PIVONet：一种用于高效平流-扩散流体模拟的物理信息变分神经常微分方程模型

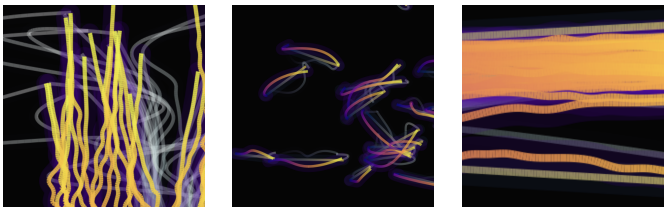
Hei Shing Cheung多伦多大学工程科学系多伦多，加拿大
h
ays
on.cheung@mail.utoronto.ca

Qicheng Long多伦多大学工程科学系多伦多，加拿大
ethan.long
@mail.utoronto.ca

Zhiyue Lin多伦多大学工程科学系多伦多，加拿大
davidlzy.lin@mail.utoronto.ca

arXiv:2601.03397v1 [cs.CE] 6 Jan 2026

摘要—**我们提出 PIVONet（物理信息变分常微分方程神经网络），一个将神经常微分方程与连续归一化流相结合的统一框架，用于随机流体模拟与可视化。首先，我们证明，经连续归一化流参数θ参数化的物理信息模型可以通过离线训练，为特定流体系统构建高效的代理模拟器，无需显式模拟完整动力学。其次，通过引入参数为 ϕ 的变分模型，以捕获观测到的流体轨迹中的潜在随机性，我们将网络输出建模为变分分布，并优化路径式证据下界，从而实现随机常微分方程积分，以捕捉流体运动（平流-扩散行为）中的湍流和随机波动。**



(a) (b) (c)

图 1. 叠加在真实值上的生成流动轨迹：(a) 涡旋剪切下的目标匹配，(b) 稀疏粒子区域，以及 (c) 流动分离。

I. 引言

流体中粒子的运动受底层流场与热效应或湍流所引起的随机扰动之间复杂相互作用的支配 [1]。传统计算流体力学（CFD）方法能够提供高保真仿真，但用于实时预测或大规模参数研究时，计算成本往往高得难以承受。

虽然我们的数据来自由流体力学方程控制的粒子轨迹的近似计算仿真，但我们借此探索潜在动力学模型能否捕捉非层流状态下的关键流动特征，包括平流–扩散、湍流和流动分离。我们的目标是评估此类模型能否高效预测二维流体流动中的粒子轨迹。我们提出了一种计算上易于处理的替代方案，适用于传统计算流体动力学方法难以应用的场景。

尽管我们的模型仅在有限的一组流动条件下进行训练，但它表明，潜在表征能够捕捉这一范围内的关键模式。虽然我们并未声称模型具有广泛的泛化能力，但这为未来构建更广泛的协变量条件化泛化奠定了基础。

II. 背景

A. 控制平流-扩散方程

我们使用过阻尼朗之万方程对粒子轨迹进行建模，该方程能够捕捉平流-扩散物理，同时保持计算上的可行性 [2]。位置$\mathbf{x}_t = (x_t,\ y_t) \in \mathbb{R}^2$ 按以下规律演化：

$$d\mathbf{x}_t = \mathbf{u}(\mathbf{x}_t)\,dt + \sqrt{2D}\,d\mathbf{W}_t \tag{1}$$

这是一个随机微分方程，其中$\mathbf{u}(\mathbf{x}_t)$[1] 是局部流体速度场（图 2a），D 是扩散系数，而$\mathbf{W}_t$ 是二维布朗运动，并忽略惯性效应。

