用于模拟双分散球体随机阵列中力和力矩波动的物理信息神经网络

ZihaoCheng[b]，Anthony Wachs[a,c,*]

[a]加拿大不列颠哥伦比亚省温哥华市不列颠哥伦比亚大学数学系。[b]加拿大不列颠哥伦比亚省温哥华市不列颠哥伦比亚大学机械工程系。[c]加拿大不列颠哥伦比亚省温哥华市不列颠哥伦比亚大学化学与生物工程系。

arXiv:2305.03326v1 [physics.flu-dyn] 5 May 2023

摘要

我们提出了一种物理信息神经网络（PINN）模型，用于预测随机阵列静止双分散球体中的流体动力力和力矩波动。该 PINN 模型基于两个假设构建：（i）成对相互作用假设，即通过有限数量重要邻居的单独贡献的线性叠加，近似作用于目标球体上的总力/力矩；（i）统一函数表示，即根据在双分散颗粒流中采用各种二元相互作用模式获得的概率分布图的观察结果，提出使用单一函数形式描述不同邻居的贡献。在此基础上，我们相应地建立了一种紧凑的 PINN 架构，通过同一个神经网络模块评估重要邻居的单独力/力矩贡献，从而大幅减少未知参数的数量，并最终通过对这些贡献进行加权求和，计算作用于目标球体上的总力/力矩。我们将模型预测结果与八个不同案例的颗粒分辨直接数值模拟（PR-DNS）数据进行比较，这些案例涵盖雷诺数 $1 \leq \mathcal{R}e \leq 100$、固相体积分数 $10\% \leq \phi \leq 40\%$、球体直径比 $1.5 \leq d_l^*/d_s^* \leq 2.5$ 和体积比 $1 \leq V_l^*/V_s^* \leq 4$，结果表明，在力和扭矩预测方面，采用最优 $R^2 \approx 0.9$ 时模型表现优异。我们建立了一个适用于上述输入空间的通用模型，并通过多个额外数据集检验其对未见数据的插值能力。最后，我们提取并展示了 PINN 模型在二元和三元相互作用中的可解释信息，并讨论其扩展到具有更复杂情景的其他颗粒负载流问题以及欧拉–拉格朗日模拟的潜力，可作为经典平均阻力定律的更优替代方案。

关键词：物理信息神经网络；双分散颗粒流；力与力矩波动；成对相互作用假设；统一函数表示

1. 引言

过去三十年来，多相流领域的大量数值研究都致力于研究自然界（河岸侵蚀、火山喷发等）和工业中（流体催化裂化、煤炭燃烧等）常见的含颗粒流。这类分散多相流通常由大量性质各异、悬浮于均匀流体中的颗粒组成。系统尺度通常远大于这些相对微小颗粒的特征长度尺度。随着流体力学计算方法的快速发展，我们现在不仅能够采用欧拉-欧拉（EE）和欧拉-拉格朗日（EL）模拟（在这些模拟中，颗粒尺度上的边界层无法解析，尽管在 EL 模拟中可以逐个追踪颗粒），还能够开展高保真度的颗粒解析直接数值模拟（PR-DNS），以获取作用于每个颗粒的流体动力学力/扭矩，从而提供丰富的微观尺度细节，反映局部微观结构所引起、且不可忽视的力/力矩波动；这些波动无法通过未完全解析的方法获取 [1–4]。

尽管我们已具备多种适用于大规模计算的灵活且稳健的数值方法，并受益于计算能力的迅速提升，但对于如此复杂且非线性的含颗粒流问题，PR-DNS 在计算时间和资源消耗方面仍然代价高昂。因此，为了深入理解含颗粒流中由邻居引起的扰动，并避免对给定流动构型反复进行本质相同的模拟，研究者特别致力于开发微观/介观模型，以描述力/力矩的波动。早期的一些研究尝试在经典平均阻力闭合的基础上进行修正，以不同因素纳入局部微观结构非均匀性的影响，例如固相浓度波动的标准差[5], 局部漂移速度 [6], 固相浓度梯度 [7]及其与流动方向的夹角 [8]。近年来，一种所谓的随机方法受到广泛关注；研究者基于 PR-DNS 结果的统计分析提出了多种阻力分布模型，各模型均声称，与自由演化的液-固和气-固悬浮体系中获得的模拟数据相比，其结果具有令人满意的一致性 [9–13]。从一个不同的角度出发，Akiki 等人提出了成对相互作用扩展点粒子（PIEP）模型，将目标粒子/参考粒子周围的微观尺度流动分解为

*通讯作者。电子邮箱：wachs@math.ubc.ca（Anthony Wachs）

由其邻居引起的扰动流，并可分别评估每个邻居造成的影响，再通过线性叠加得到作用于目标粒子的总力。Seyed-Ahmadi 和 Wachs[14], 近期的研究提出了类似思路，建立了一种微观结构信息驱动的概率型点粒子（MPP）模型，基于条件概率分布预测力/力矩的波动。

无论用于描述含颗粒流中力/力矩波动的不同微观/介观尺度模型属于何种类别，它们都源自 PR-DNS 数据，和/或与 PR-DNS 数据进行比较。得益于整个计算流体力学界的共同贡献，我们一直在积累一个不断扩大的数据库，其中包含通过对多种含颗粒流动构型开展 PR-DNS 获得的数据。考虑到在我们所关注的问题中对大数据处理日益增长的需求，以及数据科学前所未有的发展，我们自然地开始寻求机器学习（ML）技术的帮助，以应对精确力/力矩点颗粒模型这一迄今尚未解决的问题。机器学习概念在流体力学中的应用甚至可以追溯到 20 世纪 40 年代初的湍流研究[15]。对于希望全面了解流动力学中机器学习相关工作的各个分支的读者，我们推荐阅读 Burton 等人 [16] 的综述论文及其中引用的文献。在众多应用中，由 Raissi 等人 [17–20] 率先提出的物理信息学习，尤其是物理信息神经网络（PINN）家族，已经在科学计算界引发了热烈讨论。依赖纯数据驱动拟合过程的传统机器学习方法，可能无法理解或利用海量数据背后具有可解释性的信息和物理模式，从而导致不一致的预测，甚至表现不佳。相反，物理信息学习机器将支配观测数据的基本物理规律纳入考虑，例如对称性、不变性和守恒原理，因此即使面对复杂物理系统中的稀疏且含噪数据，也能够实现稳健的泛化性能。因此，越来越多的应用受到启发，将现有知识和约束纳入针对不同现实问题的相应学习机器中 [21–24]。除 Raissi 等人提出的原始 PINN 模型外，该模型成功再现了流体绕固定圆柱体流动的流体动力学，以及运动圆柱体情况下的涡激振动 [19, 20], ，人们还开发了大量 PINN 变体，以提高求解纳维–斯托克斯方程时的总体准确性和效率，例如采用区域分解技术的 cPINN [25], 、基于子区域 Petrov–Galerkin 方法的 hp-VPINN

方法 [26], 、结合自动微分（AD）和数值微分（ND）方法的 can-PINN [27] 以及 NSFnets [28]。感兴趣的读者可参阅 [29]，其中列出了用于构建各种流动构型模型的多种物理信息神经网络架构，但并不完整。

回到我们关于含颗粒流的问题，研究的目标并不是寻找传统计算流体力学方法的替代方案，以求解涉及各种偏微分方程的正问题和逆问题，而是利用一种基于物理信息的数据驱动方法，通过大量模拟结果，寻找流体动力学力/扭矩与不同独立变量之间的统计关系，并有望将这种关系以先进模型的形式应用于EL模拟中，同时获得令人满意的精度和效率。在过去五年中，这一直是一个活跃的研究课题，文献中已有多种相关研究，例如，在可压缩流和不可压缩流中对二维 [30] 和三维非球形颗粒 [31] 的阻力进行预测，以及对粗糙表面[32] 和黏弹性流体中的平移颗粒 [33]进行研究。利用机器学习（ML）的优势来研究多颗粒系统也已成为多个研究方向的重点。He 和 Tafti [34]考虑了最多15个最近邻的相对位置，以及雷诺数 $\mathcal{R}e$ 和固相体积分数 ϕ，这些变量是经典平均阻力定律中仅有的独立变量，以提高稠密流体-颗粒流中的阻力预测精度。Muralidhar 等人 [35, 36]提出了一种 PhyDNN 模型，该模型在同样考虑 15 个最近邻作为输入的基础上，通过学习若干物理中间变量，展现出了更好的性能。Moore 等人 [37] 将物理 PIEP 模型扩展为混合版本，将其与数据驱动方法相结合，以提高较高 ϕ条件下的模型性能。Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38] 提出了一种新的物理信息神经网络架构，其中，基于统一函数表示，所有重要邻居共享同一个神经网络模块（由全连接层构成），从而大幅减少了模型参数的数量，并使模型能够在不改变物理信息神经网络框架的情况下考虑更多邻居。Siddani 和 Balachandar [39]提出了一种等变神经网络，并基于两个来源的数据集，在一定范围的 $0.25 \leq \mathcal{R}e \leq 250$和 $0 \leq \phi \leq 0.4$条件下训练了他们的通用模型。此外，目前还存在少数用于预测稠密含颗粒流中非球形颗粒所受作用力的物理信息神经网络模型，例如，二维 [40] 和三维 [41]椭球颗粒的相关模型。

尽管我们正迈入物理信息机器学习的新时代，其在流体力学领域的应用数量不断增加，其中也包括我们特别感兴趣的颗粒负载流问题，但值得注意的是，绝大多数此类研究都仅关注由单分散颗粒构成的流动构型。

颗粒，即尺寸相同的颗粒。据我们所知，只有 Hwang 等人[42] 提出了一种基于深度学习的方法，用于模拟多分散颗粒悬浮流中的阻力，但该研究仅考虑了 $\phi = 0.5\%$的稀释系统。多分散颗粒悬浮流并不少见，实际上在现实世界中十分普遍，其丰富的流体动力学特性也使其具有极高的研究价值。机器学习技术在致密多分散系统中的拓展之所以存在空白，可能归因于数据匮乏，因为对此类复杂流动进行 PR-DNS 需要更多计算资源，才能充分解析尺寸最小的颗粒。事实上，如果不能全面理解每一类颗粒（每一类中的颗粒尺寸均相同）的力/力矩分布，就不可能向学习机器提供有价值的知识，也无法据此优化架构。作为一项初步研究，我们针对流经静止双分散和多分散球体随机阵列的流动开展了一系列 PR-DNS，以研究这些流动构型中由微观结构诱导的力/力矩波动 [43]。模拟结果表明，作用于每一类颗粒上的流体动力和力矩的各个分量均服从高斯分布。通过比较相应的概率分布图，我们还证实，双分散颗粒负载流中的不同二元相互作用模式具有相同的定性特征，这最终决定了我们的物理信息神经网络模型的框架。因此，我们选择流经静止双分散球体的流动作为这项概念验证研究的起点。在本研究中，我们建立了一种物理信息神经网络模型，其设计与 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38] 提出的模型类似，即所有重要邻居共用一个神经网络模块，并通过逐元素乘法运算考虑局部流动和颗粒微观结构的影响。根据成对相互作用假设和统一函数表示，分别评估每个邻居的独立贡献，但使用同一个神经网络模块进行处理，随后通过线性叠加获得作用于目标球体的总力/力矩。除了在双分散颗粒负载流中预测力/力矩波动方面表现出极高的准确性和泛化性能外，我们还看到了将这种紧凑而稳健的物理信息神经网络模型拓展至更复杂的多分散球体系统，并在后续将其应用于 EL 模拟的潜力。

本文其余部分安排如下。第 2 节介绍所选 PR-DNS 案例的流动构型和关键参数，随后说明数据集准备流程。第 3 节首先基于先前研究提供的物理基础和我们的初步数值

结果介绍模型构建，随后转向本研究采用的物理信息神经网络架构及相应的超参数调优过程。第 4 节展示模型两种变体在力/力矩预测方面的性能：前一种变体针对每组 ($\mathcal{R}e$, ϕ, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*) 值分别对应一个物理信息神经网络模型，后一种变体则是利用所有可用数据集训练的通用模型。我们评估通用模型的插值能力，并从二元和三元相互作用的角度探讨物理信息神经网络模型的可解释性。最后，我们在第 5 节展望未来研究。

2. 数据集构建

2.1. 数值方法与部分解析直接数值模拟案例

为后续神经网络训练提供足够庞大且可靠的数据库，我们采用浸入边界格子玻尔兹曼（IB-LB）方法，对流经静止双分散球体随机阵列的流动进行了一系列 PR-DNS。该方法已在我们先前的工作中进行了全面介绍 [44] （有兴趣的读者可参阅该文了解详情）。我们在开源平台$Basilisk$ [45] 上实现了求解器，以便在自适应八叉树网格上进行 MPI 并行计算，从而支持当前的大规模模拟；模拟最多使用 384 个处理器，并具有令人满意的可扩展性。除计算效率高之外，我们先前的数值结果还表明，对于流经中等至强双分散球体阵列以及强多分散球体阵列的流动，模拟精度也令人满意。基于同一框架，我们进一步扩展了这些双分散阵列模拟，流动系统可描述如下。

我们考虑在边长为 L^*的三周期立方体盒中，绕由两组不同直径 d^* 的球体构成的静止球体组装体的压力驱动流，其平均速度为 $\boldsymbol{u_0^*}$ （上标{superscript $\dagger^*$ 描述有量纲量}）。系统的固相体积分数 ϕ可相应表示为:

$$\phi = \frac{V_s^* + V_l^*}{(L^*)^3} = \frac{\pi \left[N_s \left(d_s^*\right)^3 + N_l \left(d_l^*\right)^3 \right]}{6 \left(L^*\right)^3} \tag{1}$$

其中，下标 $\dagger_s$ 和 $\dagger_l$ 分别表示小球和大球， V^* 和 N 分别表示各组球体的总体积和球体数量。这里，我们引入双分散球体最常用的特征长度，即萨特平均值。

$\mathcal{R}e$	ϕ	d_l^*/d_s^*	N_l	N_s	V_l^*/V_s^*	NOR
1	15%	2	192	768	2	20
10	15%	2	192	768	2	20
100	15%	2	192	768	2	20
1	30%	2	384	1536	2	10
10	30%	2	384	1536	2	10
100	30%	2	384	1536	2	10
10	20%	1.5	453	1528	1	10
10	40%	2.5	313	1222	4	13

表1：本研究中用于生成数据集的部分解析直接数值模拟案例参数。实现次数：实现次数。

直径：

$$\langle d^* \rangle = \frac{N_s \left(d_s^*\right)^3 + N_l \left(d_l^*\right)^3}{N_s \left(d_s^*\right)^2 + N_l \left(d_l^*\right)^2} \tag{2}$$

