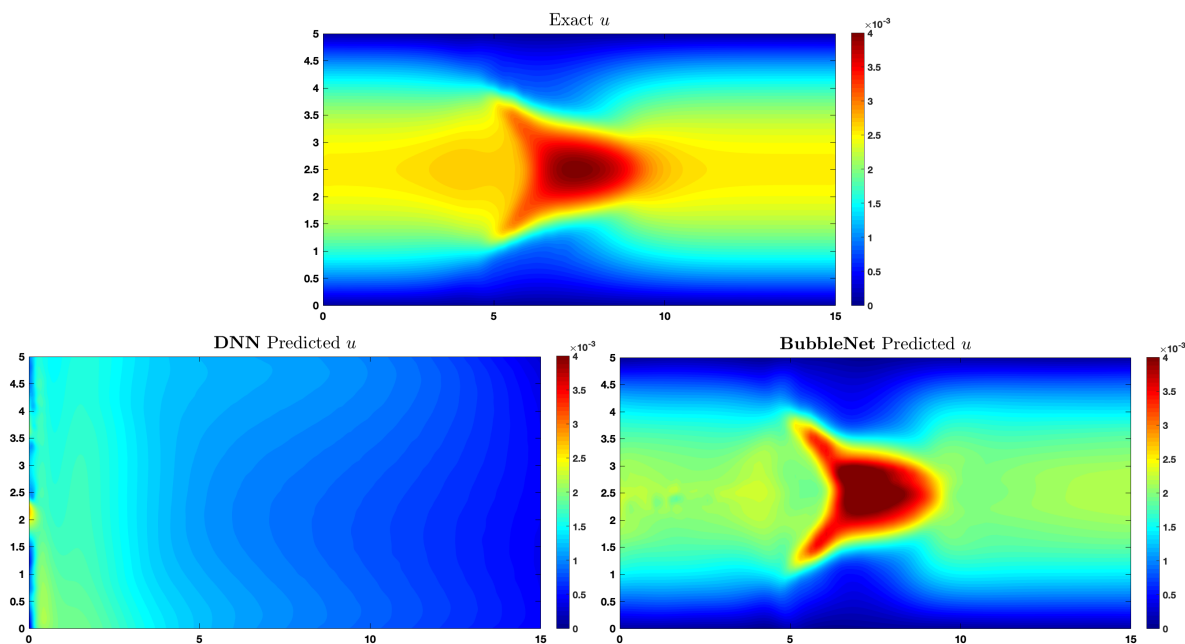


图 4-6 基于物理仿真结果与普通深度神经网络 DNN & 物理神经网络 BubbleNet 预测的速度场 u 分布。

次数后损失函数很难减小，此时便认为训练完成。而我们算例中的梯度爆炸正是发生在迭代次数完成后采用 L-BFGS-B 优化的交替步骤，所以之后损失函数下降依然符合正常趋势。

由图4-5我们可以观察到去掉梯度爆炸点后，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 中引入了物理信息（通过预测 ψ 算出 u, v ），所以该结构可能导致训练过程产生误差，使得 ψ 不同同时精准拟合 u, v 的训练数据。

两种网络结构对于单气泡算例速度场 u 预测结果如图4-6所示。其中，我们可以观察到我们提供的 BubbleNet 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。由前文提到，造成该现象的主要原因为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，在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4-6的特征我们可以基本判断速度场 u 分布满足这种规律。