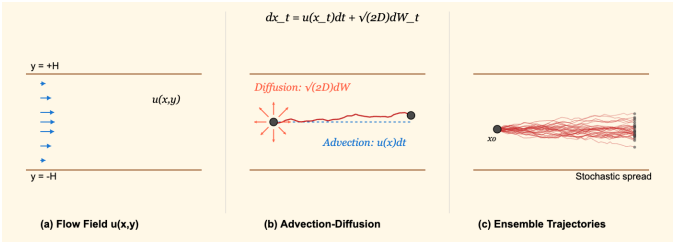


图 2. **朗之万动力学：流体流动中的粒子运动。**朗之万方程 $dx_t = u(x_t)dt + \sqrt{2D}dW_t$ 支配着粒子在流体流动中的运动。(a) 泊肃叶速度剖面。(b) 单个粒子的轨迹。(c) 从相同初始条件出发的多个随机实现。

式（1）中的随机微分方程将粒子运动分解为沿流线的确定性平流和随机扩散（图 2b）。该方程采用欧拉-丸山方法离散化：

$$\mathbf{x}_{t+\Delta t} = \mathbf{x}_t + \mathbf{u}(\mathbf{x}_t)\,\Delta t + \sqrt{2D\,\Delta t}\,\boldsymbol{\xi}, \quad \boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}) \tag{2}$$

[1]获取 u的模拟将在第 IV-B 节中讨论

在 $y = \pm H$ 处具有反射边界。这在数学上类似于表示为以下形式的线性常微分方程的晶格扩散系统

$$\mathbf{x}'(t) = kA\mathbf{x}(t) \tag{3}$$

其端点为反射端点，特征值结构决定了长期平衡行为 [3]。

该过程的随机性导致粒子轨迹具有变异性，即使初始条件相同也是如此（图 2c），这与经典弥散理论相符 [4]。对于每条轨迹，我们记录初始条件 $\mathbf{x}_0$, 流动参数 α，以及序列 $\{\mathbf{x}_t\}_{t=0}^{T}$。

本文使用的流动剖面见附录 A 中的图 9。

B. 归一化流

对于轨迹建模，连续归一化流（CNF）将变换视为常微分方程 [5], [6]。这一方法建立在更早的离散流生成模型之上，例如最初用于密度估计和变分推断的 NICE [7], 、RealNVP [8], 和 Glow [9], [10]。

$$\frac{d\mathbf{z}(t)}{dt} = g_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{z}(t), t), \quad \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0, \quad \mathbf{z}(1) = \mathbf{x} \tag{4}$$

对数密度根据瞬时变量变换公式 [5]演化：

$$\frac{d \log p(\mathbf{z}(t))}{dt} = -\mathrm{tr}\left(\frac{\partial g_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \mathbf{z}}\right) \tag{5}$$

该方程跟踪粒子流经学习到的变换时概率质量如何压缩或膨胀。雅可比矩阵的迹对应于速度场的散度，并决定局部密度的膨胀或收缩。对于我们的粒子轨迹，这使模型能够学习轨迹汇聚的位置（例如流线等高概率区域），以及轨迹分散的位置（受强扩散影响的低概率区域） [6]。

C. 双向性与训练

由于我们将两个分布之间的映射建模为微分同胚，因此连续归一化流具有双向性这一优势：我们可以对常微分方程系统进行正向积分（从简单的 $\mathbf{z}_0 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$ 到复杂的轨迹分布），也可以进行反向积分（从观测到的轨迹到其潜在表示）。正向过程通过采样生成新的轨迹，而反向过程则计算精确似然，用于训练 [10]。图 3 展示了这种双向变换，说明初始的高斯分布如何经过中间时间步长演化为由流参数条件化的复杂多模态粒子轨迹分布。公式 (4)–(5) 中的常微分方程系统通过自适应求解器联合求解，使我们能够计算学习得到的分布下任意轨迹的精确似然——这对于训练和不确定性量化至关重要 [9]。

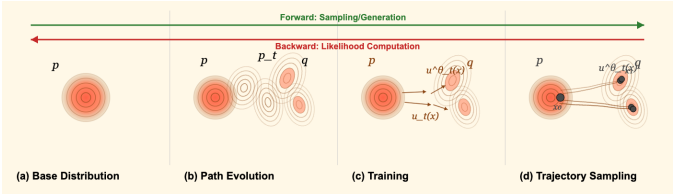


图 3. **用于粒子轨迹预测的连续归一化流**。连续归一化流通过学习到的速度场 $u_t(x)$ (c)，将简单的高斯基分布 p (a) 经由中间分布 (b) 转换为复杂的轨迹分布 q。在采样过程中 (d)，粒子沿随机路径从初始位置 x_0 移动到预测位置 x_1，从而同时捕捉确定性流和扩散行为。