这使我们将颗粒雷诺数 $\mathcal{R}e$ 定义如下：

$$\mathcal{R}e = \frac{(1-\phi)\left|\boldsymbol{u_0^*}\right| \langle d^* \rangle}{\nu^*} = \frac{\left|\boldsymbol{U^*}\right| \langle d^* \rangle}{\nu^*} \tag{3}$$

其中， ν^* 为流体运动黏度， $\boldsymbol{U^*} = (1-\phi)\ \boldsymbol{u_0^*}$ 为表观速度。在本研究中，我们始终沿 x 方向施加流动，并在经过足够长的模拟时间后记录稳态数据。

表1列出了本研究选取的八个部分解析直接数值模拟案例，涵盖了 $1 \leq \mathcal{R}e \leq 100$、$15\% \leq \phi \leq 40\%$、双分散球体的直径比和体积比分别为 $1.5 \leq d_l^*/d_s^* \leq 2.5$和 $1 \leq V_l^*/V_s^* \leq 4$。我们对每个案例均采用 $L^* = 20 d_s^*$ 进行设计，并在流动域中布置 O 个（10^3）球体。我们进行了 $10 \sim 20$ 次实现，以便为每个案例生成约20000个数据点（其中约4000个与大球相关）。

2.2. 数据后处理

我们按以下方式整理每个模拟案例的数据集：我们找出每个球体的P（本文中为 $P = 100$ ）个最近邻，并按照它们与目标球体之间的中心间距离进行排序。在搜索过程中，我们考虑了三周期边界条件。每个邻居包含四个量：其直径以及中心间距离的三个分量。在记录邻居信息后，我们为每个目标球体 i附加六个感兴趣的关键参数：总流体-颗粒相互作用力 $\boldsymbol{F}_i^*$和力矩 $\boldsymbol{T}_i^*$的三个分量。此外，我们还纳入目标

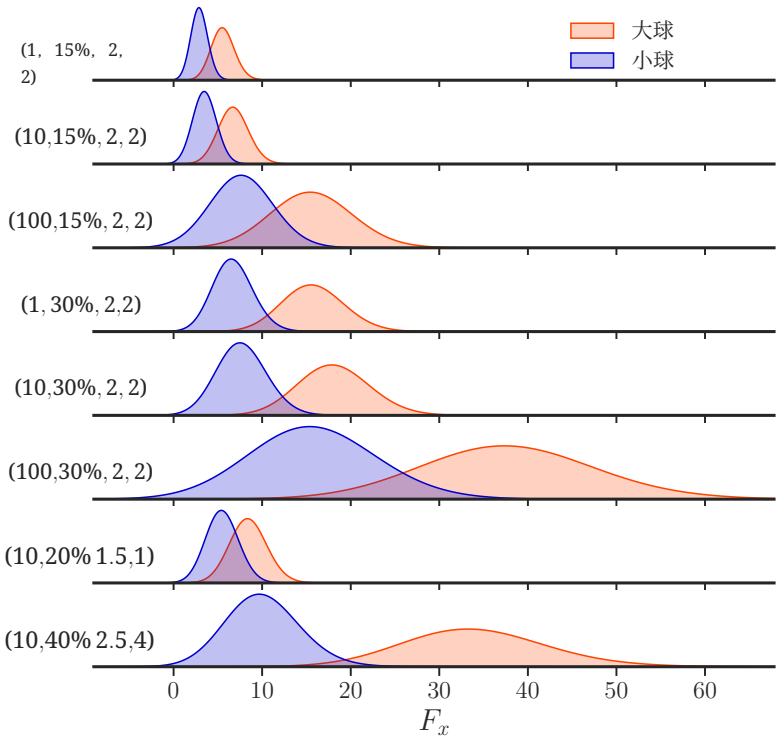
球体直径 d_i^*、局部体积平均流体速度 $\boldsymbol{u}_i^*$ 和局部固相体积分数 ϕ_i 作为附加信息，以按照 [38, 39]中的建议描述每个目标球体对应的局部微观结构。在本文中，我们将以每个目标球体为中心、边长为 $5d_s^*$ 的立方体区域视为"局部"，对于小球体和大球体，边长分别为 $6d_s^*$，且 $\phi \leq 20\%$时为 $4d_s^*$，其他情况下为 $5d_s^*$。

现在，我们收集所有球体的数据，并对有量纲量采用以下缩放因子：

- 长度尺度： d_s^*
- 速度尺度： $|\boldsymbol{U}^*|$
- 力尺度：$3\pi\mu^* d_i^* |\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{i}}^*|$,—与斯托克斯阻力类似，其中 μ^* 为流体动力黏度。
- 扭矩尺度： $\mu^* (d_i^*)^2 |\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{i}}^*|$

经过上述无量纲化处理后，我们构建了八个数据集，分别对应八个模拟案例。为了对它们进行特征区分，我们采用以下方式对每个数据集进行标记（$\mathcal{R}e$， ϕ， d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*）（下文均采用此标记方式）。请注意，由于 $d_s = d_s^*/d_s^* = 1$，我们也可以使用 $d_l^*/d_s^* = d_l$ 以简化表示，但我们更倾向于采用前一种记法，以强调每个数据集标签中的第三个参数确实表示直径比。

图1比较了各个计算案例中作用于双分散球体的流向力 F_x 的分布。请注意， F_x 是唯一具有非零平均值的力分量，而 F_y、 F_z 以及所有扭矩分量的平均值均为零。提醒读者注意，在图1的每个案例中，我们对 y 轴采用了不同的缩放方式。尽管阴影区域在视觉上并不具有相同的大小，但正如预期的那样，它们的面积均为1。从图中，我们试图传达两点信息：(i) 在双分散颗粒负载流问题（以及多分散案例）中，力和扭矩分布存在一定的规律性，即作用于各颗粒类别的流体动力和扭矩均服从高斯分布，这为成功训练神经网络奠定了基础；(ii) 各数据组的分布呈现出不同的均值、标准差及其他统计特征，并且每个案例中两组数据的重叠程度也各不相同。与单分散颗粒流相比，这些特征共同增加了我们所研究问题的复杂性，尤其是在旨在建立一个无需区分小球和大球的通用模型时。



Fig图 1：采用 PR-DN 获得的各案例中大球和小球的 F_x 分布对比 S.

3. 神经网络架构与训练流程

3.1. 模型构建

随机阵列中静止球体的力和力矩分布取决于围绕每个球体的独特局部微观结构以及宏观流体属性，因此很难识别和预测。成对相互作用假设将作用于目标球体上的总力/力矩分解为仅来自少数重要邻居的单独贡献，从而显著简化了致密颗粒负载流中力和力矩波动的分析，并为开发多种确定性模型铺平了道路，例如 PIEP [37, 46–48], MPP [14], 物理信息神经网络[38] 和等变神经网络模型 [39], ，这些模型在涵盖从低到中等 $\mathcal{R}e$范围的单分散颗粒流问题中均展现出良好的预测性能。在本研究中，我们同样基于成对相互作用假设构建模型，并仅将二元相互作用作为起点。

受 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [14, 38], 的启发，作用于 $\boldsymbol{F}_i$ 目标球体上的力 $\boldsymbol{T}_i$ 和力矩 n

目标球体 i 可近似表示为:

$$\boldsymbol{F}_i \approx \sum_{j=1}^{M} \Delta \boldsymbol{F}_{j\to i} \approx \sum_{j=1}^{M} \alpha_j f_{j\to i}\left(\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}, \{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i, \phi_i, d_i\}\right) \tag{4a}$$

$$\boldsymbol{T}_i \approx \sum_{j=1}^{M} \Delta \boldsymbol{T}_{j\to i} \approx \sum_{j=1}^{M} \beta_j g_{j\to i}\left(\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}, \{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i, \phi_i, d_i\}\right) \tag{4b}$$

其中， $\Delta \boldsymbol{F}_{j\to i}$ 和 $\Delta \boldsymbol{T}_{j\to i}$ 分别是由第 j个邻居诱导的二元相互作用力和力矩，该邻居的直径为 d_j ，与目标球体 i的距离为 $\boldsymbol{r}_j$ 。 M 表示本文考虑的重要邻居数量。$\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i = d_i\boldsymbol{u}_i/\nu$ 表示目标球体 i周围介观流动的局部 $\mathcal{R}e$ 。需要注意的是， $\Delta \boldsymbol{F}_{j\to i}$ 和 $\Delta \boldsymbol{T}_{j\to i}$ 通常被解释为邻近粒子的扰动影响，因此，对于具有非零平均值的流向力 F_x ，还应添加一个由介观流动引起的额外项，即 $\boldsymbol{F}_i \approx \langle \boldsymbol{F} \rangle (\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i, \phi_i, d_i) + \sum_{j=1}^{M} \Delta \boldsymbol{F}_{j\to i}$。不过，我们在方程 4a 中去除了介观贡献项，并对力和力矩的所有分量采用统一形式。就此而言， $\Delta \boldsymbol{F}_{j\to i}$ 和 $\Delta \boldsymbol{T}_{j\to i}$ 可以解释为第 j个邻居通过“局部”微观结构以及介观流动产生的贡献；介观流动以平均意义纳入了该局部体积内其他球体的集体效应。回到方程 4，这意味着我们将单体项 $\langle \boldsymbol{F} \rangle$ 均匀分配给每个二元相互作用项 $\Delta \boldsymbol{F}_{j\to i}$。

我们先前的模拟结果 [43] 为进一步简化这一公式提供了另一条思路：不同二元相互作用模式（小球与小球、小球与大球、大球与小球以及大球与大球）对应的概率分布图，在导致目标球体所受力/力矩满足特定条件的邻近球体临界区域方面，呈现出相同的定性特征。因此，我们可以按照 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38] 的建议，使用统一函数表示不同邻居的贡献，并据此用紧凑的共享块神经网络取代庞大的全连接神经网络（我们将在下一小节介绍这一神经网络架构）。本文中用于二元力和力矩的统一函数 $f_{j\to i}$ 和$g_{j\to i}$，比 [38] 中的函数稍复杂，因为它们不仅取决于邻居属性 $\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}$，还取决于介观流动和局部微观结构属性 $\{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i,\ \phi_i,\ d_i\}$。这也体现在我们的神经网络架构设计中。最后，根据邻居的排序，通过加权和 α_j 和 β_j 计算目标球体所受的总力和总力矩。

我们想指出，在去除.....时，我们排除了局部体积比 $V_{i,l}^*/V_{i,s}^*$

描述局部微观结构，虽然纳入它似乎是自然而然的。事实上，尽管全局体积比 V_l^*/V_s^* 对作用于双分散球体的力和力矩有不可忽视的影响，但大多数平均阻力闭合模型都出乎意料地忽略了它。为了证明我们在输入空间中选择局部量的合理性，我们比较了分别使用和不使用 V_i^*、$_l/V_i^*$、$_s$ 作为输入参数训练的模型所给出的预测，结果表明，考虑 V_i^*、$_l/V_i^*$、$_s$ 时，模型性能始终会小幅下降，最多为 2%。我们认为这种轻微的模型性能下降无关紧要，尽管这在一定程度上出乎意料。一种可能的解释是，V_i^*、$_l$ 和 V_i^*、$_s$ 的值可以通过邻居的 ϕ_i 和 $\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}$ 计算得到，因此 V_i^*、$_l/V_i^*$、$_s$ 引入了重复信息，最终导致预测的准确性略有下降。也有可能是，在当前较低的数据密度下，我们已充分发挥了物理信息神经网络模型的潜力；如果能获取数量多得多的数据点，我们可以合理地预期，将 V_i^*、$_l/V_i^*$、$_s$ 作为输入会提升模型性能。因此，在本研究中，我们仅考虑 $\{\mathrm{Re}_i, \phi_i, d_i\}$，而不采用 $\left\{\mathrm{Re}_i, \phi_i, d_i, V_i^*, {}_l/V_i^*, {}_s\right\}$，以表征目标球体 i 周围的中尺度流动和局部微观结构。

最后，我们考虑[37, 38]中介绍的相同两两相互作用流动对称性。相关内容请参阅这些文献，图1中的图示可供参考 [38]。

3.2. 神经网络架构

图2展示了本研究构建的神经网络架构。从图2中可以看出，该网络包含三个主要模块：一个输入层、两个全连接层块和一个输出层。每个模块都由若干神经元组成；神经元是神经网络中的基本单元，通过所谓的激活函数处理输入信号，并帮助神经网络经过多层变换后学习非线性关系。受 Siddani 和 Balachandar [39], 的启发，我们引入了逐元素乘法这一中间步骤，以纳入局部流动的影响；同时，我们采用 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38]所使用的相同投影步骤，处理力和力矩的横向分量。

现在我们详细说明各个模块和中间步骤：对于输入层，我们需要目标球体及其 M 重要邻居的属性，即如上所述的 $\{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i, \phi_i, d_i\}$以及 $\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}$ 。随后，将每个输入参数子集分别输入一个独立的全连接层模块（也称为隐藏层），各模块的宽度相同，即每层的神经元数量相同。请注意，按照统一函数表示假设，在此阶段，不同邻居的信息

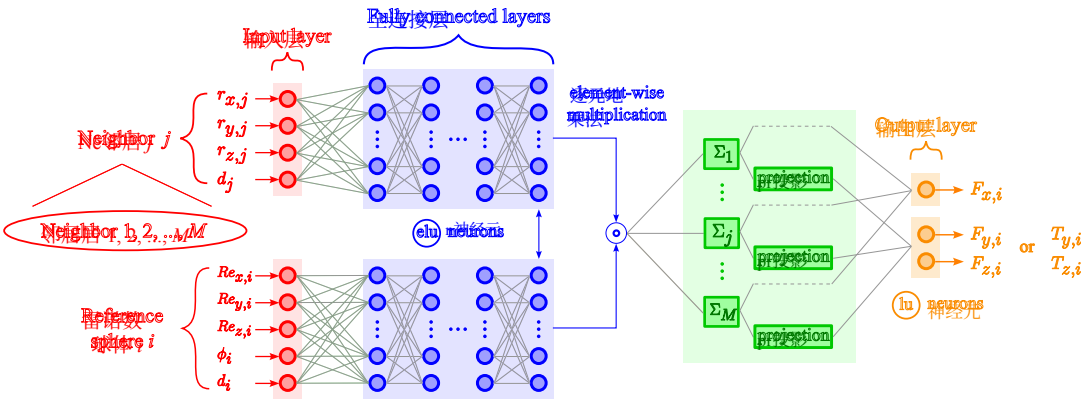


图 2：本研究所用的物理信息神经网络架构。

都通过同一个模块处理，从而显著减少全连接层的宽度（并可能减少其长度，即层数），进而减少未知参数。这里我们采用指数线性单元（elu） [49] 作为全连接层的激活函数，这有助于神经网络快速、精确地学习，并避免反向传播过程中的梯度消失问题。接下来，两个独立模块生成的输出经过逐元素乘法步骤，以结合各邻居的贡献以及目标球体局部流动和微观结构的影响。根据流动对称性，将对应于各邻居未加权贡献的每个标量值与适当的方向向量相乘，然后投影到 y 和 z轴上，以求得横向力和力矩。最后，所有标量值在输出层通过一个线性单元（lu）进行加权求和，得到目标球体所受的总力和力矩。