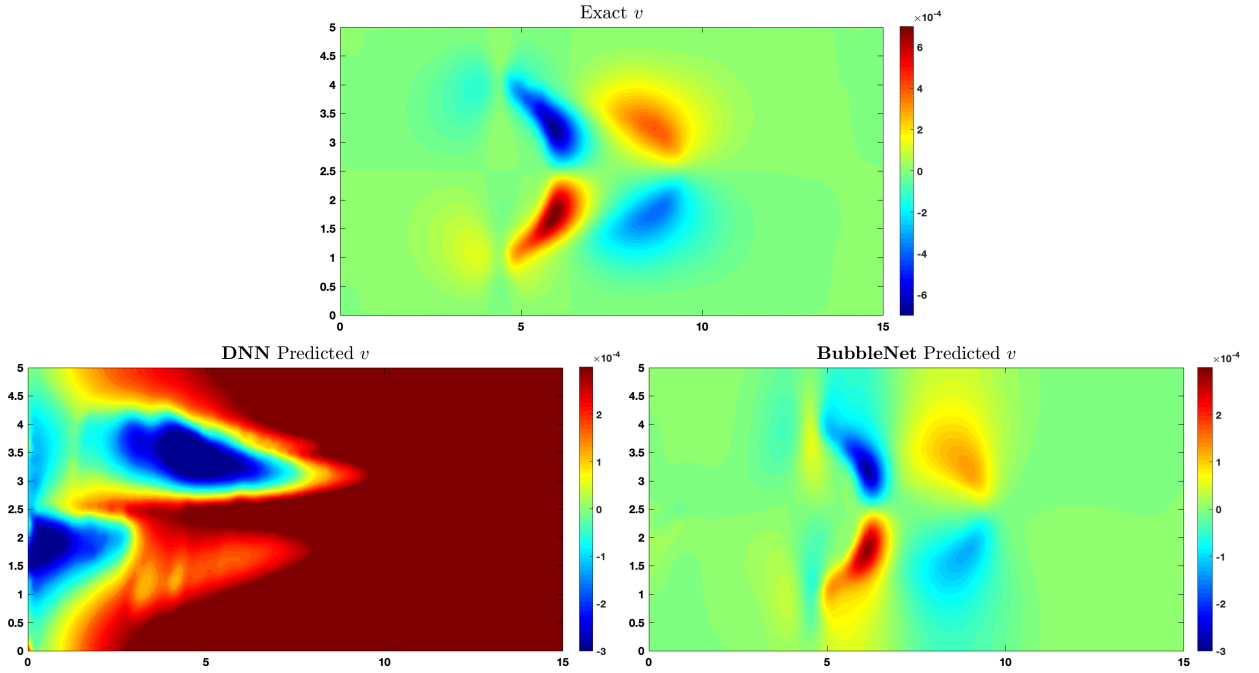


图 4-7 基于物理仿真结果与普通深度神经网络 DNN & 物理神经网络 BubbleNet 预测的速度场 v 分布。

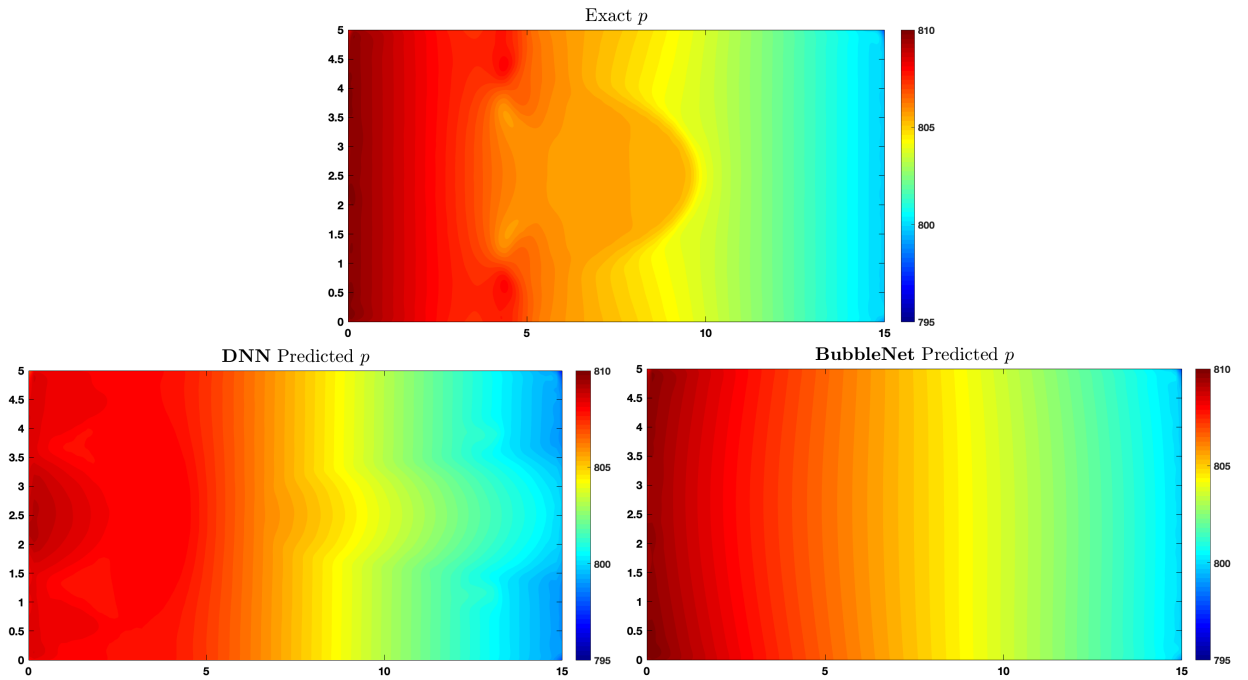


图 4-8 基于物理仿真结果与普通深度神经网络 DNN & 物理神经网络 BubbleNet 预测的压力场 p 分布。

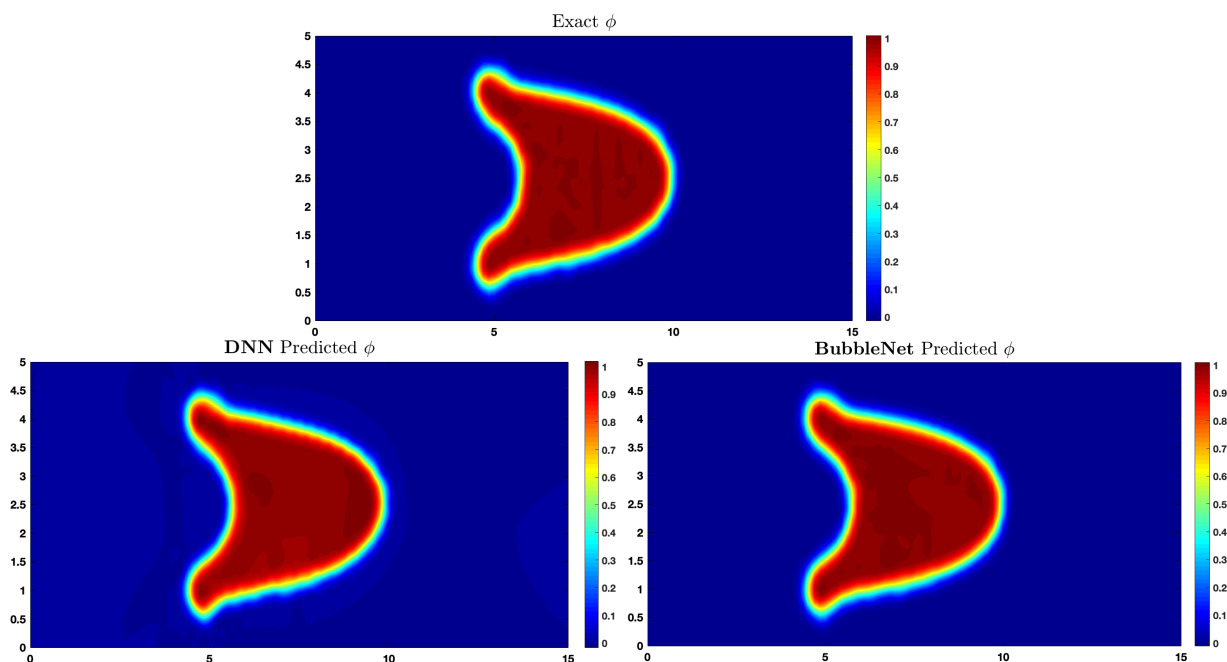


图 4-9 基于物理仿真结果与普通深度神经网络 DNN & 物理神经网络 BubbleNet 预测的相函数 ϕ 分布。

如图4-7, 4-8, 4-8则分别展示了单气泡算例的速度场 v ，压力场 p ，以及相函数 ϕ 的两种神经网络预测。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的明显特征，从而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 已经表现出色，可以基本预测出整体气泡形态；对比之下 BubbleNet 的突出点在于对于场背景预测也更加准确了，对比图4-9左下图场中有部分浅蓝色区域。

在网络训练中，针对不同的归一化方法产生的不同数据，网络训练目标也不同。网络基于损失函数评估训练过程，而损失函数在此可以理解为网络的训练误差，此处用 $\bar{\epsilon}$ 指代。既网络针对输入训练数据所产生预测数值相对误差，可写作

$$\bar{\epsilon} = \frac{|\mathbf{W}_{train} - \mathbf{W}_{pred}|}{|\mathbf{W}_{train}|}$$

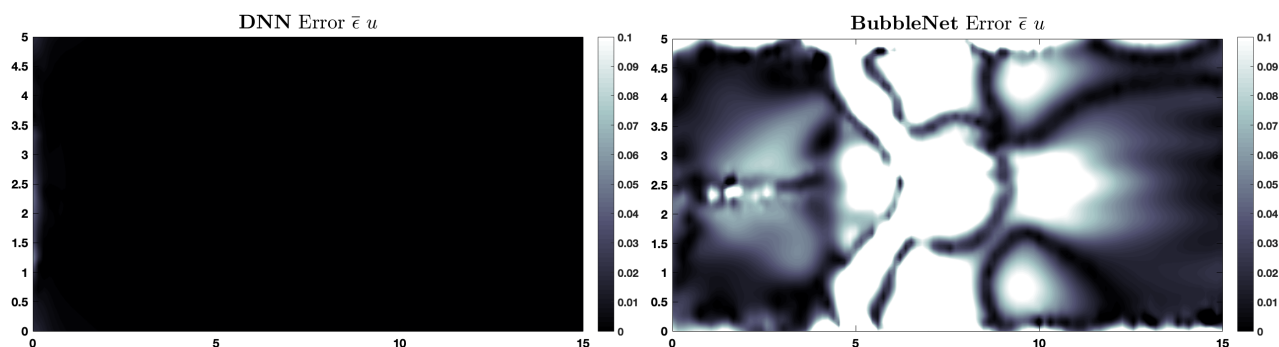


图 4-10 针对速度场 u 的 DNN & BubbleNet 神经网络训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

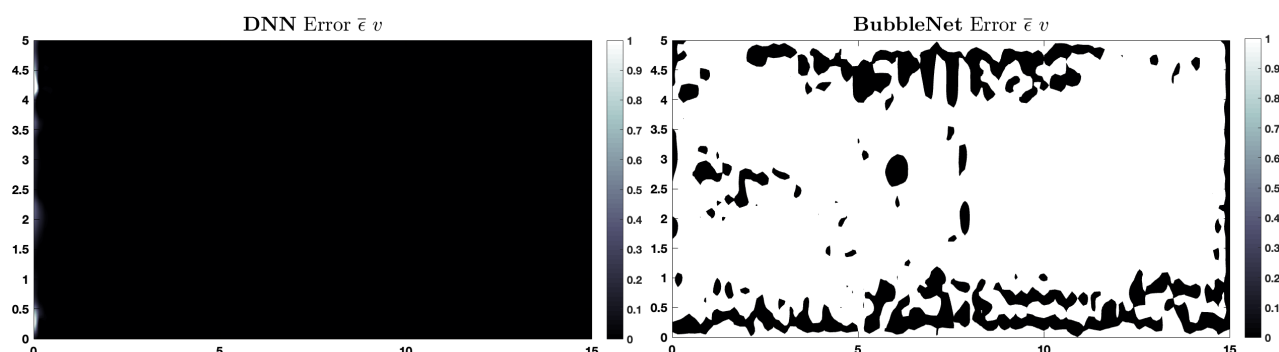


图 4-11 针对速度场 v 的 DNN & BubbleNet 神经网络训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

其中 \mathbf{W} 指代物理系数，此处代表 u, v, p, ϕ 。

速度场 u 的训练误差 $\bar{\epsilon}$ 如图4-10所示。由图我们可以明显看出 BubbleNet 训练误差远高于传统 DNN。

由图4-11我们也观察到同样的趋势：BubbleNet 训练误差远高于 DNN，且不在同数量级上。DNN 的误差标尺 $[0, 1]$ 已不足以描述 BubbleNet 的 v 场 $\bar{\epsilon}$ 分布。为更清晰展示 v 场 $\bar{\epsilon}$ 分布尺度，我们做图4-12，并分别给定 6 个不同的标尺： $[0, 1]$, $[0, 10]$, $[0, 100]$, $[0, 1000]$, $[0, 10000]$, $[0, 100000]$ 。根据 6 个尺度下的坐标分布，我们可以得出在二维场分布的右下侧出现一“误差爆炸点”，且整体误差是围绕场四周分布波动较大。对此，我们根据前文给出的 $\bar{\epsilon}$ 定义给出如下解释：相对误差计算中分母为输入数据 \mathbf{W}_{train} 太小，例如为 10^{-9} 量级，那么即使神经网络训练的绝对误差仅在 10^{-3} 量级，计算相对误差也会达到 10^6 量级，造成我们看到的“误差爆炸”。

同理，压力场 p ，组分分布函数 ϕ 的两种神经网络计算相对误差如图4-13, 4-14, 4-15所示。我们可以用上述理论解释相函数误差爆炸的原因。特殊情况为训练所得

