arXiv:2301.09860v1 [cs.LG] 24 Jan 2023

# 面向反应流的预测型物理感知混合降阶模型

A. Corrochano[1,*], R.S.M. Freitas[2,3],
A. Parente[2,3] 和 S. LeClainche[1]

[1] 马德里理工大学航空与航天工程学院，西班牙

[2] 布鲁塞尔自由大学，布鲁塞尔理工学院，航空热力学与力学实验室，比利时布鲁塞尔

[3] 布鲁塞尔自由大学与布鲁塞尔自由大学，布鲁塞尔热流体系统与清洁能源研究所（*BRITE*），比利时布鲁塞尔

**摘要**

本文提出了一种新的混合预测降阶模型（ROM），用于求解反应流问题。该算法基于本征正交分解（POD）进行降维，并结合深度学习架构，将自由度从数千个时间点缩减至少数 POD 模态及其对应的时间系数。为预测时间系数，本文测试了两种不同的深度学习架构，分别基于循环神经网络（RNN）和卷积神经网络（CNN）。针对每种架构，本文构建了不同模型，以了解神经网络各参数的作用。结果表明，这些架构能够预测 POD 模态的时间系数以及完整快照。对于所分析的所有变量，RNN 的预测误差都较低。研究还发现，该模型能够预测更复杂的仿真，展现出迁移学习能力。

关键词：降阶模型、深度学习架构、POD、模态分解、神经网络、反应流

*通讯作者电子邮箱：adrian.corrochanoc@upm.es（A. Corrochano）、rodolfo.da.silva.machado.de.freit@ulb.be（R.S.M. Freitas）、Alessandro.Parente@ulb.be（A. Parente）、soledad.leclainche@upm.es（S. Le Clainche）。

预印本已提交至预印本 *2023*年*1*月*25*日

## 1. 引言

燃烧系统的发展在未来仍将发挥作用，主要用于那些需要高能量密度的应用，因此推动了旨在开发燃料灵活、高效且清洁的燃烧技术的基础研究。为此，燃烧领域的研究人员一直致力于并将继续努力理解反应流背后的物理机制。这一努力源于迫切需要提升燃烧技术的性能与效率，并旨在寻找新的燃料灵活替代方案，以取代目前对化石燃料的使用。

为应对这些挑战，计算模型有助于推进对反应流的现有认识。然而，燃烧过程涉及大量物种（维数灾难）、空间和时间尺度种类繁多，以及湍流与化学反应之间的非线性交互作用，这些因素限制了数值模拟工具在大型燃烧系统设计与运行中的应用 [1]。降阶模型（ROM）是一种颇具吸引力的解决方案，可克服这些限制，因为它们能够作为高保真模型的替代模型 [2, 3, 4]。

随着数据科学的发展 [5, 6, 7], ，如何充分利用实验和高保真模拟所提供的数据，正带来新的挑战与研究机遇。关于数据驱动机器学习在燃烧领域应用的详细介绍，可参见文献 [8]。燃烧领域已采用两种主要的机器学习降阶模型：无监督学习和监督学习。用于在燃烧系统中构建无监督降阶模型的两种算法是主成分分析（PCA）[9]和动态模态分解（DMD）[10]。PCA 是一种将数据分解为主成分的算法，这些主成分是原始变量的线性组合。利用该方法，可以将原始数据投影到低维流形上。PCA 已用于重新参数化热化学状态，从而加速计算流体力学（CFD）模拟 [11, 12]。PCA 还用于聚类 [13, 14], 、特征提取与选择 [15, 16, 3, 17] 以及数据分析 [15, 18]。

DMD 是一种用于分析非定常系统的数据驱动技术。它可用于降维或研究流动模式

在燃烧中与流动不稳定性相关 [19, 20, 21, 22]。近来，高阶动态模态分解（HODMD） [23] 被发现更适合分析复杂流动 [24, 25, 26, 27]。该算法也已通过反应流分析的验证 [28]。

在监督学习领域，人们已开展大量研究来构建降阶模型。近期，Brunton 等人 [29] 回顾了流体动力学降阶模型的最新进展。他们强调，具备物理感知能力的机器学习有助于改进流体模拟。此外，研究人员还将不同的机器学习模型应用于多种燃烧仿真场景。Huang 等人 [30] 使用卷积神经网络（CNN），根据二维重构结果重构三维火焰。Li 等人 [31] 使用单隐层神经网络（NN），加快新型清洁燃料的设计。一些模型已用于优化发动机性能和控制，相关研究见文献 [32, 33]。Sharma 等人 [34] 构建了一个人工神经网络，用于模拟氢燃烧过程。Nikitin 等人 [35] 提出了一种氢氧化模型，并训练神经网络，使其能够根据系统的多种初始条件进行时间预测。

降阶模型与深度学习相结合，为提升燃烧仿真效果提供了颇具吸引力的途径。为此，Zhang 等人 [36]提出了一种结合本征正交分解（POD） [37]与神经网络的降阶模型，用于根据波后流场重建气相爆轰波的胞状表面。Wang 等人 [38] 提出了一种结合 POD 与神经网络的方法，可为准一维连续可变共振燃烧室提供可靠的解。本研究提出了一种混合降阶模型，将 POD 降维与基于物理原理的深度学习架构相结合。具体而言，POD 将数据降维为一组空间上正交的空间模态以及时间模态。随后，将这一分解结果输入两种深度学习算法，利用时间系数中嵌入的信息，揭示系统潜在的物理动力学。这两种技术的结合已应用于流体力学领域，可用于重建流场 [39, 40] 或构建预测模型[41]。本文在 Abad´ıa-Heredia 等人 [41],的研究基础上，通过将 POD 与神经网络架构相结合，拓展预测型降阶模型的适用范围。

本文结构安排如下。第 2 节介绍混合降阶模型算法。第 3 节简要介绍数值模拟以及提取的数据库。主要结果和结论将在

分别见第4节和第5节。

## 2. 计算框架

本文所用算法结合了燃烧领域广泛使用的预处理技术、用于降维的POD，以及基于循环神经网络（RNN）和卷积神经网络（CNN）的深度学习预测模型。

首先，将数据整理成如下快照矩阵

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_{K-1}, \boldsymbol{v}_K], \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{J \times K}$ 和 $\boldsymbol{v}_k$ 是时刻 $t_k$反应流的状态变量。此处，$K$ 是按时间等间隔采集的快照数量，而$J = N_v \times N_x \times N_y \times N_z$ 为 $N_v$ 变量数量，$N_x$、$N_y$和 $N_z$ 分别为域的流向、法向和展向空间分量上的网格点数量。本文所述的应用是一个二维轴对称算例，因此快照矩阵（式（1））的维度为（$N_v \cdot N_x \cdot N_y$）$\times K$。

### *2.1.* 预处理技术

由于燃烧本质上是一个多尺度问题，描述整个系统的热力学状态之间可能相差数个数量级，因此必须对数据库进行处理，以获得有意义的结果。将变量纳入快照矩阵 $\boldsymbol{X}$之前，必须先对每个变量进行预处理。本研究采用的技术为中心化和缩放。中心化是指减去变量的时间平均值，使分析聚焦于围绕均值的脉动。采用缩放是为了能够在同一基准上比较各变量。在本分析中，变量按其标准差进行缩放$\sigma_j$。这种称为自动缩放的缩放方法使所有变量具有同等重要性 [42]。中心化和缩放可用同一公式概括为

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_j(t_k) = \frac{\boldsymbol{x}_j(t_k) - \bar{x}_j}{\sigma_j}, \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{x}_j$ 是第$j$个变量，$\bar{x}_j$ 是时间平均值，$\tilde{\boldsymbol{x}}_j$ 是缩放后的变量。

*2.2.* 本征正交分解

数据库预处理完成后，采用 POD [37]对数据库进行处理，以降低问题的维度。该方法将原始数据分解为 POD 模态 $\boldsymbol{\Phi}_j(x,\ y)$的组合，这些模态在空间上相互正交，并且在能量保留方面是最优的。通过最小化 POD 近似与全阶模型之间的均方误差，可以求得最优模态。最后，该方法将流场建模为 POD 模态与时间系数$c_j(t)$的线性组合，

$$\boldsymbol{X} \simeq \sum_j c_j(t)\boldsymbol{\Phi}_j(x,y). \tag{3}$$

在本研究中，我们采用奇异值分解（SVD） [43] 算法执行 POD。该算法将原始快照矩阵分解为 POD 模态 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{J\times N}$、时间系数 $\boldsymbol{T}$和奇异值 $\boldsymbol{\Sigma}$，其中奇异值包含各模态的能量及其对反应流场的贡献，表示为

$$\boldsymbol{X} \simeq \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{\Sigma}\,\boldsymbol{T}^{\top}, \tag{4}$$