还值得一提的是，由于我们所研究问题的特点，我们选择了一种特殊的损失函数，即Huber损失，来优化未知参数（每个神经元中的权重和偏置）的取值。在双分散颗粒负载流中，作用于大球上的流向力显著大于作用于小球上的流向力，而大球的数量却远少于小球。因此，在回归过程中，与大球对应的数据点容易被视为“离群值”。如果采用简单的平均绝对误差（MAE）函数，我们的神经网络可能会忽略这些“离群值”；而如果采用传统的均方误差（MSE）函数，则可能会受到这些离群值的干扰，从而无法准确预测小球所受的力。Huber损失以下列形式平衡了这两种函数：

$$\mathcal{L}\left(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}\right) = \begin{cases} \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{F}_{i,PINN} - \boldsymbol{F}_{i,DNS}\right)^2 & \left|\boldsymbol{F}_{i,PINN} - \boldsymbol{F}_{i,DNS}\right| \leq \delta \\ \delta\left(\left|\boldsymbol{F}_{i,PINN} - \boldsymbol{F}_{i,DNS}\right| - \frac{1}{2}\delta\right) & otherwise \end{cases} \tag{5}$$

其中， $\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别是权重矩阵和偏置矩阵。在本研究中， δ 等于作用在大球上的力/力矩分布的标准差。

3.3. 超参数与实现

我们在上一小节中介绍了神经网络架构，但仍需确定若干超参数的取值，这些超参数会显著影响神经网络的学习过程和性能，因此需要提前进行微调。在介绍本文中的超参数调优过程之前，我们希望简要介绍两个概念：(i) 五折交叉验证：首先对数据集进行随机打乱，然后将其划分为5折，其中4折作为训练集，1折作为测试集，分别用于回归和评估。每一折数据依次作为测试集，用于在每轮训练后评估模型在其余各折数据上的性能，最终的性能取5轮结果的平均值。在我们的实现中，还会从训练集中额外划分出20%的数据作为验证集，在训练过程中用于验证模型的泛化能力。(ii) 决定系数 R^2：一种用于量化模型性能的度量指标，其通常具有以下形式：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(\boldsymbol{F}_{i,PINN} - \boldsymbol{F}_{i,DNS}\right)^2}{\sum_{i=1}^{N} \left(\boldsymbol{F}_{i,DNS} - \langle \boldsymbol{F}_{i,DNS} \rangle\right)^2} \tag{6}$$

其中， $\langle \boldsymbol{F}_{i,DNS} \rangle$ 是通过 PR-DNS 计算得出的平均力/力矩。考虑到本文所关注的问题，我们使用以下公式评估总体性能：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_s} \left(\boldsymbol{F}_{(s,i),PINN} - \boldsymbol{F}_{(s,i),DNS}\right)^2 + \sum_{i=1}^{N_l} \left(\boldsymbol{F}_{(l,i),PINN} - \boldsymbol{F}_{(l,i),DNS}\right)^2}{\sum_{i=1}^{N_s} \left(\boldsymbol{F}_{(s,i),DNS} - \langle \boldsymbol{F}_{(s,i),DNS} \rangle\right)^2 + \sum_{i=1}^{N_l} \left(\boldsymbol{F}_{(l,i),DNS} - \langle \boldsymbol{F}_{(l,i),DNS} \rangle\right)^2} \tag{7}$$

其中，我们分别讨论作用于小球和大球上的力/力矩。请注意，除非特别说明，以下报告的 R^2 分数均通过五折交叉验证在测试集上评估得出。

我们首先确定输入空间中需要纳入的重要邻居数量。针对 [38] 和 [39] 的邻居截断误差分析表明，在单分散颗粒流中，对于力预测， R^2 在$25 \sim 30$ 个邻居时收敛，而对于扭矩预测，则在10个邻居时收敛。我们对双分散颗粒流中的流向力 F_x、横向力 F_L和横向力矩 $T_\perp$ 进行了类似的收敛性测试，并在图3中比较了两类球体中各分量在不同邻居数量 M 下的训练（空心柱）和测试（实心柱） R^2 得分。再次，我们从图中得出两个观察结果：(i) 在所有情况下，无论 M如何，训练和测试 R^2 都非常接近，

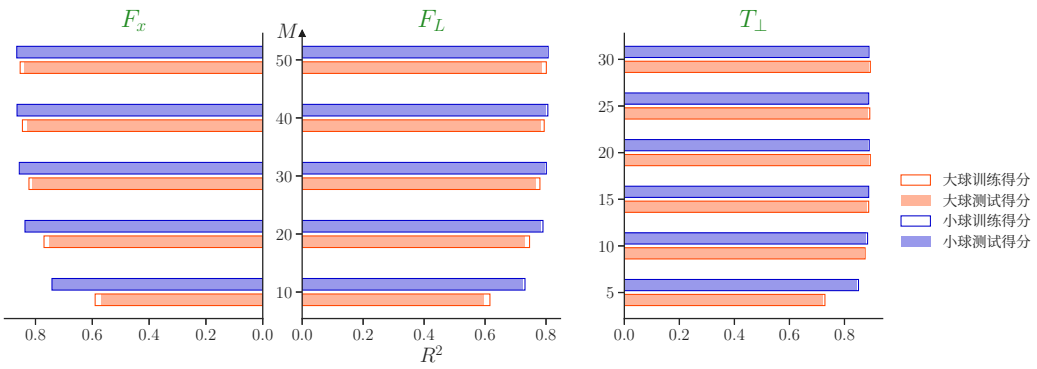


图3：随着纳入物理信息神经网络模型的邻居数量 M 增加， R^2 的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 得分。基于该收敛性研究，我们分别选择 $M = 50$ 和 $M = 20$ 用于力和力矩预测。

这表明我们的神经网络模型具有很强的泛化能力，并且 (ii) R^2 在力和$M = 40 \sim 50$ 方面趋于稳定，在力矩和 $15 \sim 20$ 方面趋于稳定，因此我们分别为前者和后者选择 $M = 50$ 和 20。

我们使用 TensorFlow [50] 和 Python 中的 Keras API [51]构建并实现神经网络模型。我们在模型训练过程中采用 Nadam优化器 [52], ，该优化器是带有 Nesterov 动量的 Adam优化器的扩展。为提高效率和准确性，我们应用了两个回调函数：（i）ReduceLROnPlateau：如果总损失在 10 个训练轮次后没有明显下降，则学习率将降低为原来的 1/2；（ii）EarlyStopping：如果连续 40 个训练轮次后仍未取得明显改善，则终止训练过程。图4展示了随着训练轮次增加，训练集和验证集的 Huber损失变化，以及学习率的变化。可以看出，训练损失和验证损失在早期阶段均迅速下降，自适应学习率帮助神经网络模型逃离局部最小值并继续搜索全局最小值。所有损失函数均达到收敛值，且训练过程中没有发生过拟合。此外，在所有情况下均采用 128 的批量大小；在较宽的超参数范围内进行网格搜索后，确定全连接层模块采用 3 层结构，其中力预测使用每层 30 个神经元，力矩预测使用每层 20 个神经元。

4. 结果与讨论

4.1. 单分散情形下的性能

为验证我们的物理信息神经网络模型的性能，我们从 Seyed- Ahmadi 和 Wachs [38] 实施的流经随机阵列中静止单分散球体的模拟案例开始。这些模拟涵盖了 10% $\leq \phi \leq$ 40 % 的广泛范围以及

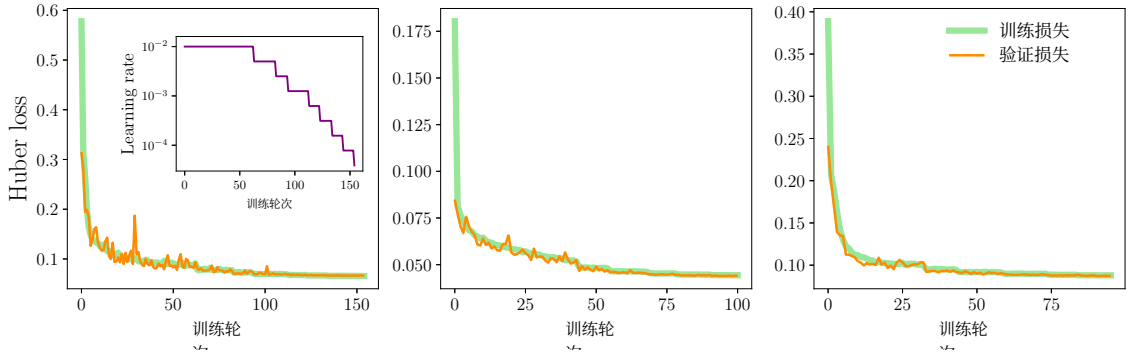


图 4：模型训练过程中 Huber损失的变化。从左到右： F_x、 F_L 和 $T_\perp$。

$0.2 \leq \mathcal{R}e \leq 150$。我们对原始数据集执行了第 2.2 节中描述的无量纲化过程。在训练过程中，我们针对力和扭矩预测考虑了 $M = 30$ 和 10，这与 [38]中使用的设置相同。表格 2 分别比较了 [38]中提出的物理信息神经网络模型和当前模型在 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ （在 [38]中记为 T_L ）上的 R^2 得分。从表格中可以看出，除案例（$\mathcal{R}e$， ϕ） = （150， 40%）中的 F_L 的 R^2 外，当前模型的几乎所有 R^2 均有所提升。该案例达到了两个参数的上限，因此需要更多数据点，才能对横向力获得令人满意的预测；随着 $\mathcal{R}e$ 和 ϕ 增大，横向力的变化会更加显著。遗憾的是，由于计算资源有限，我们在每种情况下只能获得大致相同数量的数据点（事实上，案例（150， 40%）的数据点甚至少于其他案例 [38] ）。尽管如此，我们的物理信息神经网络模型在所有其他预测中均表现出更优的性能，其中超过一半的预测在 R^2上提升超过 5%。此外，我们的结果揭示了一个清晰的规律：较低的$\mathcal{R}e$可以实现较高的 R^2 。这种改进在物理上是可以理解的，因为问题的非线性较弱，但在先前的结果中并未观察到这一现象。

4.2. 双分散情形下的性能

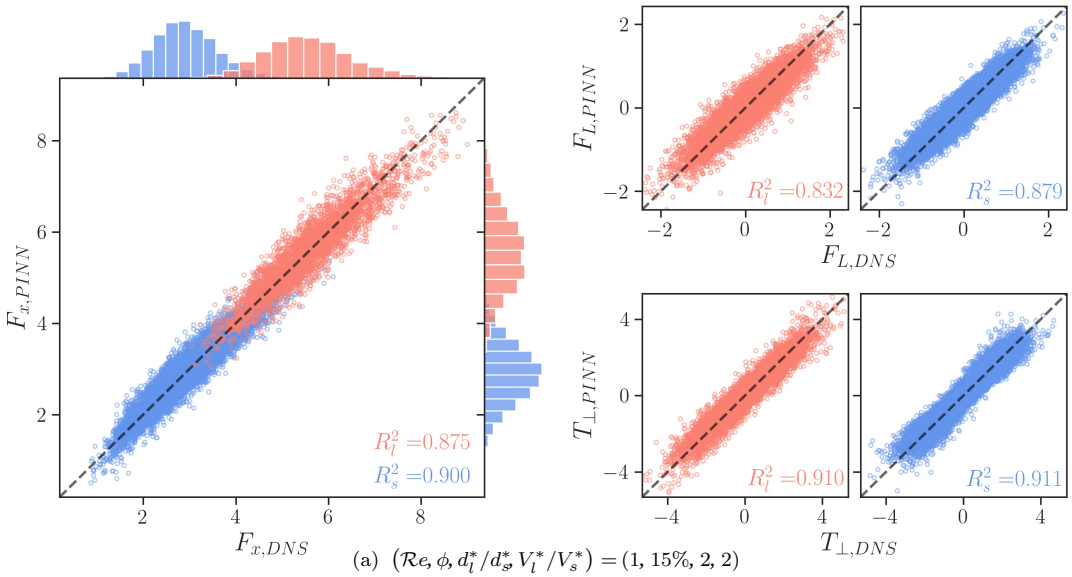
现在，我们将注意力转向我们感兴趣的问题：第 2.1 节所描述的流经静止双分散球体随机阵列的流动。图5展示了通过我们的 PR-DNS 获得的所有球体所受的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 的相关性图，以及物理信息神经网络模型在两种情况下的预测结果（$\mathcal{R}e$， ϕ， d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*） =(1， 15%， 2， 2) 和 (100， 30%， 2， 2)。这两种情况分别对应于两个关键参数 $\mathcal{R}e$ 和 ϕ 的下限和上限，而我们确实在这两种情况下观察到了最佳和最差的模型性能。为了区分两种球体类别，我们将大球数据绘制为红色，将小球数据绘制为蓝色。在大球和小球均具有非零均值的 F_x 图中，我们

ϕ	$\mathcal{R}e$	F_x		F_L		$T_\perp$	
		[38]	本文	[38]	本文	[38]	本文
10%	2	0.81	0.88	0.77	0.84	0.89	0.90
	10	0.82	0.84	0.78	0.80	0.86	0.87
	40	0.70	0.72	0.73	0.77	0.74	0.81
20%	0.2	0.68	0.79	0.57	0.78	0.74	0.89
	2	0.73	0.78	0.68	0.76	0.88	0.90
	40	0.71	0.74	0.67	0.72	0.79	0.81
	150	0.61	0.63	0.56	0.65	0.56	0.71
40%	2	0.61	0.79	0.51	0.61	0.72	0.77
	40	0.66	0.75	0.58	0.59	0.69	0.73
	150	0.52	0.69	0.53	0.51	0.59	0.62