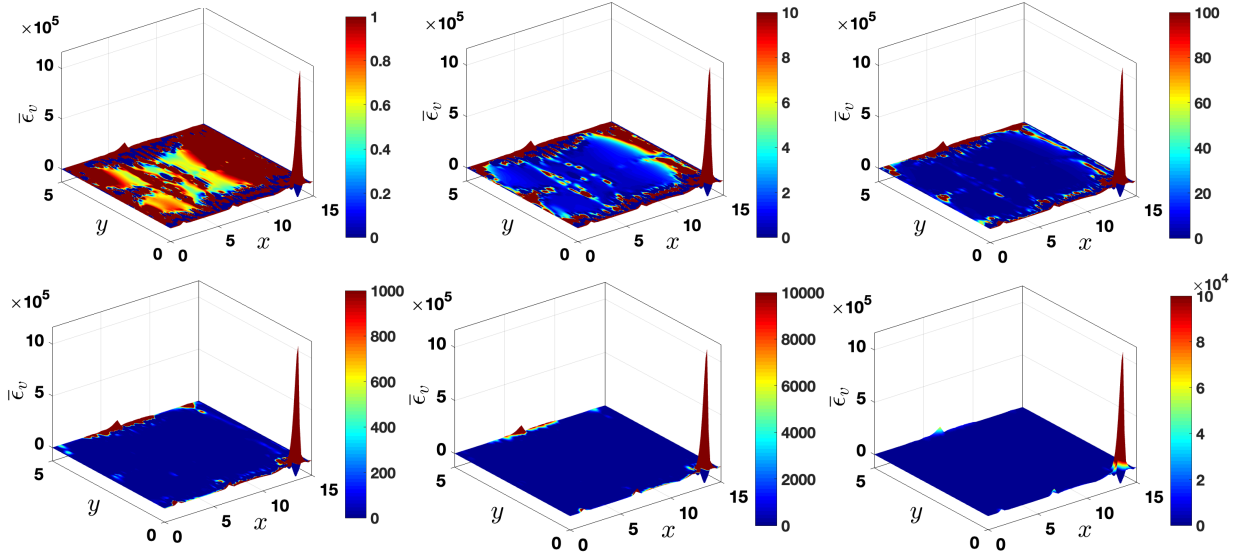


图 4-12 针对速度场 v 的 BubbleNet 训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 在不同标尺下的尺度。

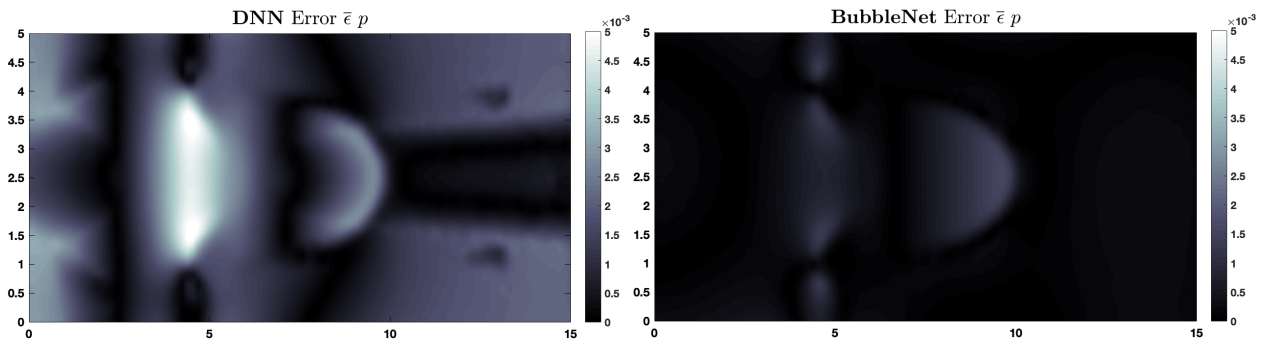


图 4-13 针对压力场 p 的 DNN & BubbleNet 神经网络训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

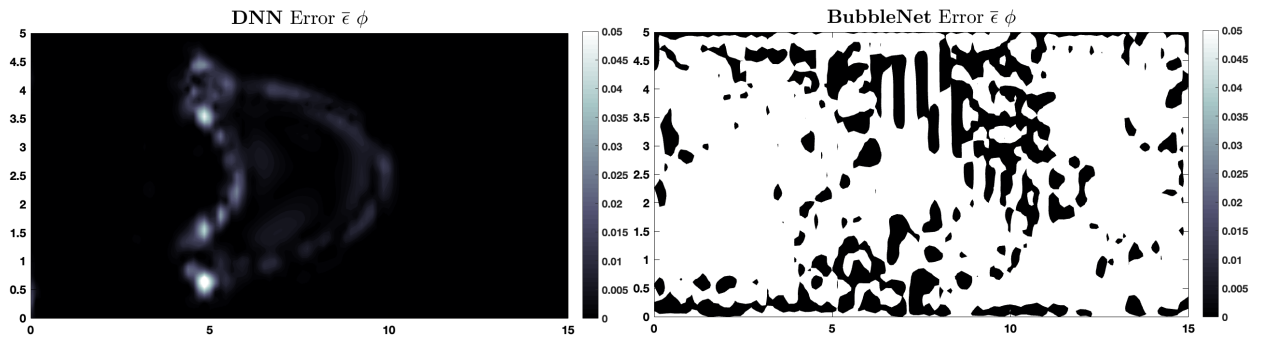


图 4-14 针对相函数 ϕ 的 DNN & BubbleNet 神经网络训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

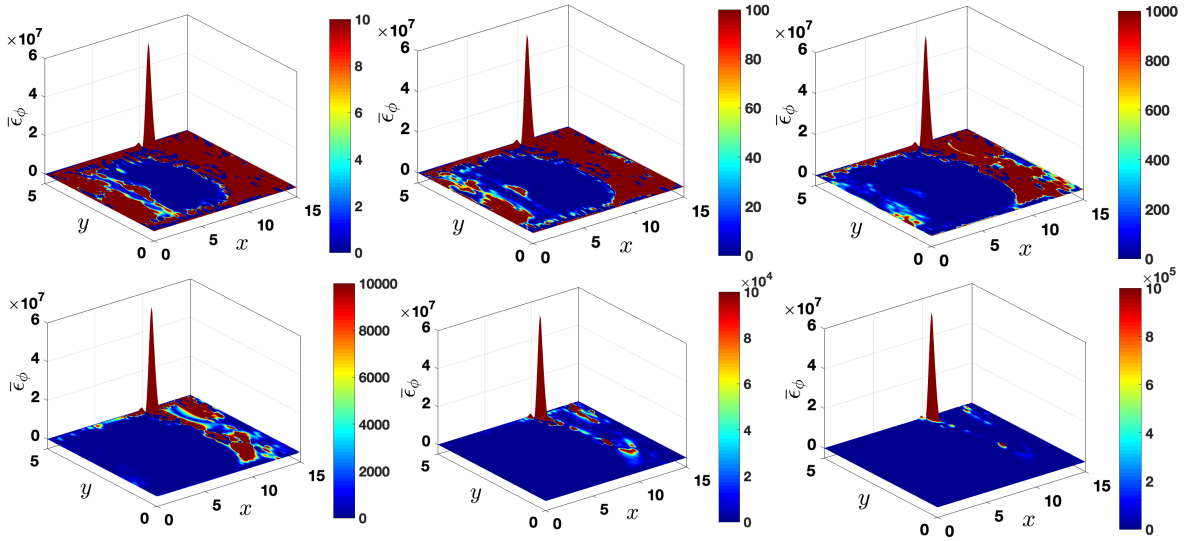


图 4-15 针对相函数 ϕ 的 BubbleNet 训练相对误差 $\bar{\epsilon}$ 在不同标尺下的尺度。

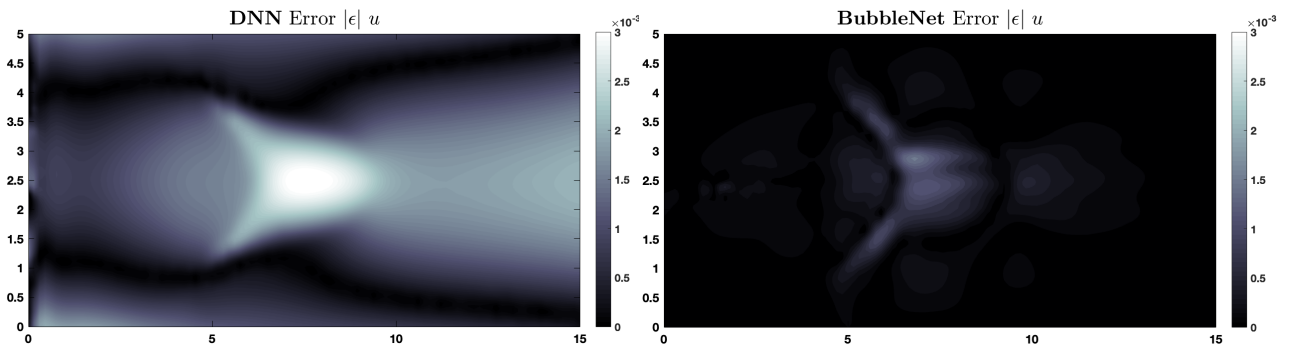


图 4-16 针对速度场 u 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

压力 p 的相对训练误差在此处更小；可以说明在训练上我们提出 BubbleNet 的拟合效果也更好。

在分析神经网络训练效果时，仅考虑训练相对误差是不够的，因为这只反映了网络拟合效果的准确度。对于实际物理问题，我们需要权衡物理场的绝对误差。DNN 和 BubbleNet 对物理场 u, v, p, ϕ 预测的绝对误差 $|\epsilon|$ 如图4-16, 4-17, 4-18, 4-19所示。