其中，$()^{\top}$ 表示转置矩阵。对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 包含奇异值 $\sigma_1,\ \cdots,\ \sigma_N$，与 $N$ 选定的 POD 模态相关。模态按奇异值从高到低排序，其中能量最高的模态（奇异值最大）能够提供有关热力学状态动力学的可靠信息。对于给定的能量保留比例，可以设定 POD 模态的数量 $N$

$$E(\%) = \frac{\sum_{j=1}^{N}\sigma_j}{\sum_{j=1}^{K}\sigma_j}. \tag{5}$$

选择部分 POD 模态可以消除实验中的噪声水平或流动结构中的小尺度，仅保留最大的尺度；这些尺度与流动的相干结构相关，并决定其主要动力学特征。

最后，采用相对均方根误差（RRMSE）来衡量使用 N 个模态进行奇异值分解（SVD）以近似原始数据的精度：

$$RRMSE^{POD} = \frac{||\boldsymbol{X} - \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{\Sigma}\,\boldsymbol{T}^{\top}||}{||\boldsymbol{X}||}, \tag{6}$$

其中，$||\cdot||$ 为 L2 范数。

此外，我们可以定义 $\hat{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{T}^T$，反应流场可表示为:

$$\boldsymbol{X} \simeq \boldsymbol{U}\,\hat{\boldsymbol{T}}, \tag{7}$$

其中，$\hat{\boldsymbol{T}} \in \mathbb{R}^{N\times K}$ 是包含时间模态的矩阵。具体而言，时间模态包含反应流场的内在动力学。因此，时间模态矩阵的每一行对应 N 个时间系数 $c_j(t)$。已知从时间步 1 到 $K$的时间系数后，便可预测（外推）接下来的 $K^*$ 个时间步，从而得到一个维度为 $N\times K^*$ 的新矩阵 $\hat{\boldsymbol{T}}^*$。因此，可以利用 POD 模态重构原始热力学状态，得到新的快照矩阵，如下所示:

$$\hat{\boldsymbol{X}}^* = \boldsymbol{U}\hat{\boldsymbol{T}}^*, \tag{8}$$

其中，$K+1$、$K+2$、$\cdots$、$K^*$ 是反应流预测的快照。这里使用深度学习技术作为时间积分器，使时间模态随时间推进。通常采用 Galerkin投影并求解系数对应的常微分方程来实现，但计算成本较高 [44,45]。这类模型允许在优化过程中引入物理引导信息，使其具备物理感知能力，并能够外推未见过的热力学状态快照。

### *2.3.* 深度学习预测模型

本节介绍用于预测时间系数 $\boldsymbol{T}$ 的两种深度学习模型。预测的思路是选取一组初始的 $q$ 快照，来预测时间为 $t+1$ 的快照；其中每个快照都对应时间矩阵 $\boldsymbol{T}$ 中的一列。具体而言，使用给定的 $q$ 个先前快照 $\boldsymbol{T}_t$，$\boldsymbol{T}_{t-1}$，$\cdots$，$\boldsymbol{T}_{t-q+1}$ 来预测时间系数 $\boldsymbol{T}_{t+1}$。这些新快照即为热力学状态预测，是降阶模型的核心。深度学习架构利用前 $q$ 个时间步的信息来预测接下来的 $p$ 个时间步。

本研究采用两种不同的深度学习模型作为时间积分器，以求解时间系数。首先，将长短期记忆（LSTM） [46]层与全连接（FC）层结合，构建循环模型。循环模型能够学习系统的动力学

，其方法是在隐藏层中引入反馈机制，从而存储先前输入的状态（也称为记忆），以生成序列的下一个输出。具体而言，LSTM网络已成功用于再现湍流的时间动力学 [47], ，本文旨在探索此类模型在预测反应流时间动力学方面的潜力。

另一方面，卷积模型由一维卷积层（Conv1D）和后续的全连接层构成。卷积神经网络具有巨大的潜力，能够利用卷积滤波器发现时间序列中的重复模式，并直接从数据中提取内在特征，而无需先验知识 [48, 49, 50]。

在本研究中，选择这些模型是因为它们具有较强的稳健性，并能够推广到训练中未使用的未来时刻。此外，这两种模型都只需学习相对较少的参数，这有助于避免过拟合。两种模型的架构细节参考了文献 [41] ，并列于表 1 和表 2 中。构建这些模型的代码可见文献 [51]。

| # 层 | 层详情 | # 神经元 | 激活函数 | 维度 |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 输入 | $N$ | | $10 \times N$ |
| 1 | LSTM | 100 | ReLU[1] / ELU[2] | 100 |
| 2 | FC | $6 * 100$ | ReLU[1] / ELU[2] | $6 * 100$ |
| 3 | 重塑 | | | $6 \times 100$ |
| 4 | FC | 80 | ReLU[1] / ELU[2] | $6 \times 80$ |
| 5 | 拆分($p$) | | | 80 |
| 6 | $p$* 全连接层 | $N$ | Sigmoid函数[1] / 双曲正切函数[2] | $N$ |

**表 1：** 循环神经网络的架构。该架构与参考文献 [51] 中的相同。[1] 原始模型中使用的激活函数。 [2] 本研究提出的激活函数，后文将进一步说明。

| # 层 | 层详情 | # 神经元 | 卷积核大小 | 步幅 | 填充 | 激活函数 | 维度 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 输入 | $N$ | | | | | $10 \times N$ |
| 1 | 一维卷积 | 30 | 3 | 1 | No | ReLU[1] / ELU[2] | $8 \times 30$ |
| 2 | 一维卷积 | 60 | 3 | 1 | No | ReLU[1] / ELU[2] | $6 \times 60$ |
| 3 | 展平 | | | | | | 360 |
| 4 | FC | 100 | | | | ReLU[1] / ELU[2] | 100 |
| 5 | FC | 100 | | | | ReLU[1] / ELU[2] | 100 |
| 6 | 拆分($p$) | | | | | | 100 |
| 7 | $p*$ 全连接层 | $N$ | | | | Sigmoid函数[1] / 双曲正切函数[2] | $N$ |

**表 2:** 卷积神经网络的架构详情。[1] 原始模型中使用的激活函数。[2] 本研究提出的激活函数，后文将进一步说明。

为训练机器学习模型，采用每个时刻 $t$ 真实的 $\hat{}\boldsymbol{T}$ 时间模态与预测的 $\hat{}\boldsymbol{T}^*$ 时间模态之间的均方误差（MSE）损失函数，

$$MSE = \frac{1}{N_K}\sum_{t=1}^{N_K}\left(\frac{1}{N}\|\hat{\boldsymbol{T}}_t - \hat{\boldsymbol{T}}_t^*\|^2\right), \tag{9}$$

其中， $N$ 为奇异值的数量， $N_K$ 为训练过程中使用的快照数量。此外，我们提出了一种具备物理约束的均方误差（PA-MSE）损失函数，以约束学习过程，使每个时刻都满足质量平衡，其定义如下:

$$PA{-}MSE = \frac{1}{N_K}\sum_{t=1}^{N_K}\left(\frac{1}{N}\|\hat{\boldsymbol{T}}_t - \hat{\boldsymbol{T}}_t^*\|^2\right) + \frac{1}{N_K}\sum_{t=1}^{N_K}\left(\|\sum_{s=1}^{N_s} Y_s(t) - \sum_{s=1}^{N_s} Y_s^*(t)\|^2\right), \tag{10}$$

其中， $N_s$ 为反应流中的化学物种数量。此外， $Y_s$ 和 $Y_s^*$ 分别为根据真实的 $\hat{}\boldsymbol{T}$ 时间模态和预测的 $\hat{}\boldsymbol{T}^*$ 时间模态重构得到的物种质量分数。值得指出的是，损失函数中的两个分量具有相同的重要性，即PA-MSE 未加权。具体而言，如何找到能使各损失分量达到良好平衡的超参数，仍是机器学习领域的一个研究课题。在训练过程中，这些权重可能充当超参数，未来还应投入更多研究力量来寻找这些超参数。

图 1 总结了整个计算框架的概况。

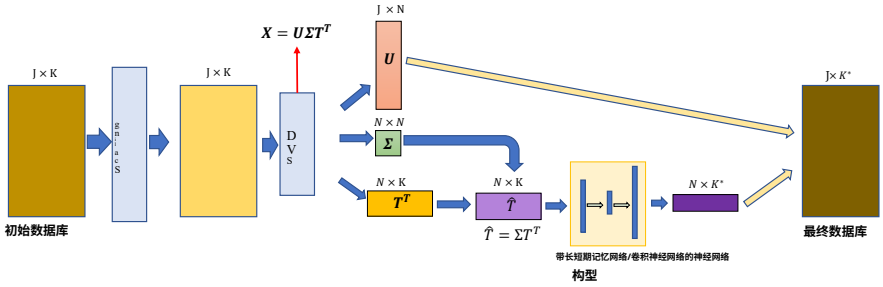



**图1：** 展示所实现算法主要步骤的示意图。初始数据库包含原始数据，最终数据库则通过将 POD 模态与预测的时间系数相乘得到，如公式 8 所示

## 3. 数值模拟

本节简要介绍反应流的数值模拟，以及研究中所用数据库的提取过程。所考虑的数值模拟具有代表性，模拟的是轴对称、时变层流同轴火焰，其中燃料为氮气稀释甲烷（按摩尔计，65% 为甲烷，35% 为氮气），氧化剂为空气。氧化剂以 35 cm/s 的恒定速度喷入，燃料则以带有时间扰动 $t$ 的抛物线分布喷入，如

$$v(r,t) = v_{max}\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)[1 + A\ sin(2\pi f\ t)], \tag{11}$$