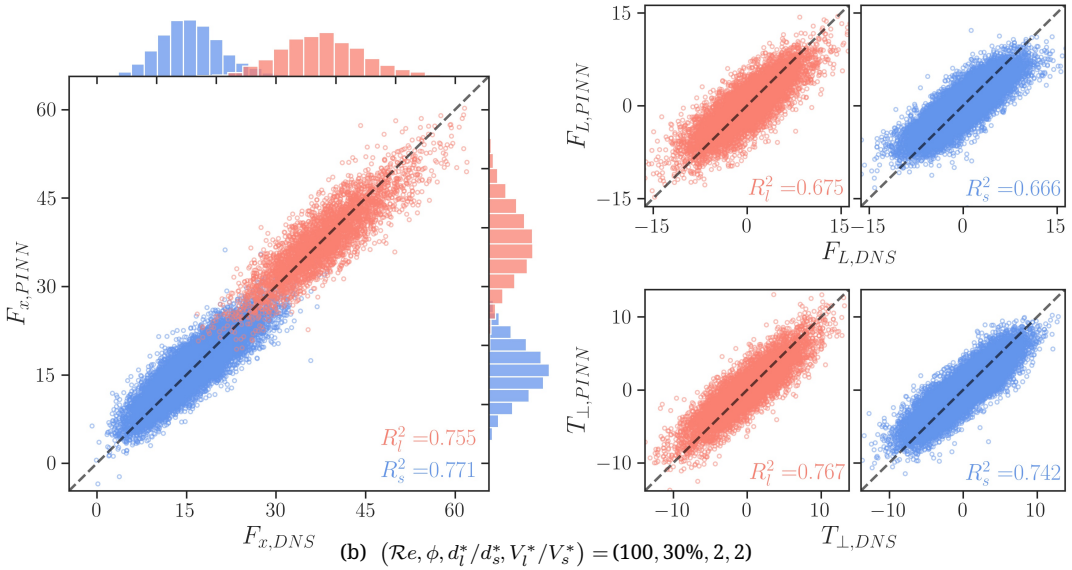
Table 2: R^2 [38] 中提出的物理信息神经网络模型与本文模型在单分散 se
颗 粒流中的表现。

将两组的概率分布附加在旁边，以便进一步比较。通过公式 6 得到的各组定量结果（ R^2 分数）也添加到了相应的子图中。我们观察到，红色和蓝色散点均紧密分布在代表完美预测的对角虚线附近（即 $R^2 = 1$），这表明误差分布并未明显偏向某一侧，并且我们的物理信息神经网络模型在大多数情况下都能给出理想的预测结果。我们还注意到，与较大的 $\mathcal{R}e$ 和较大的 ϕ相比，较低 $\mathcal{R}e$ 和较低 ϕ 条件下的数据带要窄得多。通过 PR-DNS 和物理信息神经网络模型获得的 F_x 概率分布在形状和范围上极为相似，并且在两种情况下均围绕虚线呈现出明显的对称性。此外，所有子图中每个数据带两端的形状均趋于收敛，这表明我们的物理信息神经网络模型具有良好的学习能力和泛化能力，即使在稀疏数据区域，也能够提供可接受的预测结果。

表 3 总结了所有八种情形下 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 预测的个体及总体表现。通过比较可以得出以下几点观察结果：(i) 在大多数情况下，训练集和测试集的 R^2分数彼此接近（差异 <0.03），尤其是横向力矩预测，其模型泛化能力最令人满意。(ii) 在力预测中，小球的 R^2 分数通常优于大球，而在力矩预测中，两者的表现非常接近。原因在于，大球所受的力通常高于小球，但它们在整个数据集中所占比例较小，因此会降低回归过程的表现。然而，作用于不同球体类别上的 $T_\perp$



(a) $(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*) = (1, 15\%, 2, 2)$



(b) $(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*) = (100, 30\%, 2, 2)$

图5：比较使用我们的 PR-DNS 和物理信息神经网络（PINN）获得的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 预测结果。

彼此非常接近，并且对参数 $\mathcal{R}e$、 ϕ 和 d_l^*/d_s^*的变化不太敏感。有关随机排列的静止双分散球体阵列周围流动中力和力矩分布的模拟结果，感兴趣的读者可参阅我们先前的工作；我们将在后文的统计分析中再次讨论这一点。**(iii)** 存在以下明确规律：如果在保持另外两个参数不变的情况下，增大任一关键参数 $\mathcal{R}e$、 ϕ 和 d_l^*/d_s^* ，那么三项预测 F_x、 F_L 和 $T_\perp$的表现都会显著下降。**(iv)** 即使所用的重要邻居数量少于力预测所用的数量， $T_\perp$ 预测的总体表现仍然最佳，而 F_L 的总体表现最差。这一观察结果与 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38]报告的结果一致。由此推论，我们的物理信息神经网络

该模型在双分散颗粒流中能够生成出色的预测结果，其性能与单分散颗粒流中的表现相当，甚至更优，分别见 [38] 和 [39]。总体 R^2 范围为：当 $1 \leq \mathcal{R}e \leq 100$、$10\% \leq \phi \leq 40\%$、 $1.5 \leq d_l^*/d_s^* \leq 2.5$和 $1 \leq V_l^*/V_s^* \leq 4$时， F_x的 $0.706 \sim 0.892$ 、 F_L 的 $0.669 \sim 0.871$ 以及 $T_\perp$ 预测的$0.741 \sim 0.910$ 。

最后，我们分析通过 PR-DNS 和物理信息神经网络模型得到的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 分布的一些统计特征。首先，我们比较 F_x 的平均值，这是许多先前研究提出的经典阻力模型最关注的量 [53–61]。通过比较可以看出，PR-DNS 结果与物理信息神经网络模型预测之间的最大误差仅为 0.18%。这一微小差异无疑优于任何现有阻力闭合模型所得到的结果。如前所述，尽管我们无法对每个球体都实现完美预测，但误差理想地以 0 为中心并遵循高斯分布，在对所有球体求和后，正误差与负误差相互抵消，最终得到与真实值非常接近的平均 F_x 预测。随后，我们将关注点转向三个分量的标准差。总体而言，我们的物理信息神经网络模型准确预测了所有分布的标准差。 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 的最大与最小标准差之比分别为 $7.4 \sim 7.5$、 $6.3 \sim 6.7$ 和 $2.7 \sim 2.8$ ，这证实了 $T_\perp$ 是对关键参数变化最不敏感的分量。最后但同样重要的是，我们可以观察到，通过物理信息神经网络模型得到的所有标准差均小于 PR-DNS 计算得到的标准差，这表明当前物理信息神经网络模型在低数据密度区域具有保守性。这似乎意味着，我们的模型在插值方面训练得很好，这并不意外，但在外推方面则不然（请注意，这是神经网络处理未见数据时面临的普遍挑战）。

4.3. 扩展为通用模型

在上一小节中，我们针对各个独立数据集训练并评估了物理信息神经网络模型，结果汇总于表 3。自然会让人想知道，单个模型能否在较大的参数空间内提供同等准确度的预测，从而不局限于特定配置；毕竟，本研究的最终目标是寻找一种有前景的替代方案，以取代通常适用于一系列 $\mathcal{R}e$、 ϕ、 d_l^*/d_s^*和 V_l^*/V_s^*的平均阻力闭合模型。因此，我们使用在第 3.3 节中针对多个整合数据集优化的相同超参数，实施 F_x预测的训练流程，并针对一组不同的参数运行额外模拟；这些参数均处于表1所述的输入空间内。我们将新的数据集输入更新后的

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2		总体 R^2
	训练集	测试集	训练集	测试集	
(1，15%，2，2)	0.898	0.875	0.911	0.900	**0.892**
(10,15%，2，2)	0.888	0.852	0.892	0.874	**0.868**
(100，15%，2，2)	0.777	0.712	0.743	0.704	**0.706**
(1,30%, 2, 2)	0.893	0.849	0.901	0.884	**0.871**
(10,30%, 2, 2)	0.888	0.838	0.893	0.871	**0.859**
(100, 30%,2,2)	0.818	0.755	0.800	0.771	**0.766**
（10，20% 1。5，1）	0.909	0.858	0.894	0.869	**0.864**
(10，40% 2.5，4)	0.852	0.829	0.876	0.860	**0.852**

(a) F_x

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2		总体 R^2
	训练集	测试集	训练集	测试集	
(1，15%，2，2)	0.854	0.832	0.886	0.879	**0.865**
(10,15%，2，2)	0.834	0.805	0.832	0.818	**0.814**
(100，15%，2，2)	0.802	0.733	0.741	0.707	**0.717**
(1,30%, 2, 2)	0.893	0.849	0.901	0.884	**0.871**
(10,30%, 2, 2)	0.793	0.815	0.740	0.794	**0.777**
(100，30%，2，2)	0.748	0.670	0.705	0.666	**0.669**
（10，20% 1.5，1）	0.791	0.768	0.806	0.794	**0.786**
(10，40% 2.5，4)	0.770	0.664	0.816	0.789	**0.743**

(b) F_L

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2		总体 R^2
	训练集	测试集	训练集	测试集	
(1,15%, 2, 2)	0.915	0.910	0.914	0.911	**0.910**
(10,15%, 2, 2)	0.901	0.892	0.896	0.891	**0.891**
(100，15%，2，2)	0.782	0.759	0.746	0.731	**0.741**
(1,30%, 2, 2)	0.910	0.902	0.896	0.888	**0.895**
(10,30%, 2, 2)	0.906	0.895	0.888	0.882	**0.886**
(100, 30%,2,2)	0.788	0.767	0.754	0.742	**0.750**
(10，20% 1。5，1)	0.904	0.896	0.896	0.892	**0.893**
(10，40% 2.5，4)	0.870	0.855	0.875	0.869	**0.864**

(c) $T_\perp$

表格 3: R^2 大球和小球的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 预测得分，以及整体表现
整体表现
3个数据集的性能。

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球			小球		
	$\langle F_{x,DNS} \rangle$	$\langle F_{x,PINN} \rangle$	误差	$\langle F_{x,DNS} \rangle$	$\langle F_{x,PINN} \rangle$	误差
(1，15%，2，2)	5.585	5.588	0.05%	2.918	2.914	0.12%
(10，15%，2，2)	6.763	6.772	0.14%	3.509	3.512	0.10%
(100，15%，2，2)	15.592	15.581	0.07%	7.673	7.665	0.11%
(1,30%, 2, 2)	15.771	15.756	0.10%	6.712	6.711	0.00%
(10,30%, 2, 2)	18.114	18.125	0.06%	7.701	7.701	0.01%
(100, 30%,2,2)	37.809	37.741	0.18%	15.784	15.795	0.07%
(10、20% 1.5，1)	8.442	8.435	0.08%	5.491	5.483	0.14%
(10,40% 2.5, 4)	34.065	34.076	0.03%	10.085	10.081	0.04%

表4：使用我们的 PR-DNS 和物理信息神经网络预测结果获得的各个工况下 F_x 的均值对比。

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	$\sigma_{F_{x,DNS}}$	$\sigma_{F_{x,PINN}}$	$\sigma_{F_{L,DNS}}$	$\sigma_{F_{L,PINN}}$	$\sigma_{T_\perp,DNS}$	$\sigma_{T_\perp,PINN}$
(1, 15%,2,2)	0.946	0.889	0.697	0.640	1.525	1.457
(10，15%，2，2)	1.224	1.139	0.867	0.792	1.575	1.491
(100,15%, 2, 2)	3.314	2.901	2.207	1.970	2.029	1.789
(1，30%，2，2)	2.502	2.352	1.652	1.473	2.900	2.767
(10，30%，2，2)	2.885	2.716	1.976	1.755	2.974	2.823
(100,30%, 2, 2)	6.971	6.228	4.648	4.014	3.940	3.491
(10, 20% 1.5, 1)	1.485	1.375	1.090	0.960	1.952	1.855
(10，40% 2.5，4)	5.766	5.472	3.298	2.862	4.128	3.849

(a) 大球

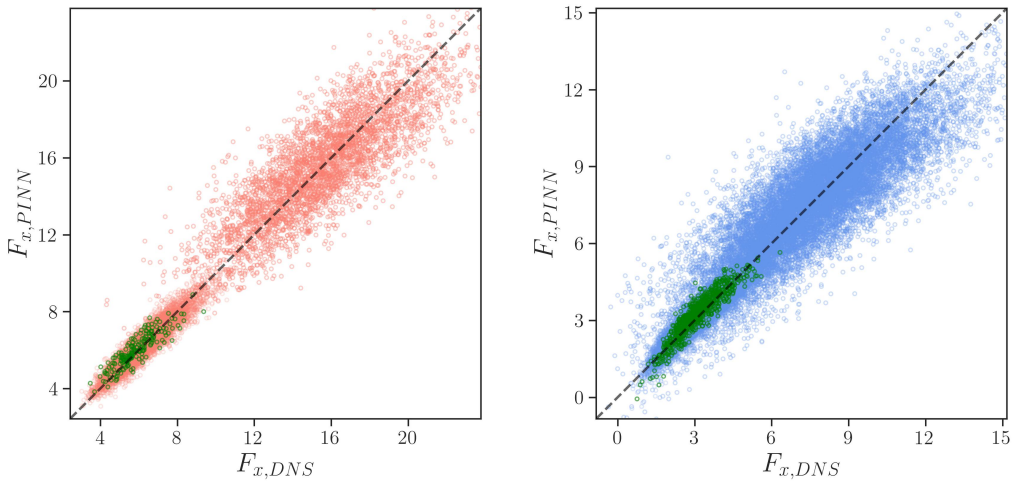
$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	$\sigma_{F_{x,DNS}}$	$\sigma_{F_{x,PINN}}$	$\sigma_{F_{L,DNS}}$	$\sigma_{F_{L,PINN}}$	$\sigma_{T_\perp,DNS}$	$\sigma_{T_\perp,PINN}$
(1, 15%,2,2)	0.681	0.650	0.529	0.497	1.126	1.077
(10，15%，2，2)	0.950	0.897	0.641	0.584	1.169	1.106
(100,15%, 2, 2)	2.545	2.195	1.457	1.255	1.404	1.208
(1，30%，2，2)	1.626	1.543	1.223	1.126	2.247	2.128
(10，30%，2，2)	2.013	1.906	1.466	1.320	2.346	2.202
(100,30%, 2, 2)	5.118	4.605	3.314	2.784	2.954	2.565
(10，20% 1.5，1)	1.308	1.221	0.929	0.833	1.659	1.571
（10，40% 2.5，4）	3.000	2.841	2.170	1.956	3.122	2.920