由图4-16, 4-17, 4-18我们可看出 BubbleNet 的绝对误差均明显小于传统 DNN，但是两者误差大体分布趋势相同。仅是描述气泡运动形态的组分分布 ϕ 传统 DNN 误差略小于我们提出的 BubbleNet（图4-19），这可能是由于相函数本身分布区间为 $[0, 1]$ ，我们的离散时间归一器以及物理限制在此处不起明显作用。总体来看，对于单气泡算例，我们提出的深度学习框架在误差上显著高于 DNN 并迭代次数更少（图4-5）。

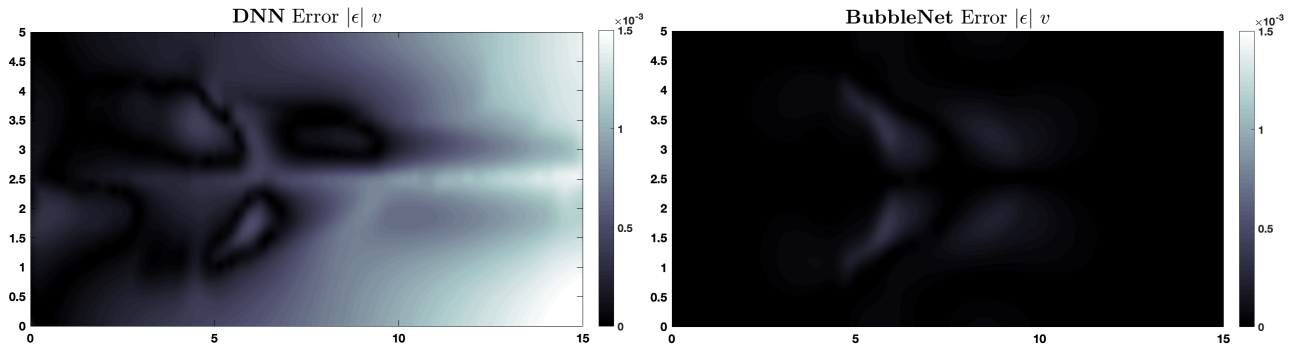


图 4-17 针对速度场 v 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

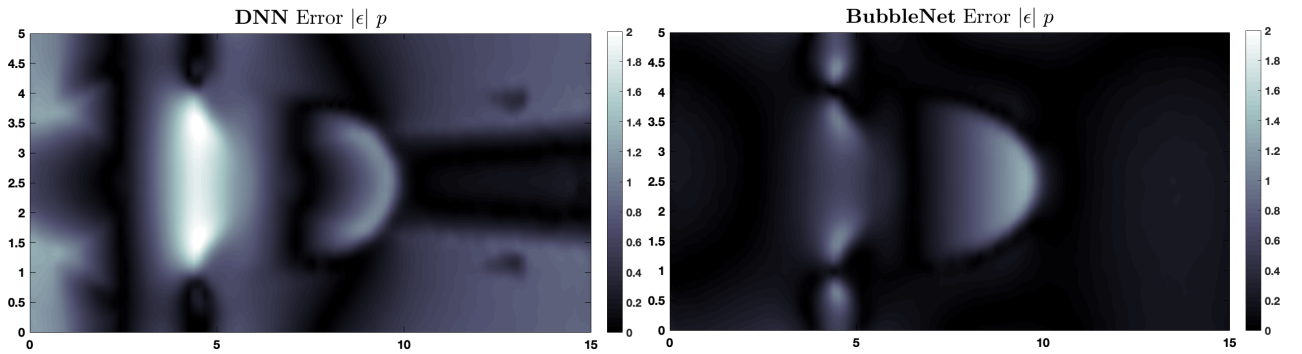


图 4-18 针对压力场 p 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

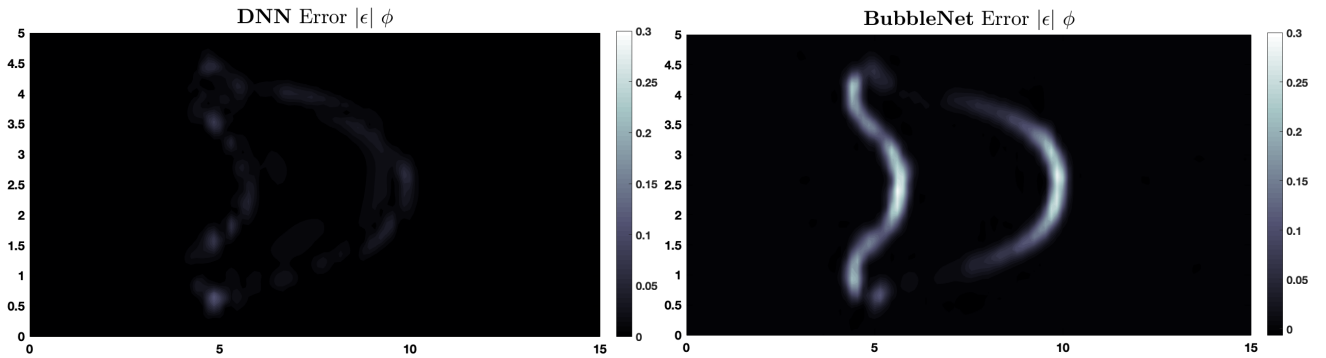


图 4-19 针对组分分布函数 ϕ 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

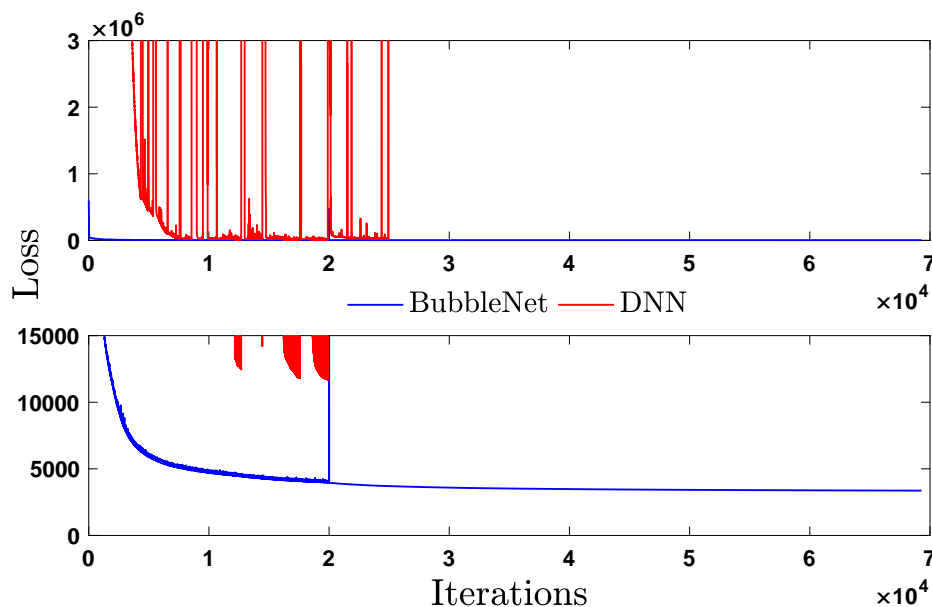


图 4-20 DNN & BubbleNet 针对多气泡算例训练的损失函数下降过程。

对于多气泡算例，分析思路同单气泡算例。理论部分此处不再赘述。首先，两种不同网络针对不同算例训练损失函数下降过程如图4-20所示：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：i.e., 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次训练验证就产生较大误差，是损失函数波动较大。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。

对多气泡流场 DNN 和 BubbleNet 预测的物理场 u, v, p, ϕ 如图4-21, 4-22, 4-23, 4-24所示。其中，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因为速度两分量 u, v 是由潜在函数 ψ 耦合在一起的（为满足连续条件），由于 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合原场分布。图4-22, 4-23, 4-24印证了 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基本完美符合原场分布。