其中，$v_{max} = 70$ cm/s 为最大速度，$r$ 为径向坐标，$R$ 为喷嘴的内半径，$A = 0.25$为扰动幅值，$f = 20Hz$ 为扰动频率。数值模拟采用了 `GRI-Mech 3.0` [52] 。其中包含 325 个基元反应，涉及 53 种含 C1-C2烃类的物种。CFD 仿真使用 `LaminarSMOKE` 完成，这是由 Cuoci 等人 [53]开发的基于 `OpenFOAM`的算子分裂求解器。有关数值设置的更多信息，请参阅文献 [13, 14]。

提取了一个数据库，其中包含温度以及最大浓度最高的 9 种化学物种，因此变量总数为 $N_v = 10$。这些化学物种包括：

- 空气组分：$O_2$ 和 $N_2$

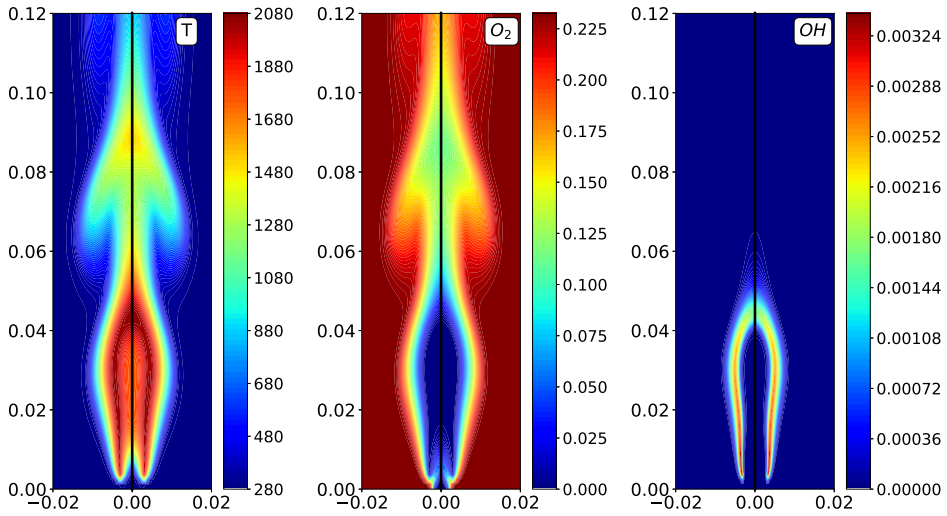



**图 2：** 温度、氧气和 OH 质量分数的瞬时图像（从左至右）。黑线表示轴对称轴。

- 燃料组分： $CH_4$
- 主要氧化产物： $CO_2$ 和 $H_2O$
- 次要物种： $C_2H_2$、 $C_2H_4$、 $CO$ 和 $OH$

提取的快照数量为 $n_t = 999$，在时间上以$\Delta t = 2.5 \times 10^{-4} s$等间距分布。因此，数据集覆盖的时间间隔为 $T = n_t \times \Delta t \simeq 0.25 s$，约为速度分布扰动的 5 个周期。最后，数据库在一个结构化网格上提取，其流向和法向的维度分别为 $100 \times 75$。数据库的张量形式维度为 $N_v \times N_x \times N_y \times n_t = 10 \times 100 \times 75 \times 999$。图 2 展示了数据库中一个具有代表性的快照。

## 4. 结果与讨论

本节评估所提出的深度学习模型预测时间模态的能力。首先，将数据库从四维张量（$N_v \times N_x \times N_y \times n_t$）重塑为二维矩阵（$N_v \cdot N_x \cdot N_y \times n_t$）。对该矩阵进行奇异值分解，并选取前18个奇异值分解模态。这些模态捕获了总能量的80%，并包含仿真中尺度最大的结构，其

重构误差（相对均方根误差）为0.022。各变量的重构误差见表3。

| $T$ | $C_2H_2$ | $C_2H_4$ | $CH_4$ | $CO$ |
|---|---|---|---|---|
| 0.022 | 0.101 | 0.08 | 0.024 | 0.061 |
| $CO_2$ | $H_2O$ | $N_2$ | $O_2$ | $OH$ |
| 0.03 | 0.02 | 0.0007 | 0.009 | 0.0146 |

**表 3：** 所研究各变量的重构误差。

数据库被划分为三个连续的数据块，分别用于深度学习模型的训练、验证和测试。测试集包含最后 20% 的快照。在前 80% 的快照中，训练集和验证集分别包含前 85% 和最后 15% 的快照。因此，时间步总数为 $K_{training} + K_{validation} + K_{test} = n_t$。根据图 1 中的符号说明，$K_{training} + K_{validation} = K$ 和 $K_{test} = K^*$。因此，深度学习模型所用矩阵的维度为 $N \times K = 18 \times 800$，远小于原始矩阵，从而大幅降低了计算成本。

在训练过程中，对所有训练数据进行缩放，如下所示：

$$\hat{\boldsymbol{v}}_j = \frac{\boldsymbol{v}_j}{\sum_{j=1}^{N} \max|\boldsymbol{v}_j|}. \tag{12}$$

该缩放使 $\boldsymbol{T}$ 的取值范围为 -0.15 至 0.15。因此，原始模型输出层的激活函数由 Sigmoid函数（输出值范围为 0 至 1）改为双曲正切函数，将输出限制在范围 $[-1, 1]$ 内。

深度学习模型利用 $q = 10$ 之前的快照信息来预测未来 $p = 6$ 时间步的快照，如参考文献 [54] 所示。采用早停 来获得稳健的模型参数：当均方误差在一定数量的训练轮次（耐心期）内未降低时，训练便会停止。Adam优化器 [55] 采用参数默认值（学习率 $\alpha = 0.001$, $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$ 和 $\epsilon = 10^{-8}$）。采用小批量梯度下降，批量大小设为 12；模型训练 100 个训练轮次，耐心期为 20 个训练轮次。此外，

当观察到某项指标不再改善时，学习率会被设为降低。经过固定数量的训练轮次后，学习率将乘以一个小于 1 的系数来降低。

通过真实的$\hat{}\boldsymbol{T}$与预测的$\hat{}\boldsymbol{T}^*$时间模态之间的距离来衡量算法的准确性。为评估模型的质量，我们考虑各变量预测快照的相对均方根误差（RRMSE），其计算方式如下：

$$RRMSE_j^{NN} = \frac{\|\tilde{\boldsymbol{x}}_j{}^{\text{predicted}} - \tilde{\boldsymbol{x}}_j\|}{\|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|}, \tag{13}$$

其中，$\tilde{\boldsymbol{x}}_j$是第 $j$个变量，$\tilde{\boldsymbol{x}}_j{}^{\text{predicted}}$是其预测值。

在第4.1节中，我们分析了长短期记忆网络和卷积神经网络超参数的选择，以寻找一种稳健的方案；从原始模型 [41] 开始，逐步筛选出所有所分析变量中误差最低的模型。在第4.2节中，我们比较采用最佳超参数的模型，以研究长短期记忆网络和卷积神经网络中哪一种更适合进行时间预测。

### *4.1.* 超参数的影响

首先研究深度学习模型关键超参数的影响。我们通过试错法优化用于反应流问题的模型，搜索能够使重构误差（相对均方根误差，RRMSE）最低的关键超参数。如何设置参数以确保神经网络架构达到最佳性能，目前尚无普遍认知。我们将训练和验证过程分为六种不同情况，结合表 4 中的修改，分析不同超参数的影响。

| | 原始神经网络 | 变化 |
|---|---|---|
| $\hat{\boldsymbol{T}}$ 缩放 | 范围缩放 | *Kaptanoglu* 等人 [56]公式(12) |
| 学习率 $\alpha$ | 0.001 | 0.005（$*0.8$每 10 个训练轮次） |
| 损失函数 | MSE | PA-MSE，公式 (10) |
| 激活函数<br>的隐藏层 | ReLU | ELU |