(b) 小球

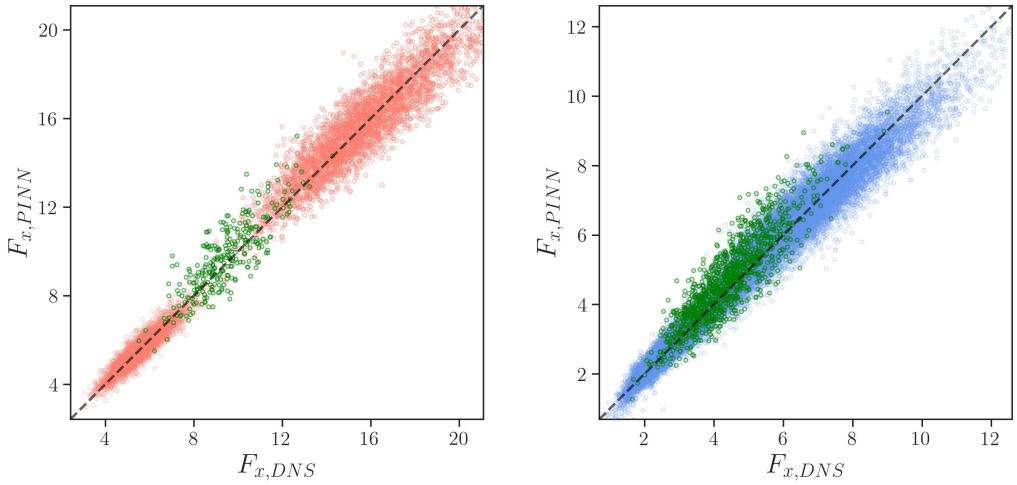
表5：比较采用我们的 PR-DNS 和物理信息神经网络预测得到的各工况下 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 的标准差。

所谓的通用物理信息神经网络模型，并评估相应的 R^2 分数，从而考察当前模型在给定参数范围内的插值能力。

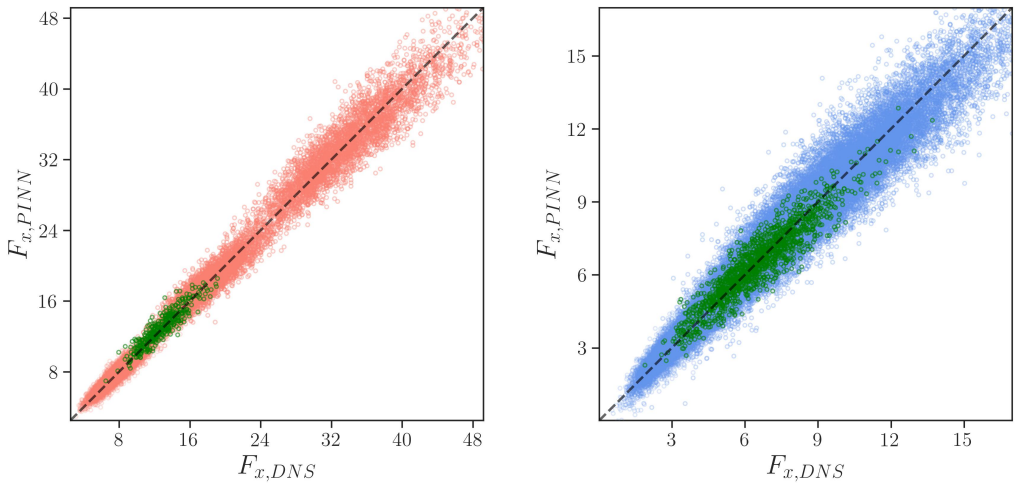
我们的输入空间中有四个变化参数：流动性质 $\mathcal{R}e$ 和粒 le



(a) $\mathcal{R}e$ 的插值



(b) 对 ϕ 进行插值



(c) 所有颗粒属性的插值

图6：使用在整合数据集上训练的物理信息神经网络模型，对未见数据（绿色点）进行预测（红色和蓝色点分别代表大球和小球）。

性质 ϕ、 d_l^*/d_s^* 和 V_l^*/V_s^*。我们从最简单的情景开始：固定其他所有参数，仅沿一个方向进行插值；随后再转向更

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2	
	训练集	测试集	训练集	测试集
(1，15%，2，2)	0.878	0.862	0.895	0.890
(10，15%，2，2)	0.859	0.842	0.862	0.865
(100，15%，2，2)	0.754	0.719	0.721	0.704
(5,15%, 2, 2)	-	0.764	-	0.805

(a) $\mathcal{R}e$的插值

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2	
	训练集	测试集	训练集	测试集
(1，15%，2，2)	0.882	0.869	0.895	0.895
(1,30%, 2, 2)	0.880	0.853	0.895	0.887
(1，22。5%，2，2)	-	0.535	-	0.603

(b) ϕ的插值

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2	
	训练集	测试集	训练集	测试集
(10,15%, 2,2)	0.852	0.846	0.862	0.863
(10,20% 1.5,1)	0.835	0.831	0.863	0.862
(10，30%，2，2)	0.857	0.848	0.881	0.878
(10,40% 2.5,4)	0.893	0.867	0.886	0.873
(10，25% 1。8，1。5)	-	0.833	-	0.862

(c) 所有颗粒属性的插值

表 6： R^2 对训练数据集和未见数据集中的大球和小球预测结果的 F_x 评分。

插值所有颗粒属性这一具有挑战性的情况：

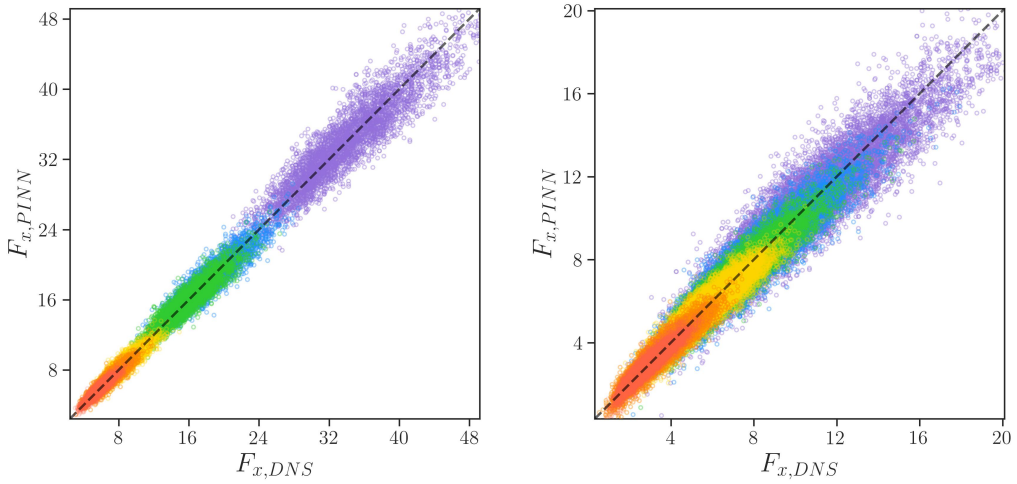
1. $\mathcal{R}e$的插值：我们在具有相同颗粒属性（ϕ、 d_l^*/d_s^*、 V_l^*/V_s^*）的三个数据集上训练物理信息神经网络模型，这些数据集分别对应 $=$（15%、2、2）、10 和 100，并在 $\mathcal{R}e = 5$处生成一个具有相同颗粒属性的额外数据集。我们在图6中展示了所有 PR-DNS 数据和物理信息神经网络模型预测结果的相关性图，其中，具有已见参数（即用于训练模型的 $\mathcal{R}e = 1$、10 和 100）的大球体和小球分别以红色和蓝色表示，而具有未见参数（即不参与训练过程的 $\mathcal{R}e = 5$ ）的预测结果以绿色点表示。从图6a可以看出，这些绿色点分布在对应于$R^2 = 1$的黑色对角线附近，表明在 $\mathcal{R}e = 5$处预测未见数据的性能良好。

定量结果见表 6，其中可以观察到，训练数据集的 R^2 得分与表 3 中由独立模型得到的结果相近；此外，对于未见数据集，也可以认为预测效果良好，大球体和小球的 $R^2 = 0.764$ 分别为和 0.805。

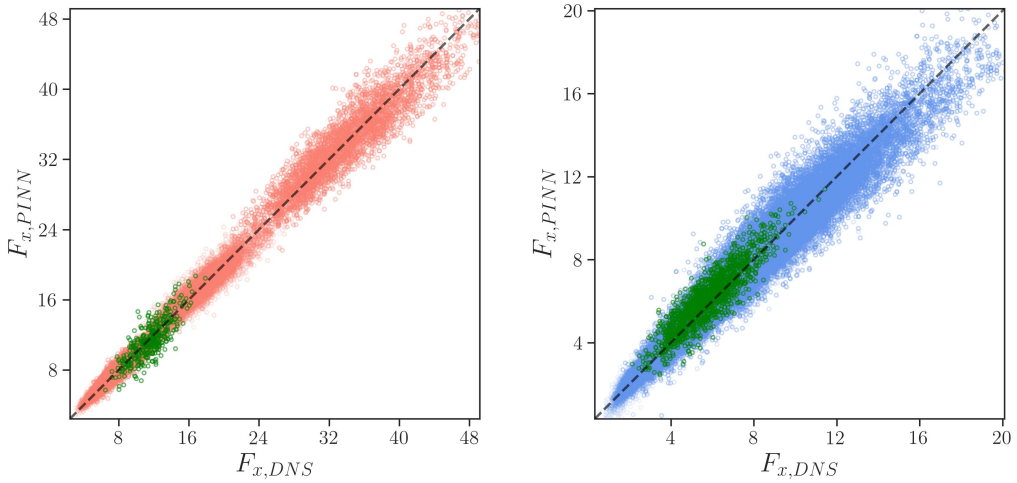
2. ϕ的插值：我们使用两个具有相同（$\mathcal{R}e$， d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*） =(1，2，2)、但 $\phi = 15\%$和30%不同的数据集训练物理信息神经网络模型，并生成一个 $\phi = 22.5\%$ 的额外数据集。图 6b 显示，绿色点（对未见数据的预测）分布在对角线附近但较为分散，这表明整体预测误差较大；对于代表较大 F_x的点，高估最为常见。从定量结果来看，由于本研究可用的数据量有限，在训练模型时仅采用两个数据集（间隔较大的下限和上限）是一种折中方案；此时，大球和小球的 R^2 分别降至0.535和0.603。

3. 所有颗粒属性的插值：我们使用四个具有相同 $\mathcal{R}e = 10$ 但颗粒属性各异的数据集训练物理信息神经网络模型，然后生成一个（ϕ， d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*） =(25% 1.8，1.5) 的新数据集，使三个参数均处于输入范围内，且与任何原始输入都不同（请注意，我们将V_l^*/V_s^*添加到输入空间以训练该模型）。图 6c 显示，模型对未见数据的预测准确度惊人；表 6c 中列出了大球和小球对应的 $R^2 = 0.833$ ，分别为0.862；这一结果甚至非常接近训练数据集的 R^2 分数。一种合理的解释是，这四个数据集的输入参数增量小于前两个测试（$\mathcal{R}e = 1 \rightarrow 10 \rightarrow 100$ 和 $\phi = 15\% \rightarrow 30\%$）中的增量，因此训练数据分布得更加均匀，参数空间中未探索区域更少、面积更小，如图 6c 所示。

鉴于我们的 PINN 建模在多个数据集上表现出色，且已证明对未见数据具有插值能力，我们现在可以建立一个兼顾流体和颗粒性质变化的通用模型。为避免参数空间出现大幅增量，我们沿用相同思路，省略包含 $\mathcal{R}e = 100$ 的数据集，并将其余数据集与 $\mathcal{R}e = 1$ 和 $\mathcal{R}e = 10$ 合并，得到超过 110，000 个数据点。我们在图 7a 中绘制了所有 PR-DNS 数据及通用 PINN 模型得到的对应预测值，并在表 7 中列出六个训练数据集的 R^2 得分（请根据图表中标示的颜色查找各个案例及其对应的聚类散点图



(a) 通用模型



(b) 未见数据上的预测

图 7：通用模型的训练。(a) 比较通过我们的 PR-DNS 获得的 F_x 与通用物理信息神经网络的预测。左：大球；右：小球。(b) 对所有参数进行插值。

$(\mathcal{R}e, \phi, d_l^*/d_s^*, V_l^*/V_s^*)$	大球 R^2		小球 R^2	
	训练集	测试集	训练集	测试集
(1，15%，2，2)	0.868	0.859	0.885	0.880
(10,15%, 2,2)	0.861	0.851	0.865	0.867
(10,20% 1.5,1)	0.838	0.832	0.863	0.862
(1,30%, 2, 2)	0.870	0.858	0.891	0.887
(10,30%, 2,2)	0.863	0.850	0.882	0.879
(10,40% 2.5,4)	0.894	0.874	0.887	0.879
(5,25% 1.8, 1.5)	-	0.459	-	0.714

表 7： R^2 使用通用物理信息神经网络模型在不同数据集上对大球和小球的评分。

）。在表 3 所示的独立模型和通用模型生成的 F_x 预测对比中

和 7 分别可以观察到，通用模型取得了优异的性能，与通过独立训练构建的模型高度相似。对于平均值相对较大的情况，例如 $(\mathcal{R}e,\ \phi,\ d_l^*/d_s^*,\ V_l^*/V_s^*) = (10,\ 30\%,\ 2,\ 2)$ 和 (10，40% 2。5，4)，我们的通用模型对大球和小球的预测结果甚至略好，这并不令人意外，因为：(i) 向物理信息神经网络模型提供了更多高质量数据；(ii) δ 用于评估Huber损失的值被设定为这六个数据集中最大的标准差，即 (10，40% 2。5，4) 情况下大球的标准差。该通用模型的成功验证了我们此前在每个独立数据集上分别进行训练和测试的实现方式，这显著加快了超参数的微调过程，并提供了一种快速确定模型性能的方法，即仅需考察参数空间的上下界。

我们最终生成了一个数据集，其参数为（$\mathcal{R}e,\ \phi,\ d_l^*/d_s^*,\ V_l^*/V_s^*$） = （5， 25% 1。8， 1。5），以考察我们的通用模型在整个输入空间中的插值能力。图 7b 和表 7 分别展示了这组未见数据的预测分布和 R^2 评分。可以看出，考虑到这项测试的复杂性，模型的预测性能，尤其是在低 $\mathcal{R}e$ 范围内，从定性和定量角度来看都可以接受；同时，我们有理由预期，使用分布更均匀、密度更高的数据训练的通用模型能够提供准确得多的预测。以上报告的初步发现表明，在参数空间的 ϕ 维度进行插值是一项重大挑战，因此应优先提高训练数据集在 ϕ 方向上的密度。从流体力学的角度来看，这一建议并不令人意外，因为力/力矩波动的大小取决于邻居引起的流动扰动强度，而这些流动扰动的大小主要取决于 ϕ。

4.4. 物理信息神经网络模型的可解释性

除了泛化能力，可解释性也是神经网络模型中一项至关重要的考量。模型学习潜在机理并再现具有物理意义的结果，这一点非常重要。我们借鉴 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38] 的思路，生成最近邻和次近邻对作用于目标球体的总力/力矩所作的贡献。事实上，我们可以轻松获取每个邻居各自作出的贡献，因为我们的神经网络架构会分别评估每一对粒子间的相互作用，并仅在输出层通过一组权重对所有重要邻居的贡献求和。我们首先在图 $8{-}10$中展示最近邻对 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 的贡献。请注意，在这些图中，我们将目标球体（实心