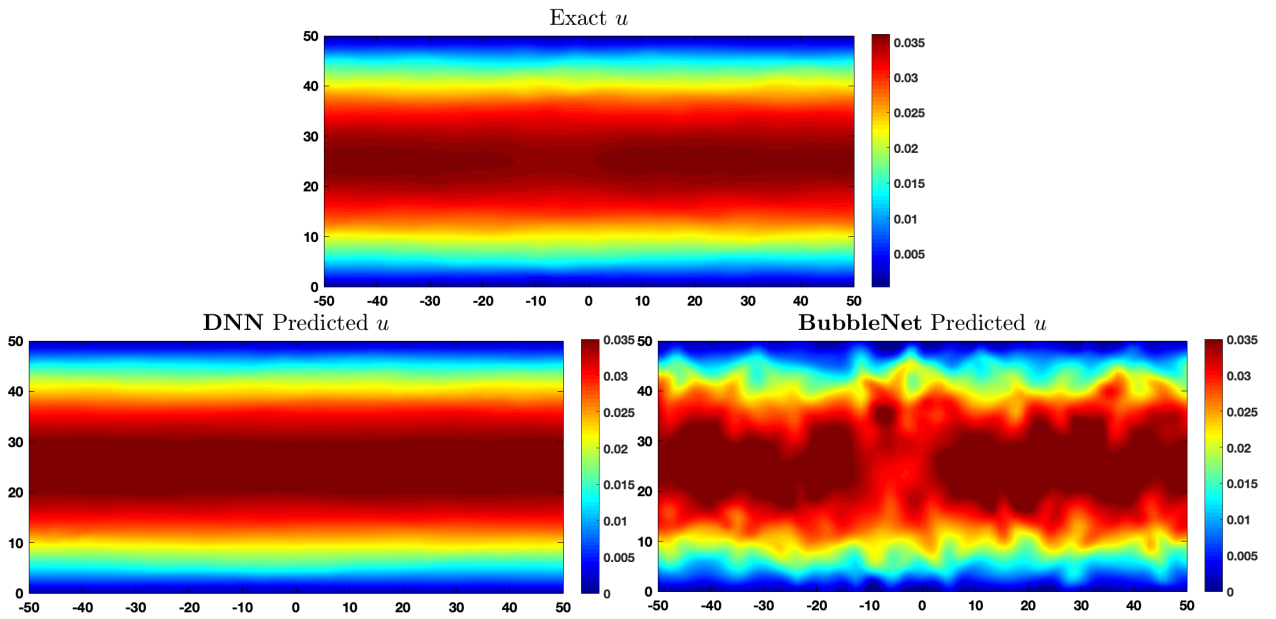


图 4-21 针对速度场 u 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的预测结果和数值模拟结果对比。

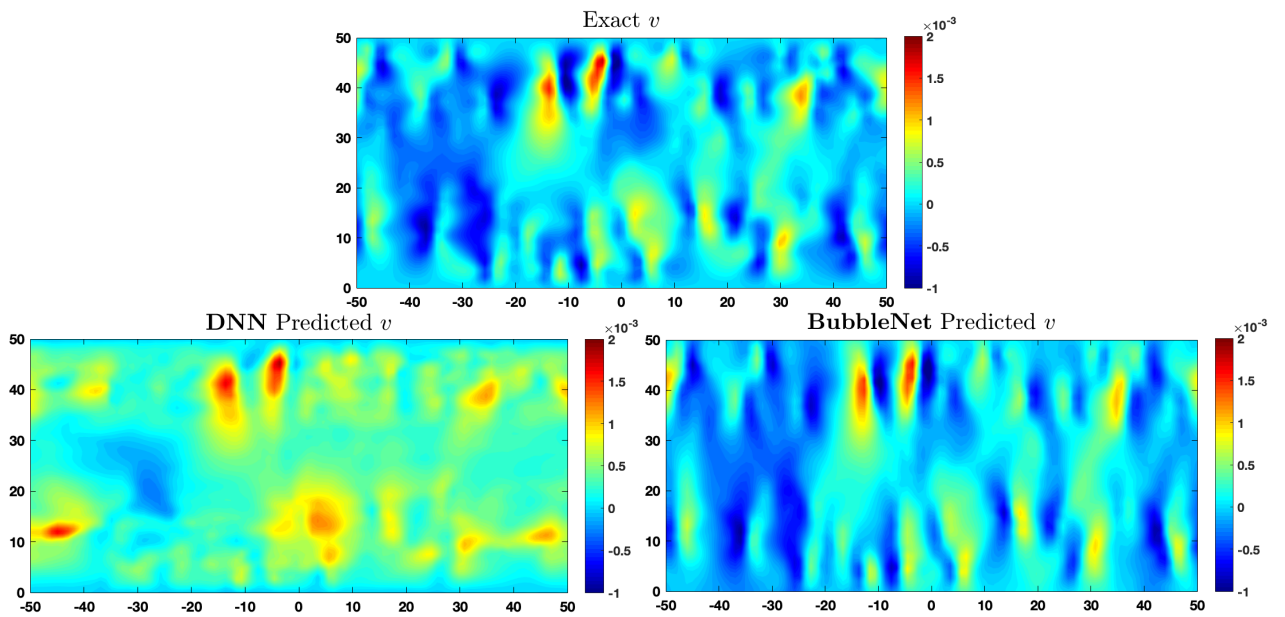


图 4-22 针对速度场 v 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的预测结果和数值模拟结果对比。

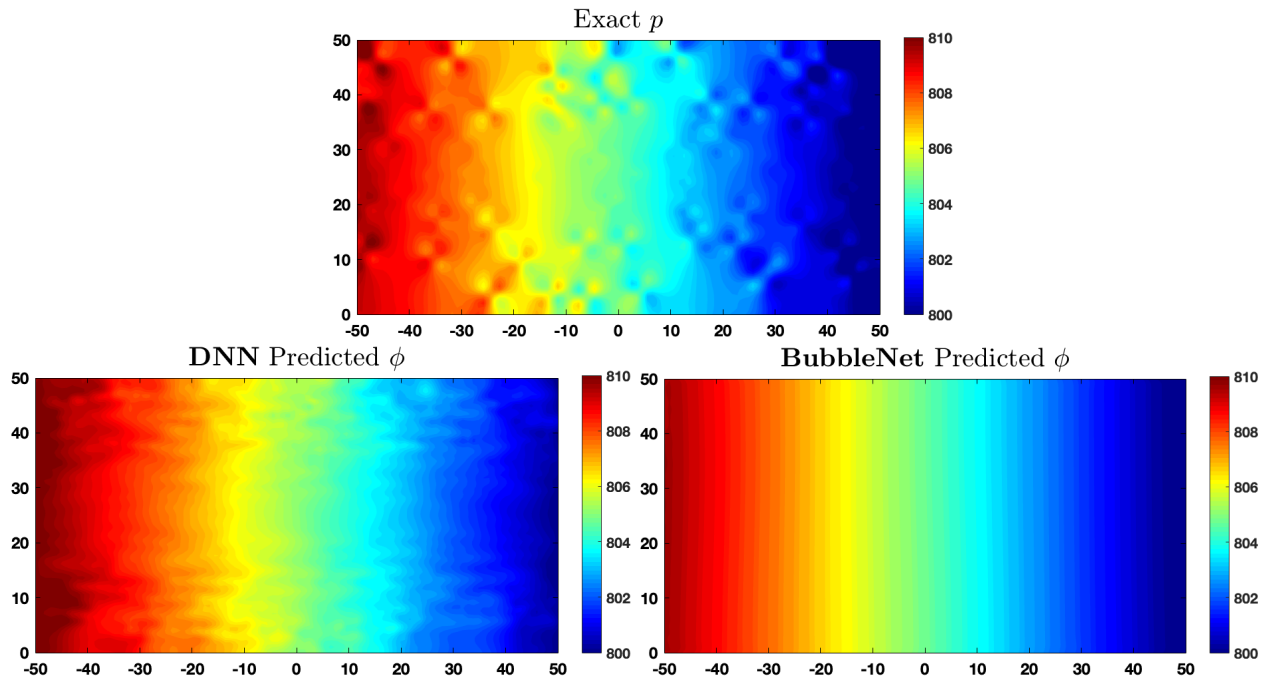


图 4-23 针对压力场 p 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的预测结果和数值模拟结果对比。