**表 4：** 神经网络中的变更。所有情况下，输出层的激活函数均由 *Sigmoid*函数 改为 双曲正切函数，并对 $\hat{}\boldsymbol{T}$ 缩放进行了调整。

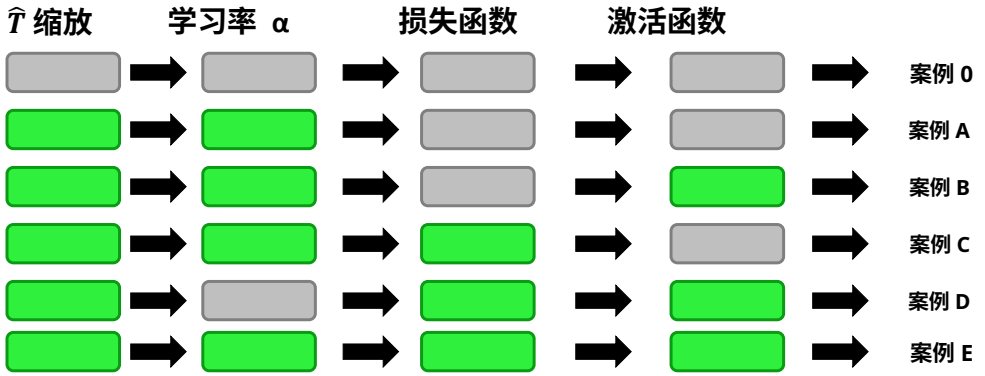



**图 3：** 用于评估超参数影响的各案例示意图。如果与原始模型相比没有变化，则方框标为灰色；若有变化，则标为绿色。具体变化列于表 4。

本研究提出的六种情况总结于图 3 中。在每种情况下，我们都对部分超参数进行了调整，以测试它们对神经网络性能的影响。

使用训练集和验证集对第 2.3 节提出的两种不同深度学习模型进行了训练。长短期记忆网络和卷积神经网络中表现最好的两个案例（案例 B 和 E）的损失函数衰减曲线分别绘于图 4 和图 5 中。其他案例的衰减曲线见附录 A 的图 A.16 和图 A.17。原始案例（案例 0）的损失函数值随训练轮次增加而下降，在长短期记忆网络和卷积神经网络模型中均达到数量级为 $MSE\,10^{-3}$ 的值。案例 A 和 C 似乎并未改善原始案例的性能，其数值仍处于相同的 $MSE$ 数量级。案例 B、D 和 E 的表现似乎最好，因为损失函数随训练轮次增加而下降，在验证集上的值达到 $10^{-4}$ 量级。表 5 所示的验证集相对均方根误差也进一步证实了这一点。

| | 案例 0 | 案例 A | 案例 B | 案例 C | 案例 D | 案例 E |
|---|---|---|---|---|---|---|
| LSTM | 0.111 | 0.1116 | 0.0326 | 0.1021 | 0.0337 | 0.0313 |
| CNN | 0.1062 | 0.094 | 0.0382 | 0.1003 | 0.0352 | 0.0363 |

**表 5：** 所有研究案例的验证集相对均方根误差。

将预测误差（相对均方根误差）与重构误差进行了比较

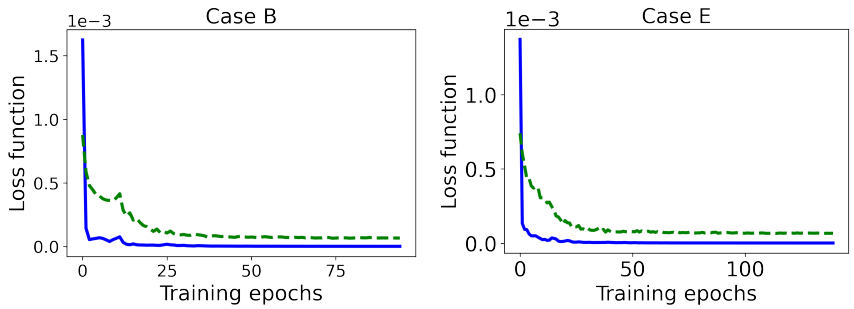



**图 4：** 所分析的两个最佳长短期记忆网络案例中，训练集（蓝色实线）和验证集（绿色虚线）的损失函数值变化。

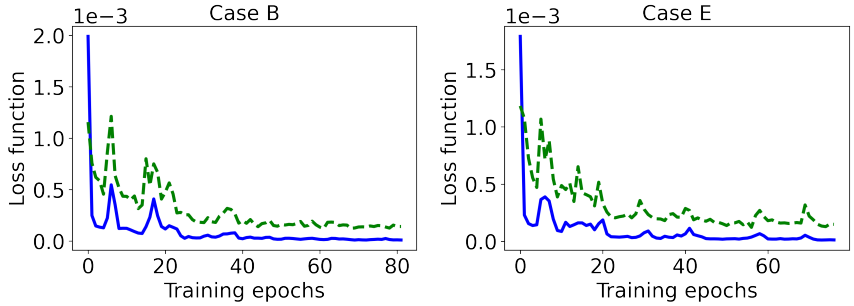



**图 5：** 所分析的两个最佳卷积神经网络案例中，训练集（蓝色实线）和验证集（绿色虚线）的损失函数值变化。

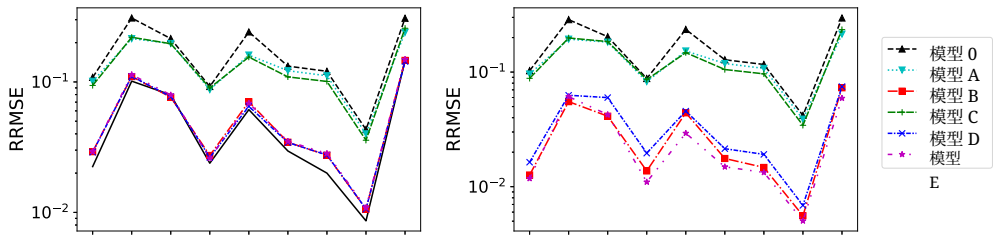



**图6：**采用不同长短期记忆网络案例研究的变量预测误差，与原始结果（左）和奇异值分解重构结果（右）进行对比。左图中的黑线表示采用奇异值分解得到的重构误差。

采用奇异值分解重构不同变量的结果。图6和图7表明，长短期记忆网络模型和卷积神经网络模型得到的结果相似。原始案例对所有变量的预测误差都是最大的。案例 A 和 C 并未显著降低预测误差。这两个案例与原始案例一样，均未改变隐藏层的激活函数。结果表明，这两个案例在训练过程中都出现了过拟合，如图 A.16 和图 A.17 所示。案例 B、D 和 E 改善了原始案例的性能，其所有研究变量的预测误差均接近奇异值分解重构误差。这三个案例都改变了隐藏层的激活函数，说明改变这一参数对于获得最佳预测结果十分重要。比较案例 D 和 E 可见，调整学习率能够提升模型性能。将损失函数从默认的$MSE$改为物理感知损失函数，能够略微提升神经网络的性能。比较案例 B 和 E 的性能即可看出这一点。与案例 B 相比，案例 E 的相对均方根误差略有改善。在外推情景中，必须保证每个时刻的质量平衡，因此引入物理感知损失函数可能至关重要。故尽管重构误差仅略有改善，仍保留该损失函数。

分析了长短期记忆模型中的神经元数量。为此，在表现最佳的模型——模型 E 中，将长短期记忆层的神经元数量从 100 增加到 400。计算了不同变量的预测误差，并与使用奇异值分解得到的重构误差进行了比较。如图8所示，含有 400 个神经元的神经网络

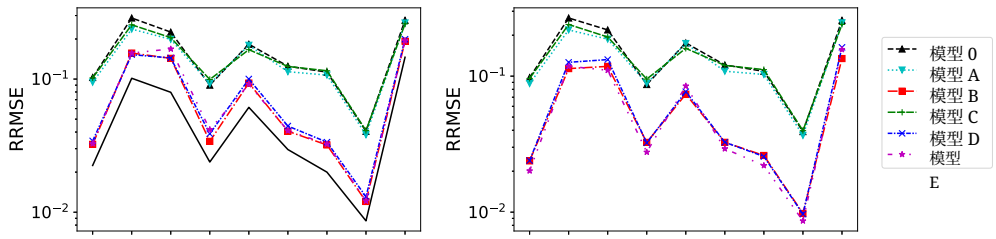



**图7：** 使用不同卷积神经网络案例研究各变量的预测误差，与原始数据（左）和奇异值分解重构结果（右）进行比较。左图中的黑线表示使用奇异值分解得到的重构误差。

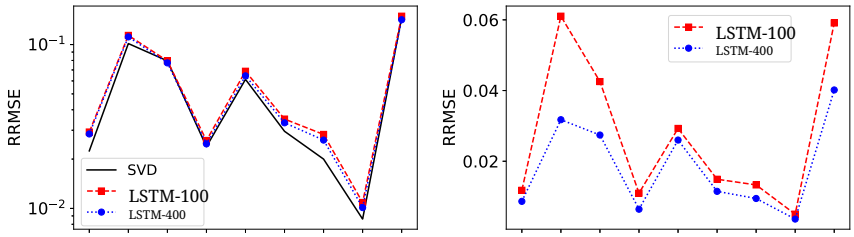



**图8：** 使用神经元数量不同的长短期记忆网络架构研究各变量的预测误差，与原始数据（左）和奇异值分解重构结果（右）进行比较。左图中的黑线表示使用奇异值分解得到的重构误差。

略微降低了预测误差，但架构中的参数数量从 125028 增加到 1673628（$\sim$ 1238%），因此，更高的计算成本并不能弥补预测效果的提升。

### *4.2* 模型比较

选出最佳超参数后，对长短期记忆网络模型和卷积神经网络模型进行了比较。图9绘制了不同变量的预测误差，并将其与通过奇异值分解得到的重构误差进行了比较。显然，长短期记忆网络模型的预测效果最佳，对所有变量的预测都更接近重构误差；而卷积神经网络模型在所分析的所有变量上都表现出更高的误差。这或许部分归因于长短期记忆层中的反馈机制，这使该模型能够更稳健地再现时间动力学。