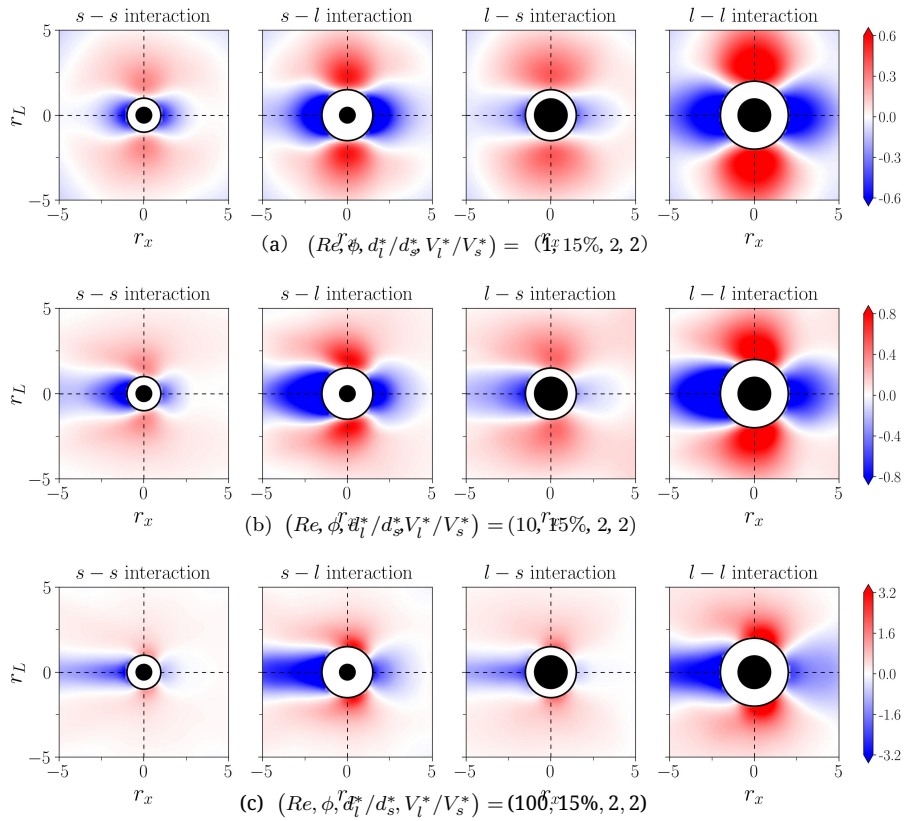
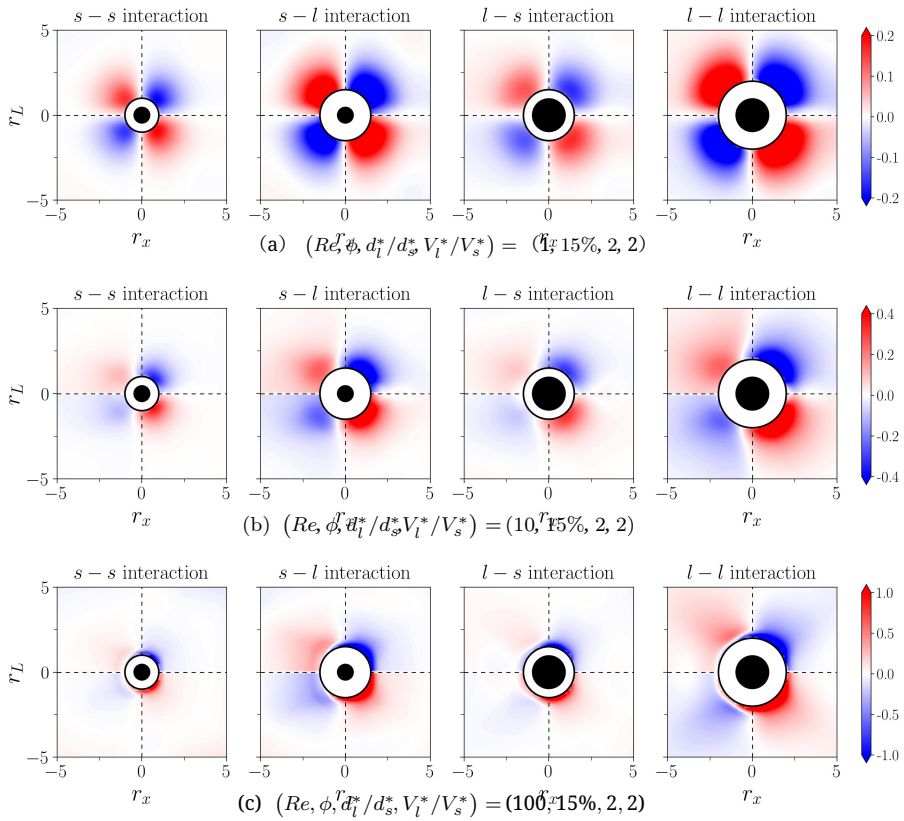


Figure 8：不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的 F_x 贡献 s.

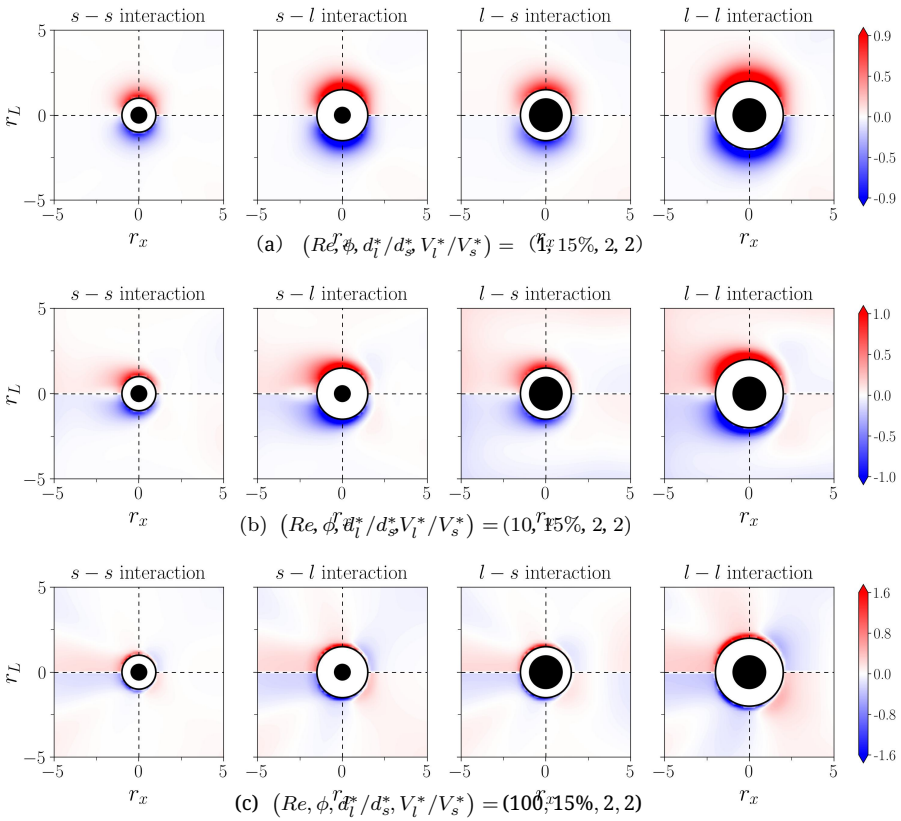
黑色圆圈）置于中心，外围的白色区域表示邻居无法进入的区域。我们在双分散颗粒流中识别出四种不同的相互作用模式： $s-s$、 $s-l$、 $l-s$ 和 $l-l$ 相互作用，其中第一个字母表示目标球体的大小，第二个字母表示其邻居的大小（l：大； s：小）。我们采用与 [38] 相同的记号，其中 r_x 表示两个球体之间沿流向的距离， r_L 表示横向距离。以下图形经过方位角平均处理，平均范围为多个包含流向 x 方向的平面（这也是我们使用 r_L 而非 r_y 或 r_z的原因）。每幅图中关于 x轴的完全对称，是数据增强的结果（由于流动对称性，我们在 xy 和 xz 平面上对数据集关于 x轴进行镜像），而非平均操作所致。为便于说明，我们选取了三个案例（$\mathcal{R}e$， ϕ， d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*） $=$（1，15%，2，2）、（10，15%，2，2）和（100，15%，2，2）；其他所有案例中也都能观察到类似的模式。

这些贡献图不仅与 [37–39], 中展示的结果相似，也令人联想到 [14, 43]中的概率分布图。举例来说，图8所示案例（100，15%，2，2）中的 F_x 贡献，与 [43], 中的 $\tilde{p}(\Delta F_x > 0)$ 和 $\tilde{p}(\Delta F_x < 0)$ 组合高度相似：目标球体所受流向力低于平均值的高概率区域始终主要位于上游区域，部分位于下游区域，



Fig图 9： F_L 不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的贡献 s.

与此同时，贡献图显示，邻近球体会在定性上相同的区域（蓝色）产生负向 ΔF_x 。类似地，正向 ΔF_x 贡献区域（红色），即 $\Delta F_x > 0$ 的高概率区域，由于最近邻起主导作用，始终位于目标球体两侧。值得注意的是，在 $\mathcal{R}e = 10$ 和 100 时，红色区域均略微向下游偏移；而在 $\mathcal{R}e = 1$时则呈现前后对称性，此时流动惯性影响较小，力波动的主要来源是邻居，即微观结构。此外，大球的贡献始终大于小球，这一点在 $l-s$与 $s-l$之间的相互作用比较中也成立。图9和图10分别展示了 F_L 和 $T_\perp$ 的情况，这两项观察同样适用：前后对称性仅在 $\mathcal{R}e = 1$ 时存在，之后随着 $\mathcal{R}e$ 增加，临界区域相应地向 $1-4$和 $2-3$ 象限偏移。这一趋势也与概率分布图一致。此外，在较高的 $\mathcal{R}e$下，上游邻居对 F_x的影响更大、对 F_L 的影响更小，反之亦然；而 T_L的影响范围明显小于力的影响范围，因此扭矩预测所需的邻居更少。



Figu雷诺数 10：不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的贡献 $T_\perp$ es.

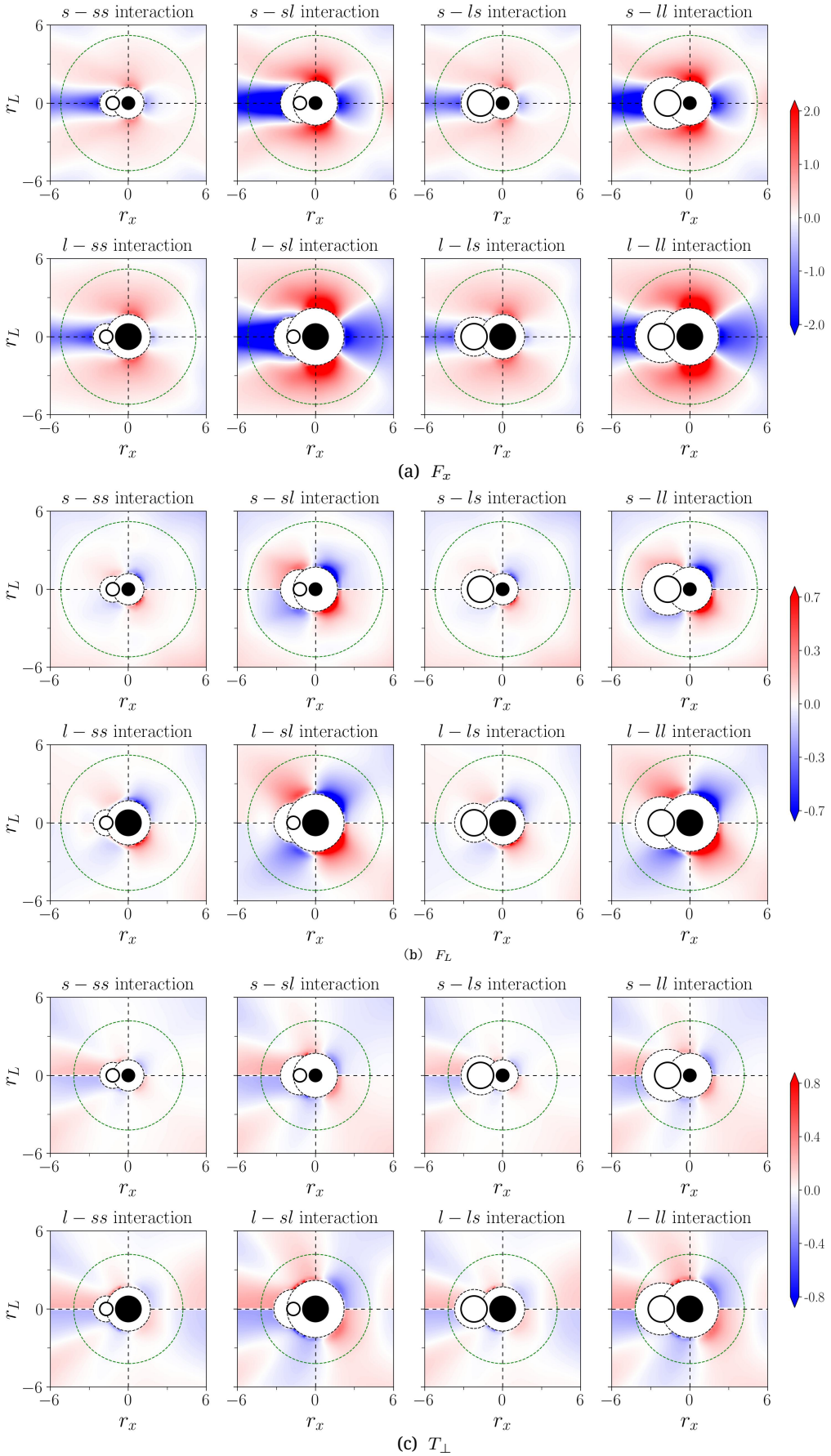
最后，我们对第二近邻进行类似分析，并展示其对作用于目标球体（黑色实心圆）的总力/力矩的贡献；分析中将最近邻（黑色空心圆）固定在上游位置，间隙为 $= 0.2$（仅用于演示）。同样，黑色虚线圆所围成的外侧白色区域表示邻居无法存在的区域，而最外层绿色虚线圆则反映重要邻居的范围，即在力预测和力矩预测中分别对应第 50 个和第 20 个邻居的位置。我们可以识别出双分散颗粒流中三元相互作用的八种不同模式，并以“目标球体 – 最近邻和第二近邻”的格式标记每种模式。这里我们选取案例（$\mathcal{R}e$， ϕ，d_l^*/d_s^*， V_l^*/V_s^*）=（100，15%，2，2）作为示例，其他案例也有类似发现：（i）如各子图图例所示，第二近邻的贡献始终小于最近邻的贡献，这是因为模型赋予最近邻显著更大的权重，以体现其主导作用。（ii）与此前对二元相互作用的观察类似，无论相互作用模式如何，大球总是产生更大的影响，这表明我们的物理信息神经网络模型在整个学习过程中尤其重视邻近球体的尺寸。（iii）第二近邻的全部三种贡献 F_x F_L 和 $T_\perp$ 的等值线形状