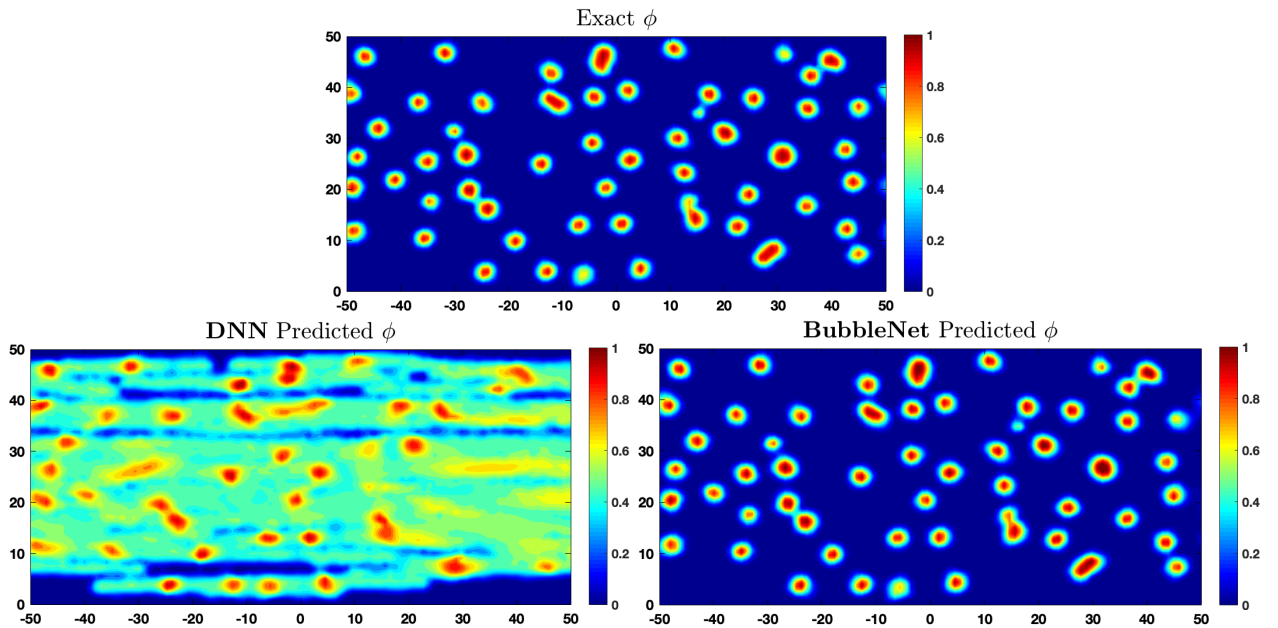


图 4-24 针对组分分布函数 ϕ 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的预测结果和数值模拟结果对比。

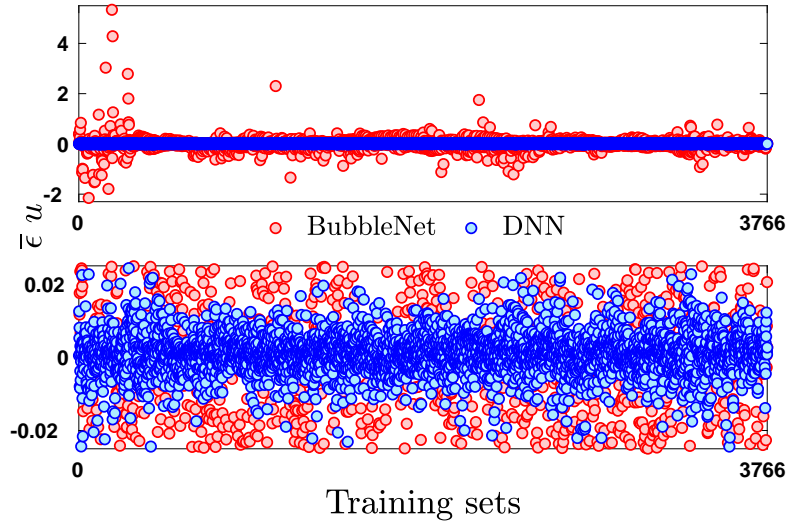


图 4-25 针对速度场 u 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

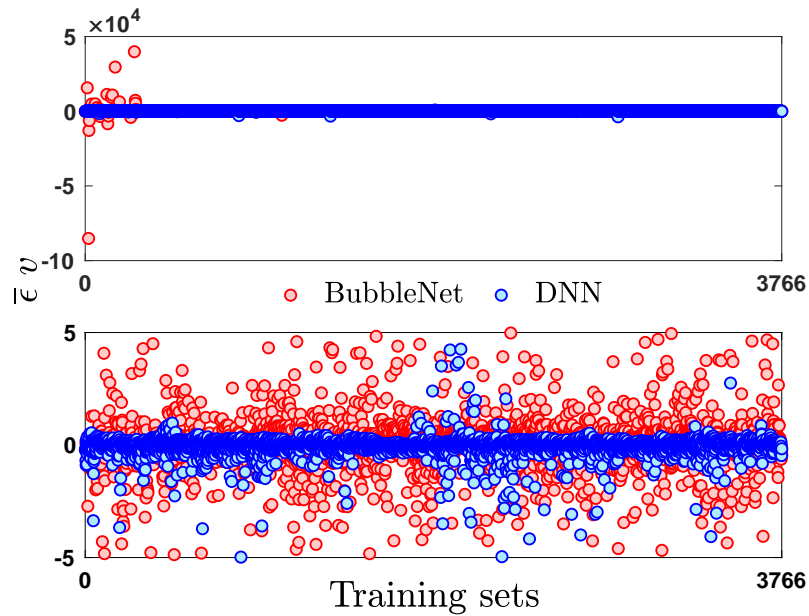


图 4-26 针对速度场 v 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

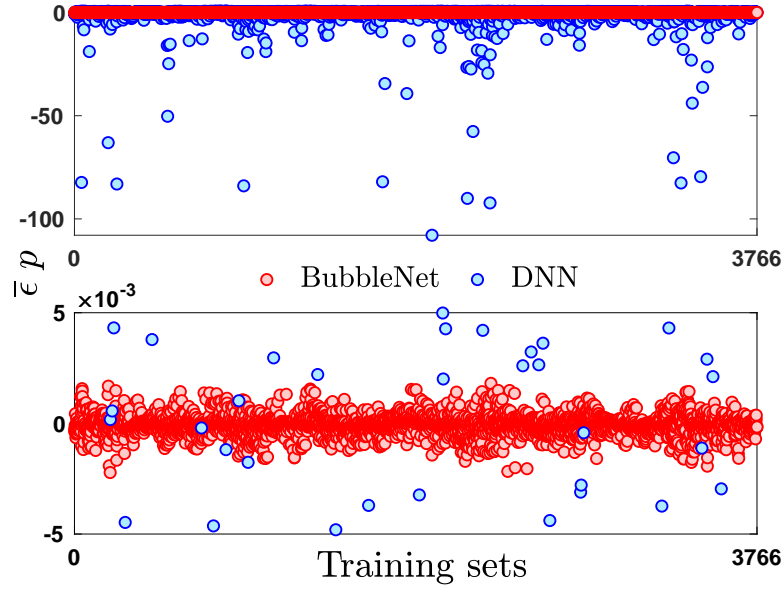


图 4-27 针对压力场 p 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

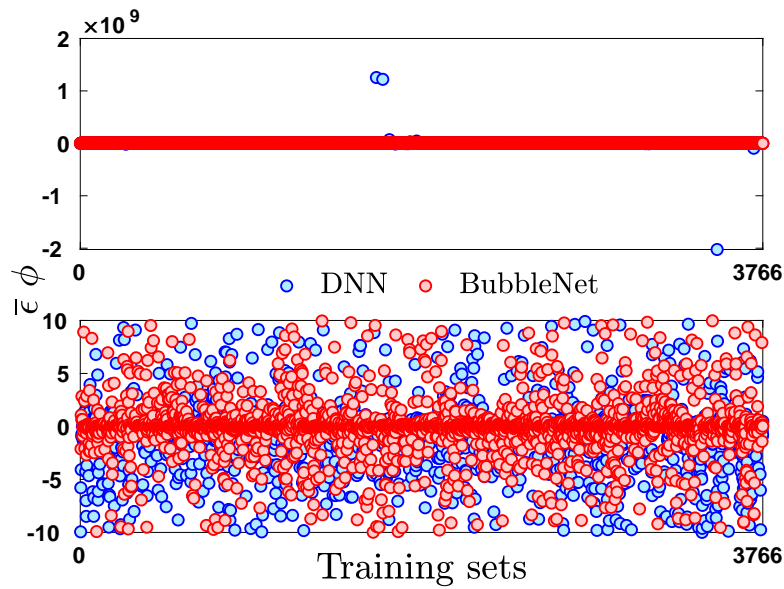


图 4-28 针对组分分布函数 ϕ 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的相对误差 $\bar{\epsilon}$ 。