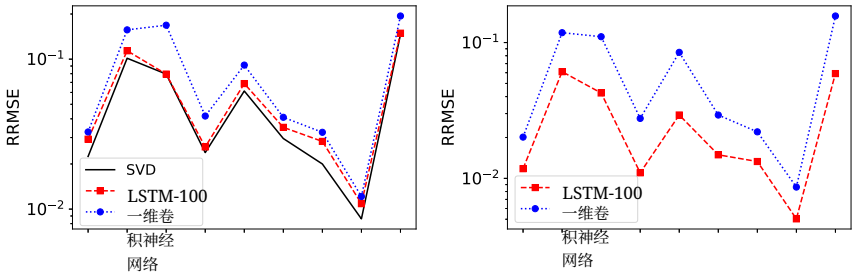



**图9：** 采用不同架构研究的变量的预测误差（**红色虚线：** 长短期记忆神经网络，**蓝色点线：** 卷积神经网络），与原始结果（左）和基于奇异值分解的重构结果（右）进行比较。左图中的黑线表示使用奇异值分解得到的重构误差。

图10和图A.18将时间模态的预测结果与原始模态进行了比较。选取待研究的模态包括第一个模态和随机选取的三个模态。为分析预测结果，绘制了这些模态，并计算了误差，计算方式如下：

$$n-MSE(t)=\frac{\|\hat{\boldsymbol{T}}_{j,t}-\hat{\boldsymbol{T}}^{*}_{j,t}\|}{\max(\hat{\boldsymbol{T}}_{j})-\min(\hat{\boldsymbol{T}}_{j})}, \tag{14}$$

其中，$\hat{\boldsymbol{T}}_{j,t}$是第 $j$个模态在第 $t$个时刻的原始值，$\hat{\boldsymbol{T}}^{*}_{j,t}$是预测值。如图所示，第一个模态（具有周期性行为）的差异可以忽略不计。两种模型都能够正确预测该模态。正如预期，训练期间的误差小于验证集和测试集上的误差。然而，在这两个数据集中，误差保持稳定，低于 0.5%。长短期记忆网络的预测误差低于卷积神经网络。对于第十一模态，误差大于第一个模态。不过，长短期记忆模型能够将其预测误差控制在 1% 以下。其他模态的预测准确度较低，例如模态18（图A.18）。卷积神经网络模型的误差低于 8%，长短期记忆模型的误差低于 4%。

图11、图12和图13展示了一个具有代表性的温度快照，$O_2$ 并从定性角度比较了 $OH$ 质量分数，同时绘制了两个特征点随时间的演变。

如图11所示，两种深度学习模型对温度的预测都令人满意。等值线之间没有显著差异。通过分析两个特征点随时间的演变，可以发现

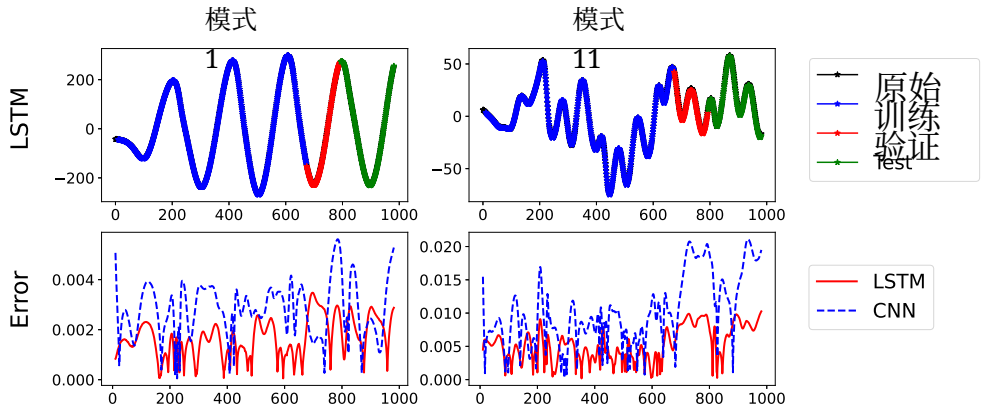



**图10：**上方展示了使用长短期记忆神经网络对时间模态 1 和 11 的预测。**蓝色：**训练集，**红色：**验证集，**绿色：**测试集，**黑色：**原始模态。下方展示了上述模态分别使用长短期记忆网络和卷积神经网络模型进行预测时的预测误差。

远场的差异并不显著。在喷嘴出口附近，可以看到稍大的偏差。奇异值分解算法能够较好地重构原始数据。此外，长短期记忆模型的预测比卷积神经网络模型更准确。从对 $O_2$ 质量分数的分析中也可以得出类似结论（图 12）。

对于 $OH$ 质量分数，差异更加明显，尤其是卷积神经网络模型。尽管化学物种的整体形状得到了较好的保留，但在对称轴附近，$OH$ 剖面被严重低估。时间演化表明，深度学习模型的预测与奇异值分解重构结果较为接近，尤其是使用长短期记忆网络时；但奇异值分解结果与原始数据之间仍存在较大的误差。

### *4.3.* 迁移学习

本节旨在探究此前训练效果最佳的深度学习模型在新条件下预测层流火焰的能力。新的数据库来自第 3 节所述的相同构型，但燃料以更复杂的速度分布喷入，其表达式为

$$v(r,t) = v_{max}\left(1-\frac{r^2}{R^2}\right)[1+(A_1\ sin(2\pi f_1\ t) + A_2\ sin(2\pi f_2\ t) + A_3\ sin(2\pi f_3\ t))\ /3], \tag{15}$$

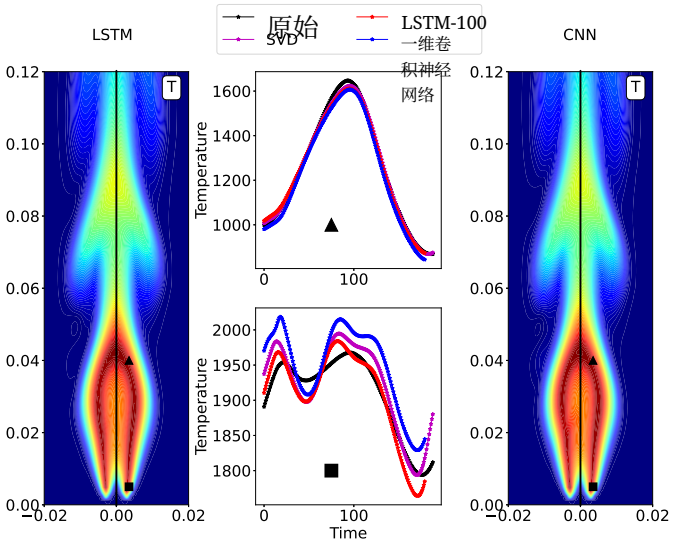



**图11：** 采用长短期记忆网络（左）和卷积神经网络（右）模型对具有代表性的温度快照进行预测所得的等值线。每条等值线的右侧为原始快照，左侧为预测结果。图中间部分：两个特征点处温度预测结果的演变。特征点取自图中等值线上的三角形和正方形所在位置。

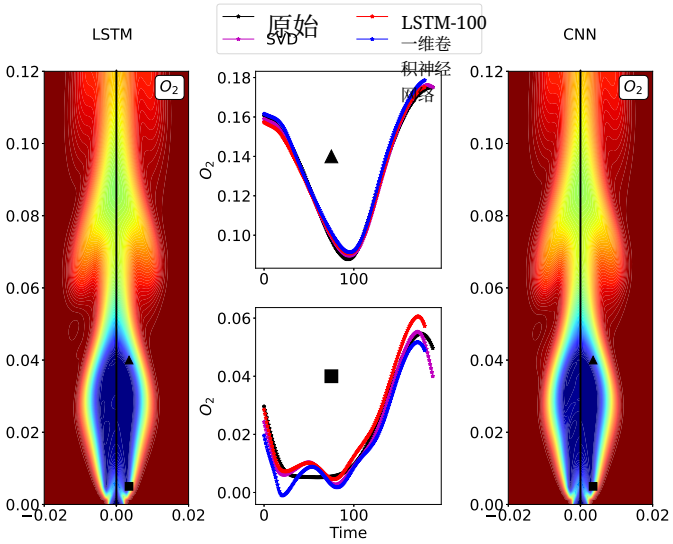



**图12：** $O_2$ 质量分数，内容同图11。

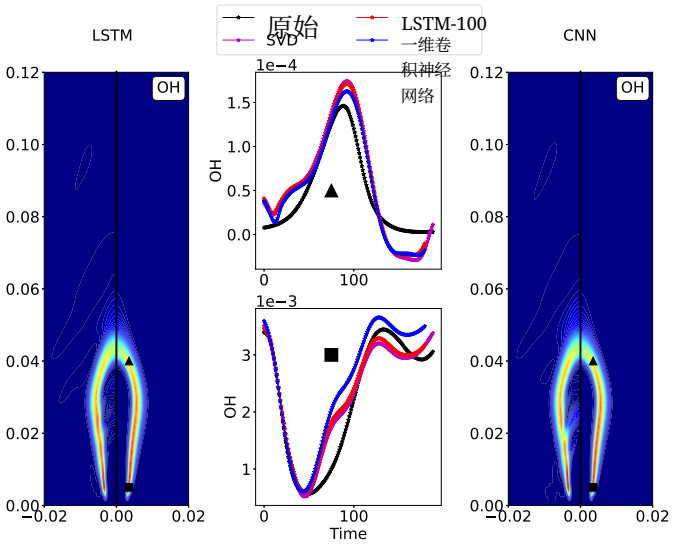



**图13：** 与图11相同，展示了 $OH$ 质量分数。

其中， $v_{max} = 70$ cm/s为最大速度， $r$ 为径向坐标， $R$ 为喷嘴的内半径。方程15表明，现在剖面中存在三个扰动，其频率分别为 $f_1$ =10$Hz$、 $f_2 = 40Hz$ 和 $f_3 = 80Hz$，振幅分别为 $A_1 = 0.9$、 $A_2 = 0.5$ 和$A_3 = 0.75$。有关数值设置和动力学机理的更多信息，请参见文献 [13, 14]。