均与最近邻的等值线形状相同，且不受相互作用模式影响。这并不令人意外，因为在我们的物理信息神经网络架构设计中，每个输入邻居都会被分别送入同一个神经网络模块进行处理，因此只会生成幅值不同、模式相同的影响。这种统一的函数/贡献表征是成对相互作用假设的核心特征。它简化了多体相互作用问题，使我们能够将特定邻居的影响与其他邻居的影响分离，并根据每一对球体的属性进行评估；而球体在局部组装中的顺序只会影响叠加权重，不会影响总体模式。

5. 结论

物理信息机器学习和数据驱动方法已被广泛用于解决流体力学问题，已有多项研究证明，这些方法在预测单分散颗粒流问题中的流体动力学力/扭矩波动方面具有良好的应用前景。过去人们通常忽略这些波动，尽管 PR-DNS 数据证实，阻力分布的标准差与其平均值的量级相当 [14, 62]。然而，由于相应 PR-DNS 的计算成本增加，我们仍然缺乏对多分散颗粒悬浮流中力/力矩分布的认识，这也阻碍了包括将机器学习技术拓展至该领域在内的进一步研究。因此，我们在先前的工作中，对流经静止双分散和多分散球体随机阵列的流动进行了系列 PR-DNS 计算 [43]。结果表明，作用于各类球体上的力和力矩仍呈高斯分布，且分布范围不可忽略；双分散颗粒负载流中不同二元相互作用模式的概率分布图，在等值线形状和临界区域方面也惊人地相似。基于这些数值发现，我们现在能够从这一大型数据集中提取关键特征，并利用物理信息神经网络模型挖掘双分散颗粒负载流中力/力矩波动与相关变量之间的统计关系，以此作为研究的起点。

受几项关于单分散颗粒流 [37–39], 的示例研究启发，我们基于相同的成对相互作用假设 [46, 47]构建了所研究的问题：该假设将静止随机阵列中每个球体的流体动力学力/扭矩近似为其 M 最具影响力的最近邻所产生的单独贡献的线性叠加。另一项核心假设是，不同相互作用模式具有相似的概率分布图，这意味着可以用一个统一函数来描述此类力/力矩贡献。



(a) F_x

(b) F_L

(c) $T_\perp$

图11：在不同相互作用模式下，参考粒子的最近邻固定在上游位置时，第二近邻对参考粒子的贡献。

无论邻居的大小或其与目标球体的距离如何，都会考虑每个邻居的影响。因此，我们构建了一种紧凑的物理信息神经网络架构，将相对位置和直径 $\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}$of neighbor j 作为输入，通过同一个神经网络模块评估邻居对目标球体的影响。这体现了统一函数表示，与[38]中提出的方法类似。为纳入局部中尺度流动和微观结构的影响，我们选取局部平均速度、局部固体体积分数和目标球体直径 $\{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i,\ \phi_i,\ d_i\}$作为额外输入，并用另一个神经网络模块处理。两个神经网络模块的标量输出经过逐元素乘法，以体现考虑局部流动条件时各邻居的贡献。最后，根据成对相互作用假设，通过加权和计算作用于目标球体的总力/力矩。

根据网格搜索结果，我们确定力和力矩预测的重要邻居数量分别为 $M = 50$和 20，相应地，两个神经网络模块的深度（层数）和宽度分别为 (3，30) 和 (3， 20)。我们使用涵盖$1 \leq \mathcal{R}e \leq 100$、10% $\leq \phi \leq 40$%、 $1.5 \leq d_l^*/d_s^* \leq 2.5$ 和 $1 \leq V_l^*/V_s^* \leq 4$的八个 PR-DNS 案例的部分解析直接数值模拟数据集训练了物理信息神经网络模型。通过比较物理信息神经网络模型的预测结果与 PR-DNS 数据，我们证明了其总体性能出色： R^2 在 F_x 的范围为 $0.706 \sim 0.892$ ，在 F_L 的范围为 $0.669 \sim 0.871$ ，而 $T_\perp$ 预测的结果为 $0.741 \sim$ 0。910。当前模型的成功不仅体现在对具有不同力/力矩分布的小球体和大球体均取得了相近的性能，还体现在训练集和测试集的 R^2 差异很小，这表明模型对未参与训练的数据具有出色的泛化能力。我们进一步比较了物理信息神经网络预测结果与 PR-DNS 数据的力/力矩分布统计量，发现两种方法得出的分布非常相似，二者的标准差也吻合良好；即使在最差情景下，平均 F_x 的误差也仅为 0。18%。随后，我们使用相同的超参数，在多个合并数据集上重复训练流程，以构建通用预测模型；并再次在由 PR-DNS 使用新的输入参数集生成的未见数据上评估模型性能。在大多数情况下，预测结果令人满意，表明在所考虑的流体和颗粒性质范围内，通用物理信息神经网络模型具有良好的插值能力。最后，我们展示了不同二元和三元相互作用模式下最近邻和第二近邻的贡献图。我们注意到，临界区域，即正向或负向的力/力矩贡献，与此前概率分布图中显示的区域在定性上完全一致，这表明我们的物理信息神经网络预测结果具有出色的

可解释性。

如前所述，本文考察的双分散颗粒负载流情形是我们“概念验证”研究的起点。我们的最终目标是从针对特定问题的模型发展为通用模型，使其能够处理其他涉及更复杂配置的颗粒负载流问题，例如含有多分散球体和/或非球形颗粒的流动。若没有本研究提供的先验知识以及对相应物理信息神经网络架构的精细设计，这一目标便无法实现。正如 Seyed-Ahmadi 和 Wachs [38], 所指出的，随着重要邻居数量增加，简单的全连接神经网络模型甚至无法给出正确的预测。相比之下，本研究采用的物理信息神经网络架构具有若干关键优势，有望助力其扩展至更复杂的颗粒负载流问题：

1. 由于不同邻居共用同一个神经网络模块，理论上我们能够将数量无限的重要邻居作为输入，而无需调整整体物理信息神经网络架构；相比之下，对于全连接神经网络模型，在这种情况下必须相应地增加隐藏层的规模（包括深度和宽度）。对于强双分散和多分散颗粒悬浮流，这一点至关重要，因为当球体直径比增大时，重要邻居的数量也应随之增加。（例如，在我们的双分散情形中， $M = 50$ 和20，而只有 $1.5 \leq d_l^*/d_s^* \leq 2.5$；相比之下，先前研究中的单分散情形为 $M \leq 30$ 和10。）

2. 统一函数表示 [38] （类似于 [37] 中的顺序不变性假设）已根据我们对不同二元相互作用模式下获得的概率分布图的观察结果，证明其适用于双分散情形，因此启发了为每个邻居相关输入集设计共享神经网络模块的特定架构。因此，我们假设这一特征可以应用于具有相同邻居输入 $\{\boldsymbol{r}_j, d_j\}$ j 的任何含有多分散球形颗粒的流动（仍需使用 PR-DNS 数据进行训练和验证）。类似地，该特征也可以应用于含有非球形颗粒的流动，但需要引入额外的独立变量来表征邻居，例如球形度和长宽比，并将这些变量纳入近似贡献函数和输入空间中。

3. 我们利用另一个神经网络模块，分别评估了局部中尺度流动和邻域的影响，依据 $\{\boldsymbol{\mathcal{R}}\mathbf{e}_i, \phi_i, d_i\}$，并采用 [39] 中的方法，通过逐元素乘法将这一影响与每个邻居的贡献相结合。 such

采用某种操作在物理上比直接将这些输入提供给线性叠加更为合理，因为后者在 [38] 中似乎过于简化。得益于第二个神经网络模块，我们还可以考虑许多其他中间变量，例如 [35]，中建议的压力分量，以改进力/力矩预测。

值得强调的是，这种紧凑的物理信息神经网络架构还带来了另一个优势，正如上一节所指出的：与全连接神经网络相比，未知参数的总数大幅减少。例如，在力预测中，未知参数的数量为 4100/4150（F_L 有两个分量），在扭矩预测中则为 1940；相比之下，文献 [39] 报告的 (6,50) 神经网络和 (5,100) 神经网络的未知参数数量分别高达 25850 和 81500，这一差异令人惊讶（其原因在于，该全连接神经网络需要关联数量多得多的输入变量，即需要输入所有邻居的信息，而我们的物理信息神经网络模型只需输入单个邻居的信息）。因此，我们的物理信息神经网络模型不仅在训练方面（即优化未知参数的取值）效率更高，更重要的是，在计算随机球体组件的力/力矩分布方面也更加高效。此外，我们的模型采用的 ELU 激活函数比双曲正切单元具有更简单的形式，这也有助于加快计算速度。例如，在采用 16 个 CPU 核心并行计算的情况下，我们的模型仅需 < 1 秒即可计算出由 4000 个球体组成的阵列中的力或力矩分量。因此，将我们的物理信息神经网络模型应用于 EL 模拟具有良好的前景，可用于提供局部复杂流动所产生的、目前尚缺失的流体动力学颗粒力和力矩，而这些力和力矩通常被任何平均阻力闭合模型过度简化（因为其他分量的平均值为 0）。毫无疑问，我们的物理信息神经网络模型仍然比平均阻力闭合模型的计算速度慢，因为这些闭合模型通常具有简洁的函数形式，且仅依赖于介观变量，例如 $\mathcal{R}e$、 ϕ 和 d_i^*。归根结底，没有免费的午餐，但根据模拟所期望的保真度水平，精度与计算成本之间始终存在适当的权衡。我们认为，在这两个方面均表现良好的物理信息神经网络模型，无疑可以成为提升 EL 模拟性能的一种有力替代方案。

我们希望就施加于目标球体的力/力矩所依据的线性叠加这一基本假设分享一些总结性看法。在我们的工作中，我们始终采用这种线性叠加，并取得了出色的预测结果，这很可能是因为所选范围 $1 \leq \mathcal{R}e \leq 100$ 的上限相对较低；而我们可以合理地预期，在更高的 $\mathcal{R}e$下应采用非线性关系。Siddani 和 Balachandar[39] 提出了对流体动力学力/扭矩的分层解释，并将其展开为一元、二元、三元及高阶相互作用项。这无疑是恰当的

但训练神经网络模型来学习三元及高阶相互作用要困难得多。然而，如果我们能够找到二元项与三元项之间的关系，并依次找到 N元项与（$N+1$）元项之间的关系，那么仅根据二元相互作用项，就可能等价地推导出力/力矩与其之间的非线性关系。相应地，在物理信息神经网络架构中，我们只需在输出层中添加一个额外的神经网络模块来近似这一非线性函数，其中每个二元相互作用贡献都作为输入，而力/力矩作为输出。这将留待我们未来的研究。

参考文献

参考文献

[1] M. A. van der Hoef, M. van Sint Annaland, N. Deen, J. A. M. Kuipers，致密气固流化床的数值模拟：一种多尺度建模策略，Annual Review of Fluid Mechanics 40 (1) (2008) 47–70。doi:10.1146/annurev.fluid.40.111406.102130。URL https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.40.111406.102130[2] S. Balachandar, J. K. Eaton，湍流分散多相流，Annu. Rev. Fluid Mech. 42 (1) (2009) 111–133。doi:10.1146/annurev.fluid.010908.165243。URL https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.010908.165243[3] S. Tenneti, S. Subramaniam，面向气固流动模型开发的颗粒分辨直接数值模拟，Annual Review of Fluid Mechanics 46 (1) (2014) 199–230。arXiv:https://doi.org/ 10.1146/annurev-fluid-010313-141344, doi:10.1146/annurev-fluid-010313-141344。URL https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010313-141344[4] L. Brandt, F. Coletti，含颗粒湍流：进展与展望，Annu. Rev. Fluid Mech. 54 (1) (2022) 159–189。doi:10.1146/annurev-fluid-030121-021103。URL https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-030121-021103[5] X. Wang, K. Liu, C. You，基于多颗粒系统中颗粒非均匀分布的阻力模型修正，Powder Technology 209 (1) (2011) 112–118。doi:10.1016/j.powtec.2011. 02.018。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591011000738[6] G. J. Rubinstein, A. Ozel, X. Yin, J. J. Derksen, S. Sundaresan，流化球体周围低雷诺数流动的格子玻尔兹曼模拟：非均匀性对阻力的影响，流体力学杂志 833 (2017) 599–630。doi:10.1017/jfm.2017.705。[7] M. Su, H. Zhao，通过固相体积分数梯度修正相间阻力以实现快速流化床的计算流体力学模拟，AIChE J. 63 (7) (2017) 2588–2598。doi:10.1002/aic.15573。URL https://doi.org/10.1002/aic.15573[8] T. Li, L. Wang, W. Rogers, G. Zhou, W. Ge，一种基于局部非均匀性的气固流动阻力修正方法，AIChE J. 63 (4) (2017) 1203–1212。doi:10.1002/aic.15507。URL https://doi.org/10.1002/aic.15507[9] S. Tenneti, M. Mehrabadi, S. Subramaniam，用于气固悬浮体系中惯性颗粒流体动力学加速的随机拉格朗日模型，流体力学杂志 788 (2016) 695–729。doi:10.1017/jfm.2015.693。[10] A. Esteghamatian, F. Euzenat, A. Hammouti, M. Lance, A. Wachs，基于流化床多尺度数值模拟的阻力随机建模方法，International Journal of Multiphase Flow 99 (2018) 363–382。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2017.11. 003。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932217304779[11] A. M. Lattanzi, V. Tavanashad, S. Subramaniam, J. Capecelatro，用于捕捉含颗粒流中弥散现象的随机模型，流体力学杂志 903 (A7) (2020) A7。doi:10.1017/jfm. 2020.625。[12] A. M. Lattanzi, V. Tavanashad, S. Subramaniam, J. Capecelatro，用于流体动力学的随机模型。