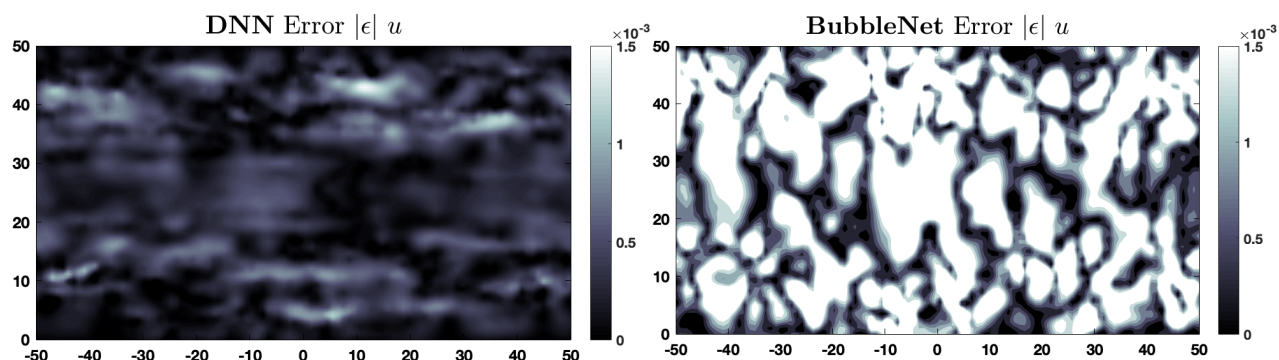


图 4-29 针对速度场 u 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

为了印证神经网络训练效果的好坏，由前面提到的相对误差定义 $\bar{\epsilon}$ ，此处图4-25, 4-26, 4-27, 4-28分别展示了 DNN 和 BubbleNet 训练相对误差分布。由上图可得出，在速度场 u, v 的预测上，传统的 DNN 的训练相对误差低于 BubbleNet；在压力场 p 和组分分布函数 ϕ 上 BubbleNet 高于 DNN。同时对于组分分布函数 ϕ 两个网络总体训练效果相差不大。以此可以说明 BubbleNet 在训练上并没有体现出明显优势，主要优势在于实际预测的场数据更符合原物理分布，这也和前文中对单气泡算例的分析结论是相同的。

最后我们分析 DNN 和 BubbleNet 对于真实物理分布的绝对误差 $|\epsilon|$ ，对物理场 u, v, p, ϕ 的绝对误差分布如图4-29, 4-30, 4-31, 4-32所示。基本分布同我们在前文分析的相同：DNN 对于速度场 u 的绝对误差更小，预测更准确；但是 BubbleNet 在其他物理场 v, p, ϕ 预测时绝对误差均明显小于 DNN，预测精度更高。

对于单气泡和多气泡两个算例下 DNN 和 BubbleNet 的预测过程和结果分析我们均可以得出，BubbleNet 相较于 DNN 的优势主要体现对于物理场分布精度更高，更准确（通过绝对误差 $|\epsilon|$ 得出）。但是在网络训练本身，我们很难明确 DNN 和 BubbleNet 的训练效果好坏，这和数据本身的趋势和结构有关。总而言之，针对微气泡流动的两个算例 BubbleNet 的预测效果均更好，我们因此认为该结构是有效且具有鲁棒性的。

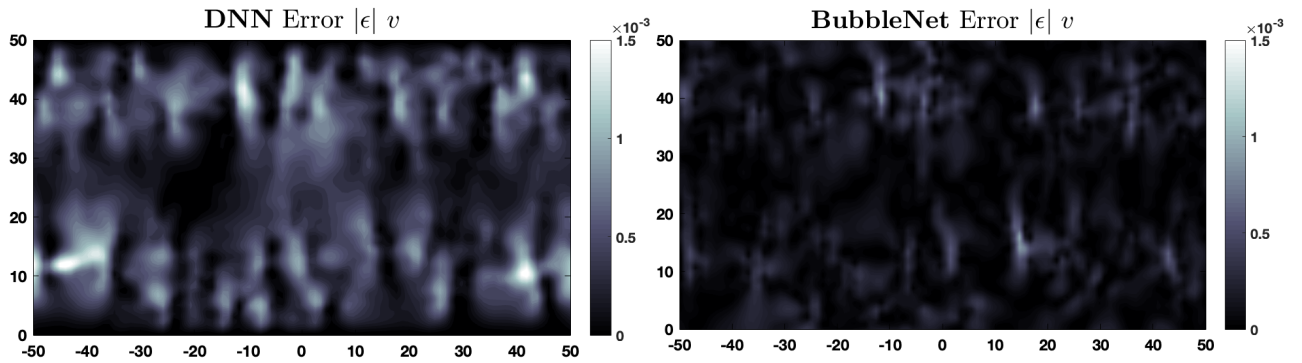


图 4-30 针对速度场 v 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

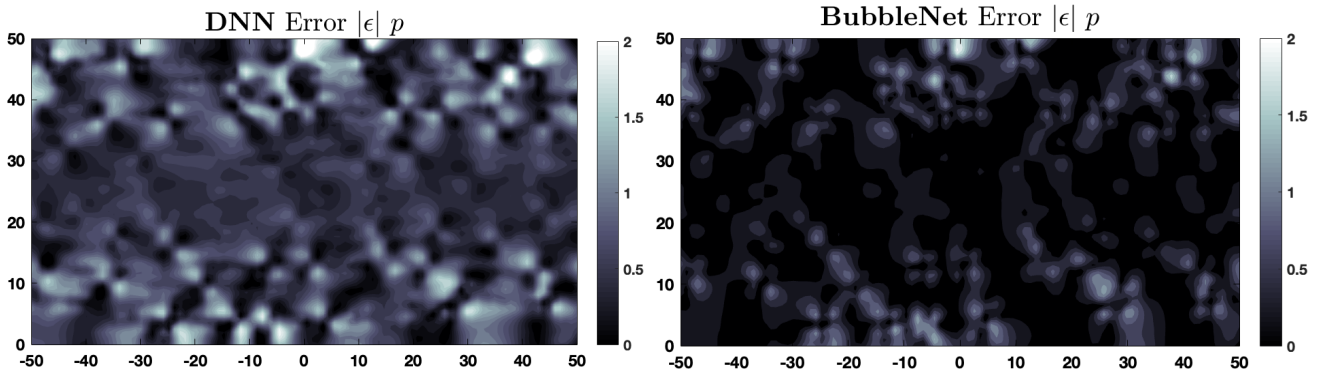


图 4-31 针对压力场 p 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

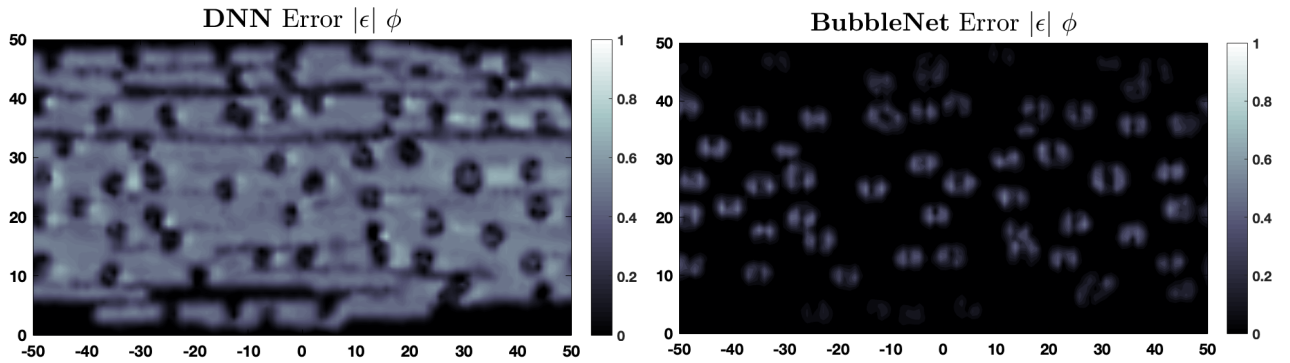


图 4-32 针对组分分布函数 ϕ 的仿真计算与 DNN & BubbleNet 的绝对误差 $|\epsilon|$ 。

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，我们使用了近些年来发展迅速的数据驱动物理深度学习方法来预测微气泡流。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。单气泡算例计算微管道中单气泡运动 $5000\mu\text{s}$ 的过程；多气泡算例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；微气泡群会随着时间推进融合及剥离，算至 $3000\mu\text{s}$ 后大部分气泡已经碰撞融合。其中，单气泡算例与微管道实验中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。微气泡群算例整体流体速度分布符合泊肃叶流动规律。对两算例，我们通过对组分进行分析印证算例符合前后组分守恒，组分比满足误差范围，验证了计算的精确度。

基于物理神经网络^[47]，我们提出了一种全新了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可能较大差异会导致特定时间步特征被“剥夺”使得训练神经网络时让网络被“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，BubbleNet 在预测精度上均高于传统的 DNN（根据与数值模拟的绝对误差 $|\epsilon|$ 对比），但是对于网络本身的训练效果来讲（神经网络训练的相对误差 $\bar{\epsilon}$ 判定），BubbleNet 相较 DNN 并没有明显提高。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。

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
- [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
- [25] Bebis, G., and Georgiopoulos, 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., Karafiát, 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
- [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] Deng, J., Dong, W., Socher, R., et al. (2009) ImageNet: A large-scale hierarchical image database. 2009 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Miami, FL, 2009, pp. 248-255.