该案例更为复杂，因为燃料扰动的边界条件随时间 $t$ 变化，是由具有不同振幅和频率的谐函数线性组合而成，而原始案例中仅存在一个频率。通过仿真，每$\Delta t = 2.5 \times 10^{-4}$ 提取一次温度和9种化学物种（$O$、$O_2$、 $OH$、 $H_2O$、 $CH_4$、 $CO$、 $CO_2$、 $C_2H_2$ 和 $N_2$）（共1000个快照），并采用维度为 $300 \times 75$的结构化网格。

首先，应用奇异值分解，并选取前18个模态，这些模态占总能量的81.3%。由于长短期记忆模型的效果最佳，因此采用该模型。由于神经网络已经完成训练，整个数据集均标记为测试集。图 14 展示了第一模态和第十一模态的预测结果，以及根据式（14）计算的预测误差。第一模态的预测误差低于0.64%。第十一模态的预测也准确，最大误差低于3%。

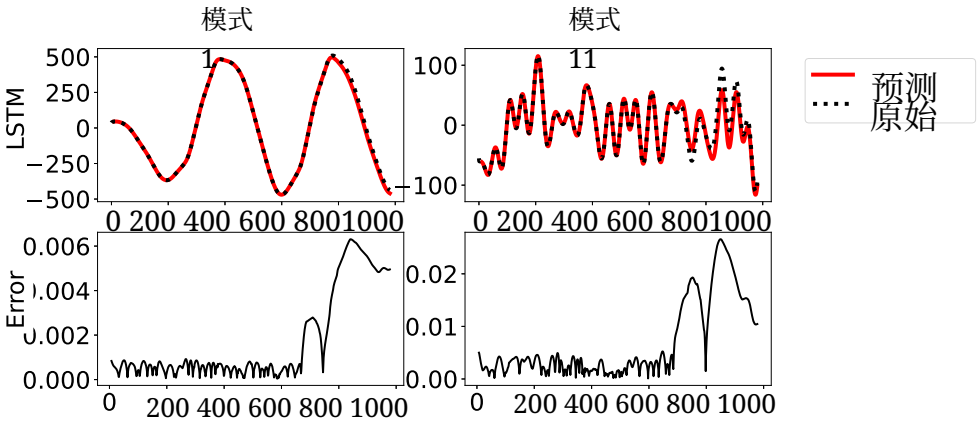



**图 14:** 上方展示了使用长短期记忆神经网络对时间模态1和11的预测。下方绘出了上述模态的预测误差。

图 15 展示了一个具有代表性的温度快照，并绘出了两个特征点随时间的变化。从定性角度来看，对比原始快照和预测快照时，几乎看不出差异。远离喷嘴、动态变化更平缓的点，其随时间的变化得到了高精度预测。奇异值分解重构、原始时间演化与深度学习模型的预测之间没有定性差异。接下来分析喷嘴附近点的预测结果（图15中的方块），可以发现原始时间演化与奇异值分解重构之间存在一些差异。尽管该点的动态变化更为复杂，预测误差仍低于2%。根据这些结果可以得出结论：训练好的神经网络适用于预测更复杂的层流火焰。此外，这些结果表明，此类模型或可用于构建湍流反应流的降阶模型。

## 5. 结论

本文提出了一种用于反应流的新型物理信息感知预测降阶模型。该降阶模型结合 POD 进行降维，并利用神经网络预测时间系数。

该算法包含三个主要步骤。首先，对每个变量进行中心化，并使用标准差进行缩放（自动缩放）。这一步骤

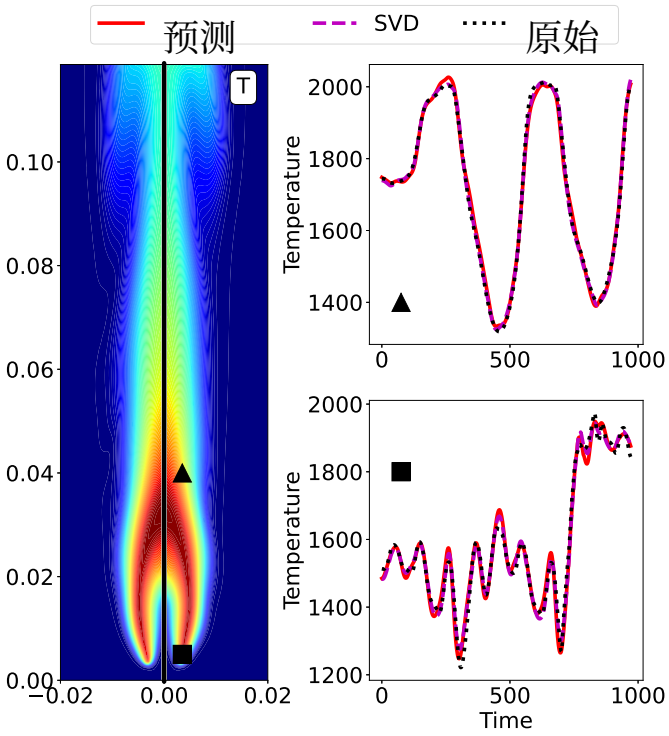



**图 15：左侧：**代表性温度快照预测的等值线。等值线右侧为原始快照，左侧为预测。**右侧：**两个特征点处的温度预测演变。提取的点位于图中等值线上的三角形和正方形标记处。

由于反应流具有多变量特性，因此需要采用这种方法。随后，通过奇异值分解获得 POD 模态。保留最大的尺度以降低维度。最后，将时间系数输入深度学习架构，以预测系数随时间的演变。将这些系数与 POD 模态相乘，即可预测快照。本文分析了基于长短期记忆网络和一维卷积神经网络的不同案例，以研究若干参数的影响。所提出的结果可总结如下：

- 模型已成功应用，而激活函数是改善神经网络预测效果的最重要参数。缩放能够提升神经网络在非周期时间模态上的性能。

- 更改激活函数对重构误差的改善最大，使其接近奇异值分解所得的误差。该重构误差十分重要，因为算法会预测若干选定 POD 模态的时间系数，这些模态包含最大的尺度，但并非所有尺度，因此仍会存在一些差异。

- 对预测误差的分析表明，长短期记忆网络的预测效果优于卷积神经网络，尤其是在次要物种方面。

- 研究发现，长短期记忆模型适用于预测层流火焰在不同边界条件下的演化。神经网络只需训练一次，该模型便能预测入口处具有更复杂速度扰动的层流火焰随时间的演化。这一结果表明，所提出的模型具有良好的迁移学习能力。

我们的研究属于新兴的物理感知机器学习领域。在这一领域中，最终模型以多种不同方式融合了两个主要组成部分：实验数据和/或通常成本高昂的计算模型，以及深度学习数据驱动技术。这种组合使我们能够以相对较低的成本理解反应流的流动物理，也为充分利用 CFD 代码提供了广泛的机遇。

所提出的算法可在未来的研究中与不同的非线性模态分解方法结合使用，并借助自编码器

降低数据的维度。此外，未来还可研究同一火焰在不同输入条件下的情况，使神经网络仅通过一个案例的训练，就能对所有不同条件下的时间进行预测。

**致谢**

A.C. 和 S.L.C. 感谢由 MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 资助的项目 PID2020-114173RB-I00。S.L.C. 和 A.C. 感谢马德里理工大学青年研究人员研究资助计划（Research Grants for Young Investigators）对马德里自治区的支持。A.C. 还感谢马德里理工大学通过“Programa Propio”计划提供的支持。此外，本研究还获得了欧盟“地平线 2020”研究与创新计划的资助，资助依据为玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里资助协议 No 801505。

**参考文献**

[1]R. Catlow, P. Burke, J. Goodfellow, D. Tildesley, M. Wilson, S. Cant, 《计算流体动力学中的高性能计算：进展与挑战》, 《伦敦皇家学会哲学汇刊 A 辑：数学、物理与工程科学》360 (1795) (2002) 1211–1225。arXiv:https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsta.2002.0990, doi:10.1098/rsta.2002.0990。统一资源定位符 https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2002.0990[2] A. Parente, J. Sutherland, B. B. Dally, L. Tognotti, P. Smith, 《通过主成分分析研究温和燃烧工况》, 《燃烧学会会刊》33 (2) (2011年) 3333–3341。[3] A. Bellemans, G. Aversano, A. Coussement, A. Parente, 《使用主成分分析对氮气等离子体模型进行特征提取与降阶建模》, 《计算机与化学工程》115 (2018) 504–514。