我们通过拼接或特征级变换，以$\mathbf{x}_0$ 和流参数 $\{U_0, \gamma, U\mathrm{max}\ H,\ D,\ \ldots\} \subset \boldsymbol{\alpha}$ 为条件。模型通过最大化对数似然进行训练：

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\mathrm{data}}} \left[\log p_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x} \mid \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\alpha})\right] \tag{6}$$

推理时，我们从 $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 中采样，并应用 $\hat{\mathbf{x}} = f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{z}; \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\alpha})$，以获得预测轨迹，而无需重新运行仿真。该框架同时捕捉确定性流驱动行为和随机变异性，从而能够进行概率轨迹预测。

III. 模型

A. 神经微分方程骨干

我们训练一个连续归一化流（CNF），使其继承流 [5], [6] 的骨干动力学。CNF 生成具有表达能力的漂移项 $f_\theta(z)$，用于编码训练数据集的物理规律；而 VSDE 则通过加入随机扩散和控制来扩展该模型，以匹配观测轨迹。随后，我们将 CNF 视为冻结模块，仅学习额外的控制信号 $u(z,\ t)$ 和扩散系数 g，从而在推理过程中保持基础物理规律不变，同时提供灵活性。因此，加入 VSDE 路径等效于为建模常微分方程添加非齐次随机强迫项，使学习到的控制和扩散能够吸收数据集特定偏差，而不破坏预训练漂移。

$$\mathrm{d}z = f_\theta \, \mathrm{d}t + g_\phi \, \mathrm{d}W_t \tag{7}$$

这里，控制 $u(z,\ t)$ 和扩散系数 g 充当学习到的强迫项，而 $\mathrm{d}W_t$ 表示编码随机性的布朗增量。

通过添加变分组件，模型在重建同一输入时往往会探索不同的路径；这使模型具有更高的稳定性，因为它更有可能保持在学习到的流形上，而且当轨迹开始偏离时，变分组件可以帮助将其拉回。