含颗粒流欧拉–拉格朗日模拟中的流体动力，Physical Review Fluids 7 (1) (2022) 014301。doi:10.1103/PhysRevFluids.7.014301。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.7.014301
[13] B. Hardy, O. Simonin, J. De Wilde, G. Winckelmans，球形颗粒随机阵列绕流的模拟：基于微观结构的张量量作为预测流体–颗粒作用力的工具，International Journal of Multiphase Flow 149 (2022) 103970。doi:https://doi.org/10.1016/j. ijmultiphaseflow.2021.103970。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932221003621[14] A. Seyed-Ahmadi, A. Wachs，基于微观结构信息和概率驱动的点颗粒模型，用于含颗粒流中的流体动力和力矩，流体力学杂志 900 (2020) A21。doi:10.1017/jfm.2020.453。[15] A. N. Kolmogorov，不可压缩黏性流体在极高雷诺数下的湍流局部结构，Dokl. Akad. Nauk. SSSR 30 (1941) 301–303。URL https://cir.nii.ac.jp/crid/1572824499981613312[16] S. L. Brunton, B. R. Noack, P. Koumoutsakos，流体力学中的机器学习，Annu. Rev. Fluid Mech. 52 (1) (2020) 477–508。doi:10.1146/annurev-fluid-010719-060214。URL https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010719-060214[17] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis，利用高斯过程对线性微分方程进行机器学习，计算物理学杂志 348 (2017) 683–693。doi:10.1016/j.jcp.2017.07.050。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117305582[18] M. Raissi, G. E. Karniadakis，隐藏物理模型：非线性偏微分方程的机器学习，计算物理学杂志 357 (2018) 125–141。doi:10.1016/j.jcp.2017.11.039。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117309014[19] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis，物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和反问题的深度学习框架，计算物理学杂志 378 (2019) 686–707。doi:10.1016/j.jcp.2018.10.045。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118307125[20] M. Raissi, Z. Wang, M. S. Triantafyllou, G. E. Karniadakis，涡激振动的深度学习，流体力学杂志 861 (2019) 119–137。doi:10.1017/jfm.2018.872。[21] S. Cai, Z. Mao, Z. Wang, M. Yin, G. E. Karniadakis，用于流体力学的物理信息神经网络（PINNs）：综述，Acta Mechanica Sinica 37 (12) (2021) 1727–1738。doi:10.1007/s10409-021-01148-1。URL https://doi.org/10.1007/s10409-021-01148-1[22] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang，物理信息机器学习，Nature Reviews Physics 3 (6) (2021) 422–440。doi:10.1038/s42254-021-00314-5。URL https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5
[23] S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, F. Piccialli，通过物理信息神经网络实现科学机器学习：现状与未来展望，Journal of Scientific Computing 92 (3) (2022) 88。doi:10.1007/s10915-022-01939-z。URL https://doi.org/10.1007/s10915-022-01939-z[24] L.-T. Zhu, X.-Z. Chen, B. Ouyang, W.-C. Yan, H. Lei, Z. Chen, Z.-H. Luo，机器学习综述

用于多相流和反应器中的流体动力学、传输与反应，Ind. Eng. Chem. Res. 61 (28) (2022) 9901–9949. doi:10.1021/acs.iecr.2c01036. URL https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c01036[25] A. D. Jagtap, E. Kharazmi, G. E. Karniadakis, 面向守恒定律的离散域守恒型物理信息神经网络：正向与反问题的应用, Computer Meth- ods in Applied Mechanics and Engineering 365 (2020) 113028. doi:10.1016/j.cma.2020.113028. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782520302127[26] E. Kharazmi, Z. Zhang, G. E. M. Karniadakis, hp-vpinns：采用域分解的变分物理信息神经网络，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 374 (2021) 113547. doi:10.1016/j.cma.2020.113547. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782520307325[27] P.-H. Chiu, J. C. Wong, C. Ooi, M. H. Dao, Y.-S. Ong, Can-pinn：一种基于耦合自动数值微分方法的快速物理信息神经网络, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 395 (2022) 114909. doi:10.1016/j.cma.2022.114909. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782522001906[28] X. Jin, S. Cai, H. Li, G. E. Karniadakis, NSFnets（纳维–斯托克斯流网络）：用于不可压缩纳维–斯托克斯方程的物理信息神经网络, 计算物理学杂志 426 (2021) 109951. doi:10.1016/j.jcp.2020.109951. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999120307257[29] S. A. Faroughi, N. Pa war, C. Fernandes, S. Das, N. K. Kalantari, S. K. Mahjour, 科学计算中的物理引导、物理信息和物理编码神经网络 (2022). doi:10.48550/ ARXIV.2211.07377. URL https://arxiv.org/abs/2211.07377[30] J. Viquerat, E. Hachem, 一种用于预测低雷诺数层流中任意二维形状阻力的监督式神经网络，Computers & Fluids 210 (2020) 104645. doi:10.1016/j. compfluid.2020.104645. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793020302164[31] D. Xin, J. Zeng, K. Xue, 基于人工神经网络的非球形碎片阻力替代模型，Powder Technology 404 (2022) 117412. doi:10.1016/j.powtec.2022.117412. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591022003060[32] S. Lee, J. Yang, P. Forooghi, A. Stroh, S. Bagheri, 通过迁移学习经验关联式预测粗糙表面的阻力，流体力学杂志 933 (A18) (2022) A18. doi:10.1017/ jfm.2021.1041.[33] S. A. Faroughi, A. I. Roriz, C. Fernandes, 一种预测黏弹性流体中平移颗粒阻力系数的元模型：机器学习方法 (2022). doi:10.3390/polym14030430.[34] L. He, D. K. Tafti, 一种用于预测悬浮液中球形颗粒可变阻力的监督式机器学习方法，Powder Technology 345 (2019) 379–389. doi:10.1016/j.powtec. 2019.01.013. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591019300130[35] N. Muralidhar, J. Bu, Z. Cao, L. He, N. Ramakrishnan, D. Tafti, A. Karpatne, 面向运动流体中颗粒悬浮液阻力预测的神经网络物理引导设计与学习 (2019). doi:10.48550/ARXIV.1911.04240.

URL https://arxiv.org/abs/1911.04240[36] N. Muralidhar, J. Bu, Z. Cao, L. He, N. Ramakrishnan, D. Tafti, A. Karpatne, 用于致密流体-颗粒系统阻力预测的物理引导深度学习，Big Data 8 (5) (2020) 431–449. doi:10.1089/big.2020.0071. URL https://doi.org/10.1089/big.2020.0071[37] W. Moore, S. Balachandar, G. Akiki, 一种结合物理方法与数据驱动方法的混合点颗粒力模型，计算物理学杂志 385 (2019) 187–208. doi:https: //doi.org/10.1016/j.jcp.2019.01.053. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999119301111[38] A. Seyed-Ahmadi, A. Wachs, 用于含颗粒流中力和力矩建模的物理启发神经网络架构，Computers & Fluids 238 (2022) 105379. doi:https://doi.org/10. 1016/j.compfluid.2022.105379. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579302200055X[39] B. Siddani, S. Balachandar, 基于机器学习的点颗粒阻力、升力和力矩闭合模型：分层方法与可解释性，Physical Review Fluids 8 (1) (2023) 014303. doi:10.1103/ PhysRevFluids.8.014303. URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.8.014303[40] M. Shirzadi, T. Fukasawa, K. Fukui, T. Ishigami, 深度学习神经网络在纤维过滤器流体-颗粒动力学分析中的应用，Chemical Engineering Journal 455 (2023) 140775. doi:10.1016/j.cej.2022.140775. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894722062556[41] N. R. Ashwin, Z. Cao, N. Muralidhar, D. Tafti, A. Karpatne, 用于预测致密颗粒悬浮液中流体力的深度学习方法，Powder Technology 401 (2022) 117303. doi:10.1016/j. powtec.2022.117303. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591022001978[42] S. Hwang, J. Pan, L.-S. Fan, 用于稀疏、多分散、含不规则形状颗粒流中阻力建模的深度学习，Chemical Engineering Science 266 (2023) 118299. doi: 10.1016/j.ces.2022.118299. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250922008843[43] Z. Cheng, A. Wachs, 随机排列的多分散静止球体中的流体动力力和力矩波动，International Journal of Multiphase Flow.[44] Z. Cheng, A. Wachs, 一种基于自适应八叉树网格的浸入边界/多松弛时间格子玻尔兹曼方法，用于含颗粒流的颗粒分辨模拟，计算物理学杂志 471 (2022) 111669. doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111669. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199912200732X[45] S. Popinet, 一种用于 Serre-Green-Naghdi 方程的四叉树自适应多重网格求解器，计算物理学杂志 302 (2015) 336–358. doi:10.1016/j.jcp.2015.09.009. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115005902[46] G. Akiki, W. Moore, S. Balachandar, 用于含颗粒流的成对相互作用扩展点颗粒模型，计算物理学杂志 351 (2017) 329–357. doi:https://doi.org/10.1016/ j.jcp.2017.07.056. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999117306848

[47] G. Akiki, T. L. Jackson, S. Balachandar, 《随机阵列中单分散球体的成对相互作用扩展点颗粒模型》，流体力学杂志 813 (2017) 882–928。doi: 10.1017/jfm.2016.877。[48] S. Balachandar, W. C. Moore, G. Akiki, K. Liu, 《运用机器学习和成对相互作用扩展点颗粒（PIEP）近似，在欧拉–拉格朗日多相流模拟中实现颗粒分辨级精度》，理论与计算流体力学 34 (4) (2020) 401–428。doi: 10.1007/s00162-020-00538-8。URL https://doi.org/10.1007/s00162-020-00538-8[49] D.-A. Clevert, T. Unterthiner, S. Hochreiter, 《通过指数线性单元（ELU）实现快速且精确的深度网络学习》(2015)。doi:10.48550/ARXIV.1511.07289。URL https://arxiv.org/abs/1511.07289[50] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, S. Ghemawat, I. Goodfellow, A. Harp, G. Irving, M. Isard, Y. Jia, R. Jozefowicz, L. Kaiser, M. Kudlur, J. Levenberg, D. Mane, R. Monga, S. Moore, D. Murray, C. Olah, M. Schuster, J. Shlens, B. Steiner, I. Sutskever, K. Talwar, P. Tucker, V. Vanhoucke, V. Vasudevan, F. Viegas, O. Vinyals, P. Warden, M. Wattenberg, M. Wicke, Y. Yu, X. Zheng, 《TensorFlow：异构分布式系统上的大规模机器学习》(2016)。doi:10.48550/ARXIV.1603.04467。URL https://arxiv.org/abs/1603.04467[51] L. Wood, Z. Tan, S. Ian, S. Zhu, F. Chollet 等，KerasCV, https://github.com/keras-team/ keras-cv (2022)。[52] T. Dozat, 《将 Nesterov 动量融入 Adam》，载于：第4届国际学习表征会议论文集，2016年，第1–4页。[53] M. A. van der Hoef, R. Beetstra, J. A. M. Kuipers, 《格子玻尔兹曼模拟：流体以低雷诺数流经单分散和双分散球体阵列——渗透率与阻力的结果》，流体力学杂志 528 (2005) 233–254。doi:10.1017/S0022112004003295。[54] R. Beetstra, M. A. van der Hoef, J. A. M. Kuipers, 《流体以中等雷诺数流经单分散和双分散球体阵列时的阻力》，美国化学工程师学会期刊 53 (2) (2007) 489–501。doi:https: //doi.org/10.1002/aic.11065。URL https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.11065[55] X. Yin, S. Sundaresan, 《低雷诺数多分散气固悬浮体系中的流体-颗粒曳力》，美国化学工程师学会期刊 55 (6) (2009) 1352–1368。doi:https://doi.org/10.1002/aic.11800。URL https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.11800[56] S. Sarkar, M. van der Hoef, J. Kuipers, 《通过多分散随机球体阵列的流动：基于格子玻尔兹曼模拟的流体-颗粒相互作用》，Chemical Engineering Science 64 (11) (2009) 2683–2691。doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.02.045。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250909001511[57] W. Holloway, X. Yin, S. Sundaresan, 《惯性多分散气固悬浮体系中的流体-颗粒曳力》，美国化学工程师学会期刊 56 (8) (2010) 1995–2004。doi:https://doi.org/10.1002/aic.12127。URL https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.12127[58] F. Cello, A. Di Renzo, F. P. Di Maio, 《多分散悬浮体系中阻力和流体-颗粒相互作用的半经验模型》，Chemical Engineering Science 65 (10) (2010) 3128–3139。doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.02.006。

URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250910000722[59] L. Rong, K. Dong, A. Yu, 《格子玻尔兹曼模拟：流体流经球体填充床——粒径分布的影响》, Chemical Engineering Science 116 (2014) 508–523。doi:https: //doi.org/10.1016/j.ces.2014.05.025。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250914002358[60] M. Mehrabadi, S. Tenneti, S. Subramaniam, 《流体-颗粒曳力模型对于预测双分散气固流动中的偏析的重要性》, International Journal of Multiphase Flow 86 (2016) 99–114。doi:https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.07.006。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932216300738[61] F. Duan, L. Zhao, X. Chen, Q. Zhou, 《低雷诺数双分散气固悬浮液中的流体-颗粒曳力和颗粒间曳力》, Physics of Fluids 32 (11) (2020) 113311。doi:10.1063/5. 0023874。URL https://doi.org/10.1063/5.0023874[62] G. Akiki, T. L. Jackson, S. Balachandar, 《单分散球形颗粒阵列中的力变化》, Phys. Rev. Fluids 1 (2016) 044202。doi:10.1103/PhysRevFluids.1.044202。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.1.044202

图目录

1 使用 PR-DNS 获得的各案例中大球和小球的 F_x 分布比较.9 2 本研究所用的物理信息神经网络架构。. . . . . 123 R^2 分数：随着物理信息神经网络模型中包含的邻居数量 M增加，对 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 进行比较。基于该收敛性研究，我们分别为力和扭矩预测选择 $M = 50$ 和 $M = 20$ .14 4 模型训练过程中 Huber损失的变化。从左至右： F_x、 F_L 和 $T_\perp$.15 5 使用我们的 PR-DNS 和物理信息神经网络预测获得的 F_x、 F_L 和 $T_\perp$ 比较.17 6 使用在整合数据集上训练的物理信息神经网络模型，对未见数据（绿色点）进行预测（红色点和蓝色点分别表示大球和小球）.21 7 通用模型的训练。(a) 使用我们的 PR-DNS 和通用物理信息神经网络预测获得的 F_x 比较。左：大球；右：小球。(b) 对所有参数进行插值.248 F_x 不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的贡献.269 F_L 不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的贡献.2710 $T_\perp$ 不同相互作用模式下最近邻对参考粒子的贡献.28 11 不同相互作用模式下，最近邻固定在上游位置时第二近邻对参考粒子的贡献。. . 30