[4] A. Coussement, O. Gicquel, A. Parente, 《用于降阶燃烧建模的Mg局部主成分分析方法》, 《燃烧学会会刊》34 (1) (2013年) 1117–1123。doi:https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.05.073。

[5]M. Ihme, W. T. Chung, A. A. Mishra, 《燃烧机器学习：原理、进展与展望》, 《能源与燃烧科学进展》91（2022年）101010。doi:https://doi.org/10.1016/j.pecs.2022.101010。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128522000193

[6] K. Zdybał, G. D'Alessio, G. Aversano, M. R. Malik, A. Coussement, J. C. Sutherland, A. Parente, 《利用数据驱动模型推进反应流仿真》（2022年）。doi:10.48550/ARXIV.2209.02051。统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/2209.02051

[7] S. L. Clainche, E. Ferrer, S. Gibson, E. Cross, A. Parente, R. Vinuesa, 《利用机器学习提升飞机性能：综述》（2022年）。doi:10.48550/ARXIV.2210.11481。统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/2210.11481

[8]L. Zhou、Y. Song、W. Ji、H. Wei, 燃烧中的机器学习, 《能源与人工智能》7（2022年）100128。doi:https://doi.org/10.1016/j.egyai.2021.100128。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666546821000756

[9]I. Jolliffe, 《主成分分析》, 施普林格, 柏林, 海德堡, 2011年, 第1094–1096页。doi:10.1007/978-3-642-04898-2_455。统一资源定位符 https://doi.org/10.1007/978-3-642-04898-2_455

[10] P. J. Schmid, 数值和实验数据的动态模态分解, 《流体力学杂志》656（2010年）5–28。

[11]B. J. Isaac, A. Coussement, O. Gicquel, P. J. Smith, A. Parente, 《化学反应流的降阶 PCA 模型》, Combustion and Flame 161 (11) (2014年) 2785–2800。

[12] A. Bellemans, T. Magin, A. Coussement, A. Parente, 《基于主成分分析的降阶动力学等离子体模型：模型构建与流形敏感性》, Physical Review Fluids 2 (7) (2017) 073201。[13] G. D'Alessio, A. Parente, A. Stagni, A. Cuoci, 《通过预先划分组成空间和机理简化实现自适应化学》, Combustion and Flame 211 (2020) 68–82。[14] G. D' Alessio, A. Cuoci, G. Aversano, M. Bracconi, A. Stagni, A. Parente, 《分区方法对多维自适应化学仿真的影响》, Energies 13 (10) (2020) 2567。[15] G. D'Alessio, A. Attili, A. Cuoci, H. Pitsch, A. Parente, 《通过主成分分析研究湍流反应射流》, 载于：湍流燃烧直接数值模拟的数据分析，施普林格，2020年，第233–251页。[16] G. D'Alessio, A. Cuoci, A. Parente, 《特征提取与人工神经网络：用于自适应化学仿真中高维热化学空间的在线分类》, Data-Centric Engineering 2。[17] W. J. Krzanowski, 《利用主成分选择变量以保留多元数据结构》, Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics) 36 (1) (1987) 22–33。[18] G. D'Alessio, A. Attili, A. Cuoci, H. Pitsch, A. Parente, 《通过局部主成分分析和普罗克鲁斯特斯分析对湍流火焰直接数值模拟进行无监督数据分析》, 载于：工业与环境应用软计算模型国际研讨会，施普林格，2020年，第460–469页。[19] S. Chatterjee, A. Mukhopadhyay, S. Sen, 《利用本征正交分解和动态模态分解研究层流火焰的稳定性》, 载于：非正规与非线性效应在航空和热声学中的 n3l 国际暑期学校与研讨会，2013年，第13页。[20]J. M. Quinlan, B. T. Zinn, 《横向燃烧不稳定性：现代实验技术与分析》, 2014年。

arXiv:https://arc.aiaa.org/doi/pdf/10.2514/6.2014-3682, doi:10.2514/6.2014-3682。统一资源定位符 https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2014-3682[21] C. Huang、W. E. Anderson、M. E. Harvazinski、V. Sankaran，使用分解技术分析自激燃烧不稳定性，《AIAA期刊》54 (9) (2016) 2791–2807。 doi:10.2514/1.J054557.[22] E. Motheau、F. Nicoud、T. Poinsot，燃气轮机中的混合声学-熵燃烧不稳定性，《流体力学杂志》749 (2014) 542– 576。 doi:10.1017/jfm.2014.245。统一资源定位符 https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00990702[23] S. Le Clainche、J. M. Vega，高阶动态模态分解，《SIAM应用动力系统期刊》16 (2) (2017) 882–925。[24] A. Corrochano、D. Xavier、P. Schlatter、R. Vinuesa、S. Le Clainche，低雷诺数和中等雷诺数下平面食品药品监督管理局（FDA）喷嘴中的流动结构，《流体》6 (1) (2021) 4。[25] A. Corrochano、A. F. Neves、B. Khanal、S. L. Clainche、N. J. Lawson，Slingsby Firefly飞机的DES：使用POD和高阶动态模态分解进行非定常流动特征提取，《航空航天工程杂志》35 (5) (2022) 04022063。 doi:10.1061/(ASCE)AS.1943-5525.0001457.[26] E. Mu˜ñoz、S. Le Clainche，关于两个平面合成射流中的拓扑模式与对称性破缺，《流体物理学》34 (2) (2022) 024103。 doi:10.1063/5.0080834.[27]E. Lazpita、A. Mart´ınez-S´anchez、A. Corrochano、S. Hoyas、S. Le Clainche、R. Vinuesa，关于城市流体流动中拱形涡的生成与湮灭机制，《流体物理学》34 (5) (2022) 051702。[28] A. Corrochano、G. D'Alessio、A. Parente、S. L. Clainche，采用高阶动态模态分解对反应流建模 arXiv:Change.[29] S. L. Brunton、B. R. Noack、P. Koumoutsakos，流体力学中的机器学习，《流体力学年度评论》52 (1) (2020) 477–508。 arXiv:https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010719-060214,

doi:10.1146/annurev-fluid-010719-060214。统一资源定位符
https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010719-060214

[30]J. Huang、H. Liu、Q. Wang、W. Cai，通过深度学习实现有限投影体积层析成像，用于时间分辨湍流燃烧诊断，《航空航天科学与技术》106 (2020) 106123。doi:https://doi.org/10.1016/j.ast.2020.106123。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1270963820308051

[31]G. Li、Z. Hu、F. Hou、X. Li、L. Wang、X. Zhang，利用机器学习对烃分子进行高通量筛选，以设计下一代燃料，《Fuel》265（2020）116968。doi:https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116968。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236119323610

[32]P. Wong、L. Tam、K. Li、C. Vong，利用人工智能进行发动机怠速系统建模与控制优化，《机械工程师学会论文集 D 部分：汽车工程杂志》224（1）（2010年）55–72，被引次数：58。doi:10.1243/09544070JAUTO1196。

[33]J. A. Badra、F. Khaled、M. Tang、Y. Pei、J. Kodavasal、P. Pal、O. Owoyele、C. Fuetterer、B. Mattia、F. Aamir，《利用计算流体动力学和机器学习优化发动机燃烧系统：一种方法论》，《能源资源技术杂志》143（2），022306。arXiv:https://asmedigitalcollection.asme.org/energyresources/article-pdf/143/2/022306/6605351/jert_143_2_022306.pdf，doi:10.1115/1.4047978。统一资源定位符 https://doi.org/10.1115/1.4047978

[34] A. Sharma、R. Johnson、D. Kessler、A. Moses，《用于可扩展化学动力学的深度学习》，2020年。 doi:10.2514/6.2020-0181.[35]V. Nikitin、I. Karandashev、M. Y. Malsagov、E. Mikhalchenko，《采用神经网络进行燃烧计算的方法》，《航天学报》194（2022年）376–382。 doi:https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2021.10.034。

统一资源定位符
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0094576521005750[36] Y. Zhang、L. Zhou、H. Meng、H. Teng，《基于人工神经网络和本征正交分解重构气相爆轰的胞状表面》，Combustion and Flame 212（2020年）156–164。doi:https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.10.031。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218019304882[37]J. L. Lumley，《非均匀湍流的结构》，载于：Yaglam, A.M., Tatarsky, V.I.（编），《大气精细尺度结构及其对无线电波传播影响国际研讨会论文集》。Doklady Akademii Nauk SSSR, Nauka，莫斯科。[38] Q. Wang、J. S. Hesthaven、D. Ray，《利用人工神经网络对非定常流动进行非侵入式降阶建模及其在燃烧问题中的应用》，《Journal of Computational Physics》384（2019年）289–307。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.01.031。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999119300828[39]S. Freitag、B. Cao、J. Nini´c、G. Meschke，《基于区间数据的循环神经网络与本征正交分解：机械化隧道掘进过程的实时预测》，《计算机与结构》207（2018年）258–273，cIVIL-COMP 2017。doi:https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2017.03.020。统一资源定位符
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045794917302195[40] A. G¨uemes、S. Discetti、A. Ianiro，《利用壁面特征感知湍流的大尺度运动》，《流体物理学》31（12）（2019年）125112。doi:10.1063/1.5128053.[41] R. Abad´ıa-Heredia、M. L´opez-Mart´ın、B. Carro、J. Arribas、J. P´erez、S. L. Clainche，《一种基于本征正交分解并结合深度学习架构的预测型混合降阶模型》，Expert Systems with Applications 187（2022年）115910。doi:https://doi.org/10.1016/j.eswa.2021.115910。