- [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. ISBN 978-0-08-097150-6.
- [39] Ahmadian, A.S. (2016) Numerical Models for Submerged Breakwaters. ISBN 978-0-12-802413-3.
- [40] Mazumder, S. (2016) Numerical Methods for Partial Differential Equations. ISBN 978-0-12-849894-1.
- [41] Rapp, B.E. (2017) Microfluidics: Modeling, Mechanics and Mathematics. ISBN 978-1-4557-3141-1.
- [42] Neill, S.P., and Hashemi, M.R. (2018) Fundamentals of Ocean Renewable Energy. 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) DeepMMnet: 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) DeepMMnet 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., Esmailzadeh, S., Azizzadenesheli, K., et al. (2020) MeshfreeFlowNet: 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 Hynynen, 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] Talu, 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 superwetable 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>
- [78] Wikipedia. Multiphase Flow. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Multiphase_flow
- [79] Fedosov, D.A., Peltomäki, 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 microconfined 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-methodfrom-ME>
- [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] Suter, 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-le>

附录

附录 A N-S 方程的推导

第 2 章节中我们给出并直接使用了一般形式下的 N-S 方程。该方程可由 Eulerian 及 Lagrangian 坐标系下分别推导出。现我们给出基于 Lagrangian 坐标系推导过程^[77]。

Eulerian & Lagrangian 视角

在描述流体运动时，Eulerian 坐标系（视角）是基于固定坐标系对以固定空间内的流体运动进行描述；而 Lagrangian 坐标系（视角）则是跟随但流体微团（粒子），追踪其运动轨迹^[89]。两视角下描述流体运动示意图如图附录-1所示。

Lagrangian 与 Eulerian 速度描述可写作关系式：

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_E(t, x_p, y_p, \delta_p)$$

若考虑时间相关情形，则坐标变量均与时间存在函数关系：

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_E(t, x_p(t), y_p(t), \delta_p(t))$$

因此，基于 Lagrangian 视角的加速度可写作：

$$\mathbf{a}_L = \frac{d\mathbf{u}_L}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}_E}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}$$

其中， \mathbf{a}_L 为 Lagrangian 视角下流体加速度；在本文主要考虑的二维情况下， $\mathbf{u} = (u, v)$ ，

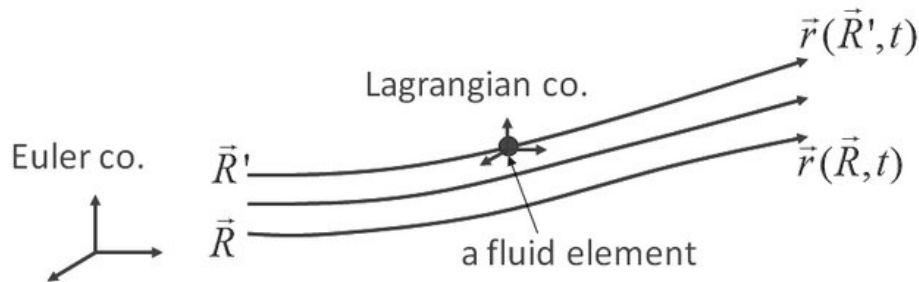


图 附录-1 Eulerian 和 Lagrangian 坐标系的示意图，图源^[89]。

$\mathbf{x} = (x, y)$ 。

我们因此给出物质导数（material derivative） D 的定义：

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u} = \frac{D\mathbf{u}}{Dt}$$

现在，我们给出牛顿第二定律并可展开为：

$$m\mathbf{a} = \mathbf{F} \quad \rightarrow \quad \rho V \mathbf{a} = \mathbf{F}$$

现将前文中给出的物质导数定义带入牛顿第二定律，若只考虑流体所受重力情况下，在二维情况下方向向量为 (\mathbf{i}, \mathbf{j}) ，我们得出：

$$\rho V \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = V(-\nabla p - \rho g \mathbf{j})$$

其中 p 为流体所受压强。

我们可以进一步把上述方程化简为：

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = (-\nabla p - \rho g \mathbf{j})$$

如果将物质导数的定义带入展开的话，我们可以得到如下形式：

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{u} = (-\nabla p - \rho g \mathbf{j})$$

这便是狭义 N-S 方程（动量方程）的一般形式。广义 N-S 方程还包括能量守恒，质量守恒（连续性条件）等（第 2 章已给出），在此不过多赘述。

附录 B 多相流理论的数学基础

在第 2 章中我们简要地给出多相流体在计算中的控制方程。为更严谨的表述多相流运动，特别是本文中涉及的气-液两相运动，我们基于 Darby, R. 关于多相流的课件，给出描述涉及两相运动的基本方程和数学关系。

现对于一两相流系统，有液-气两相（liquid-gas, L-G），系统的总质量为 m ，质

量导数可以写作：

$$\dot{m} = \dot{m}_L + \dot{m}_G = \rho_L Q_L + \rho_G Q_G$$

其中 Q 为体积流动率（volume flow rate）。

我们因此可以写出多相流系统的质量通量 G （mass flux）：

$$G = \frac{\dot{m}}{A} = \frac{\dot{m}_L}{A} + \frac{\dot{m}_G}{A} = G_L + G_G$$

基于质量通量 G ，我们可以写出多相流系统的体积通量 J （volume flux）：

$$J = J_L + J_G = \frac{G}{\rho} = \frac{G_L}{\rho_L} + \frac{G_G}{\rho_G} = \frac{Q_L + Q_G}{A}$$

现假设两相流系统中气相占比为 ϵ 。多相流系统的整体体积 $V = J$ ，则气相和液相的体积可以写作：

$$V_G = \frac{J_G}{\epsilon}, \quad V_L = \frac{J_L}{1 - \epsilon}$$

为方便后续推导，我们引入

$$S = \frac{V_G}{V_L}, \quad \kappa = \frac{\dot{m}_G}{\dot{m}_G + \dot{m}_L}$$

根据 κ 和 S ，气液两相质量导数的比值可以写为：

$$\frac{\dot{m}_G}{\dot{m}_L} = \frac{\kappa}{1 - \kappa} = S \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right) \left(\frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \right)$$

多相流系统的密度可写作

$$\rho = \epsilon \rho_G + (1 - \epsilon) \rho_L$$

我们因此可以将前文中引入的气象体积分数 ϵ 展开为

$$\epsilon = \frac{\kappa}{\kappa + S(1 - \kappa)\rho_G/\rho_L}$$

致 谢

值此论文完成之际，作者首先感谢导师胡国辉教授，与胡老师多次的交流与讨论奠定了后期的选题和成果；胡老师就方向上的指导和建议推动了算法上的相应的创新与优化。胡老师在资源和经费上的大力支持才使得后期结果的产生。胡老师追求严谨的学术精神更促进了我对于力学问题的思考和研究方式和思路的形成。同时感谢我的父母，亲友以及家人们，他们对我的无私关怀，支持和鼓励推动了我学术的道路上追求创新，勇攀高峰。还要感谢实验室师兄师姐们提出相关意见为我答疑解惑，特别是陆钰师兄的帮助。还要感谢力学系的同学们，正是力学同学们浓厚的学术氛围，融洽的同学关系促进了我们更好的学习力学，使用力学；更帮助大家更自由、开放的选择自己的研究方向。最后，还要感谢力学系的各个老师和教职工们，他们的专心研究和辛勤奉献奠定了我们四年本科学习的理论基础；更促进了我们走进力学学科，开创属于自己的方向。文中部分计算资源由上海索辰信息科技股份有限公司支持；文中主要计算基于北京超级云计算中心计算资源运行。文章中提出的 BubbleNet 源代码已经开源在 GitHub: <https://github.com/hanfengzhai/BubbleNet>, 相关内容的技术细节和使用方法详见作者个人网站: <https://hanfengzhai.net/BubbleNet>

作者还要感谢力学、计算机科学、计算物理领域内一路以来的先驱者和大师们，正是他们的不懈努力，开创了计算力学和深度学习的今天。同时，作者也感谢开源社区（Open Source Community）提供的公开、透明的文化。若没有大量优秀代码开源在 GitHub, GitLab, Zenedo 等开源平台上并供同行使用，计算力学和机器学习领域也不会有今日辉煌的成就。前人的努力铺垫了后续学者在大厦上建立新的理论。