统一资源定位符
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417421012653[42] A. Parente, J. C. Sutherland，湍流燃烧数据的主成分分析：数据预处理与流形敏感性，《Combustion and Flame》160 (2) (2013年) 340–350。[43] L. Sirovich，湍流与相干结构动力学。第一至第三部分，《Quarterly of Applied Mathematics》45 (3) (1987年) 561–571。[44] M.-L. Rap´un, J. M. Vega，基于局部POD与Galerkin投影的降阶模型，《Journal of Computational Physics》229 (8) (2010年) 3046–3063。 doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.12.029。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109007153[45] S. Le Clainche, F. Varas, J. M. Vega，利用即时POD加速油藏模拟，《International Journal for Numerical Methods in Engineering》110 (1) (2017年) 79–100。 doi:10.1002/nme.5356。[46] Y. Yu, X. Si, C. Hu, J. Zhang，循环神经网络综述：LSTM单元与网络架构，《Neural Computation》31 (7) (2019年) 1235–1270。 doi:10.1162/neco_a_01199。[47] G. Borrelli, L. Guastoni, H. Eivazi, P. Schlatter, R. Vinuesa，通过深度学习预测湍流通道的时间动力学，《International Journal of Heat and Fluid Flow》96 (2022年) 109010。
doi:https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2022.109010。统一资源定位符 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X22000856[48] I. Koprinska, D. Wu, Z. Wang，用于能源时间序列预测的卷积神经网络，载于：2018年国际神经网络联合会议（IJCNN），2018年，第1–8页。 doi:10.1109/IJCNN.2018.8489399。[49] M. Bi´nkowski, G. Marti, P. Donnat，用于异步时间序列的自回归卷积神经网络（2017年）。 doi:10.48550/ARXIV.1703.04122。统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/1703.04122

[50] Y. Lin, I. Koprinska, M. Rana，用于时间序列预测的时间卷积注意力神经网络，载于：2021年国际神经网络联合会议（IJCNN），2021年，第1–8页。doi:10.1109/IJCNN52387.2021.9534351。[51] R. Abad´ıa-Heredia, M. L´opez-Mart´ın, B. Carro, J. Arribas, J. P´erez, S. L. Clainche，论文代码：基于本征正交分解并结合深度学习架构的预测型混合降阶模型（2021年）。统一资源定位符
https://github.com/mlopezm/A-predictive-hybrid-ROM-model
-based-on-proper-

[52] G. P. Smith，Gri-mech 3.0，http://www. me. berkley. edu/gri mech/.[53] A. Cuoci，A. Frassoldati，T. Faravelli，E. Ranzi，基于算子分裂方法的详细化学动力学层流火焰数值建模，《Energy & Fuels》27 (12) (2013年) 7730–7753.[54] M. Lopez-Martin，S. Le Clainche，B. Carro，基于深度3D卷积神经网络的无模型短期流体动力学估计器，《Expert Syst. Appl.》117 (2021) 114924.[55]D. P. Kingma，J. L. Ba，Adam：一种随机优化方法，2015年12月，访问日期：2020年9月21日.[在线]。链接：https://arxiv.org/abs/1412.6980v9.[56] A. Kaptanoglu，K. Morgan，C. Hansen，S. Brunton，磁流体动力学的物理约束低维模型：第一性原理与数据驱动方法，《Physical Review E》104。doi:10.1103/PhysRevE.104.015206。

# 附录 A.

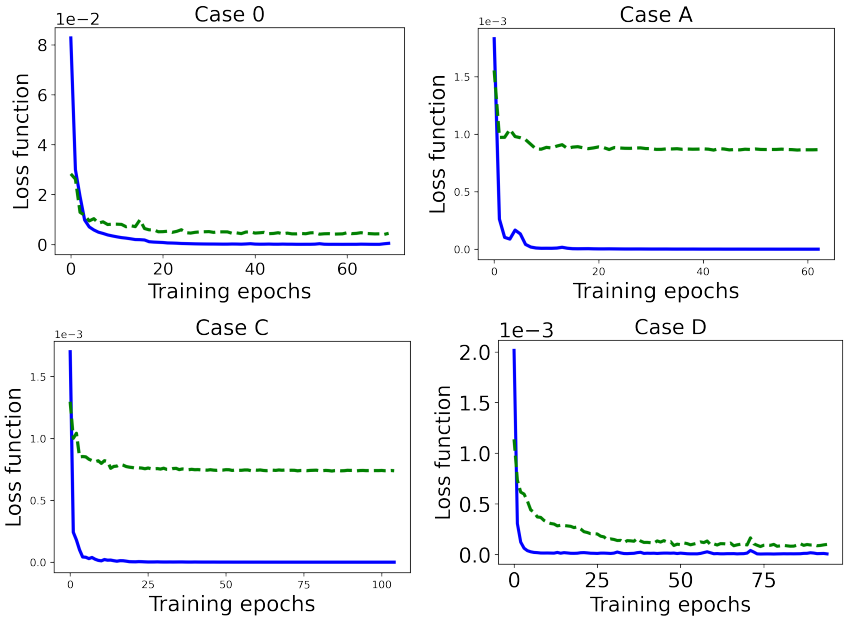



**图 A.16：** 所分析的其余长短期记忆网络案例中训练集（蓝色实线）和验证集（绿色虚线）的损失函数值变化。

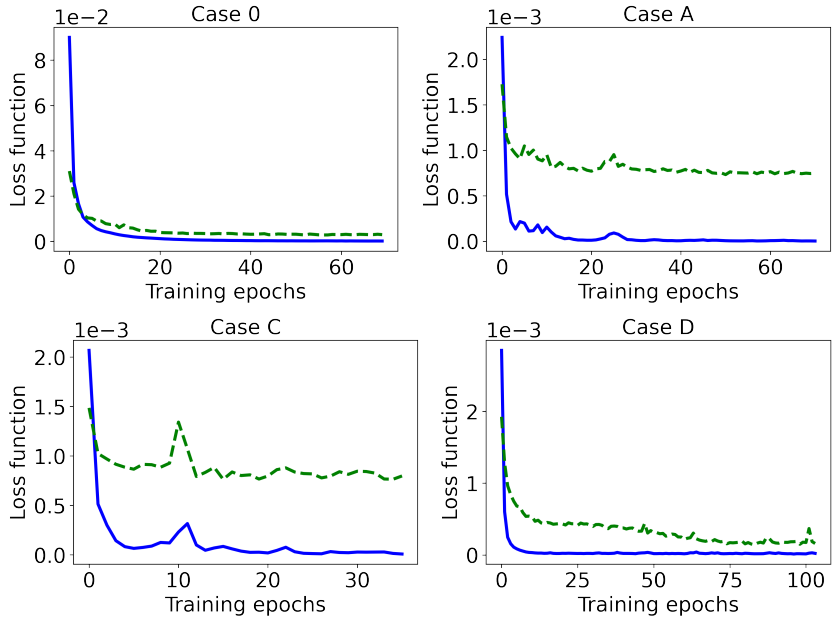
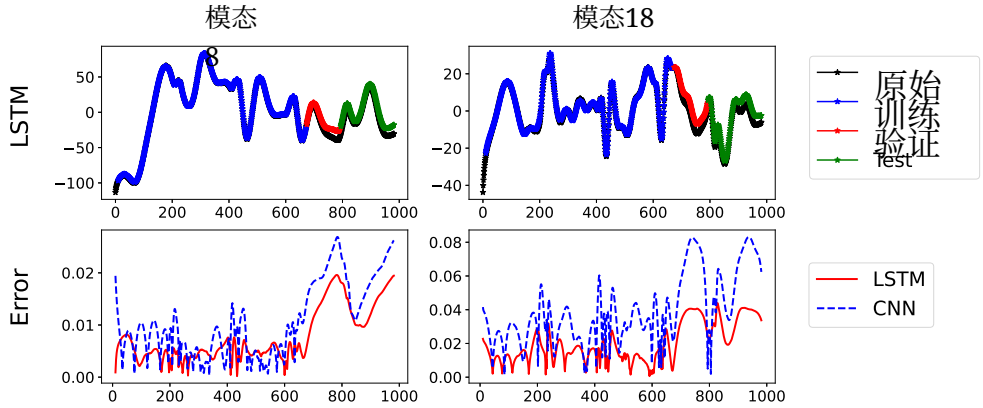



**图 A.17：**其余经分析的卷积神经网络案例中，训练集（蓝色实线）和验证集（绿色虚线）的损失函数值变化。




**图A.18：**上方：使用长短期记忆神经网络预测时间模态 8 和 18。**蓝色：**训练集，**红色：**验证集，**绿色：**测试集，**黑色：**原始模态。下方：长短期记忆网络和卷积神经网络模型对上述模态进行预测时产生的误差。