B. 架构

输入轨迹首先由轨迹编码器进行编码，生成紧凑的后验上下文向量。该上下文向量用于初始化代理后验 $q(z_0 \mid x)$，并

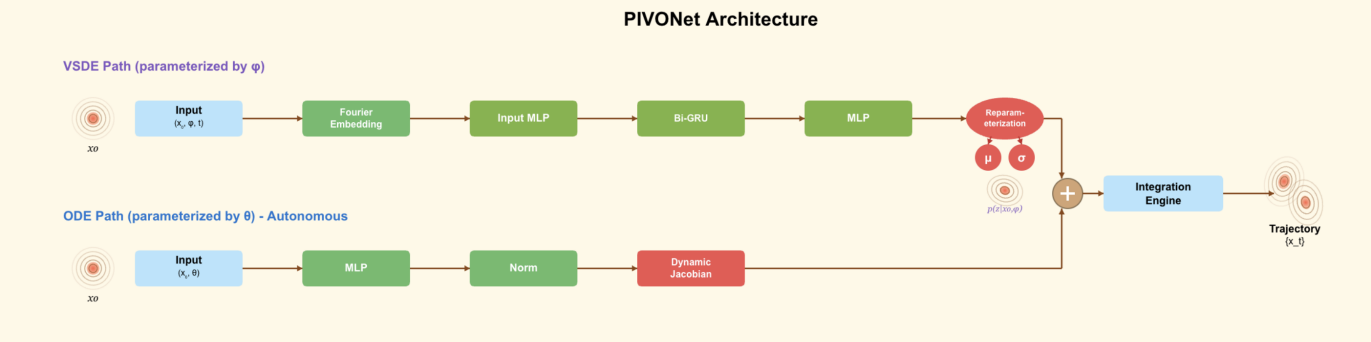


图 4. Th e VSDE 框架将冻结的 CNF 主干网络与学习得到的后验控制及物理信息损失结合起来。

作为后验漂移网络的条件。该后验漂移网络采用带有傅里叶时间嵌入的多层感知机实现，输出控制向量 u以及可选的扩散修正 [11]。随后，变分随机微分方程积分器将固定的连续归一化流漂移、学习得到的控制和布朗扩散结合起来，生成潜在轨迹，并将其映射回原始空间，以进行重构和诊断（见图 4）。

C. 激活函数

VSDE 控制多层感知机在每个隐藏层中使用高斯误差线性单元（GELU），这种单元融合了线性与非线性特性，并保持梯度平滑，使控制信号随潜在状态逐渐变化。GRU 编码器在重置门和更新门中使用 Sigmoid 激活，在候选隐藏状态中使用双曲正切非线性；这种组合确保门的输出保持在 $[0, 1]$，并使循环动力学保持有界，同时仍能对输入进行非线性变换，这也说明了为何这些激活函数适用于时间序列建模和函数逼近。

D. 变分推断

我们通过从 $q(z_0 \mid x)$中采样 $n_{\text{particles}}$ 个潜在初始值，并将每个样本通过 VSDE [10]进行积分，来执行变分推断。证据下界分解为重建似然（由观测噪声 σ_{obs}驱动）、将后验锚定至标准正态分布的 KL 散度，以及惩罚过大控制作用的控制成本。下文所述的基于能量的惩罚项会被加入该目标，以引导潜在轨迹趋向符合物理规律的行为。采样使用重参数化技巧：

$$z_0 = \mu + \sigma \odot \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, I), \tag{8}$$

这样，在反向传播损失以优化神经网络时，梯度便能流经编码器参数（μ，σ）。ELBO 关于参数 θ 的梯度为

$$\nabla_\theta \mathcal{L} = \mathbb{E}_{q(z_0|x)} \left[\nabla_\theta \log p(x \mid z) - \lambda_{\text{KL}} \nabla_\theta \log q(z_0 \mid x) + \cdots \right], \tag{9}$$

其中省略号表示控制损失和物理规律损失的导数，期望值则通过我们的粒子近似。伴随法确保通过变分随机微分方程积分器计算的梯度仍然易于处理。

E. 训练

1) 优化路径：我们使用 CNF 内置的伴随灵敏度法，通过积分器进行反向传播。VSDE 积分器是可微的，因为我们固定时间网格，并在添加扩散项之前进行确定性更新。优化器会同时更新后验漂移网络权重、扩散对数参数和后验编码器。

2) 动态雅可比矩阵：由于 CNF 定义了瞬时速度场，我们可以在训练期间计算组合漂移相对于 z 的雅可比矩阵。计算 KL 散度和控制成本项，以及确保 CNF 与后验漂移耦合时的稳定性，都需要这个雅可比矩阵。

3) 物理损失函数：我们在 ELBO 中加入两种互补的物理感知损失，使 VSDE 潜在路径符合守恒量和已知的偏微分方程结构。第一种损失通过沿每条轨迹计算 $\frac{1}{2}\rho\|z_{t+1} - z_t\|^2$ 来跟踪动能波动，并惩罚与平滑的平流主导物理规律相悖的突变；它通过对潜在速度进行有限差分，将相邻时间步联系起来。第二种损失通过离散化时间导数（采用向后差分）并利用 CNF 解码器估算空间梯度，来约束可压缩能量方程 $\rho c_p(\partial_t T + u \cdot \nabla T) = k\nabla^2 T + \Phi$的残差；惩罚该残差可引导扩散项和控制项在期望意义下满足热力学平衡。每一项都先对粒子取平均，再加入损失函数中；我们使用 λ_{phys} 和 λ_{pde} 对其进行缩放，使模型能够在重建保真度与这些物理正则项之间权衡。

4) 联合证据下界：最终损失函数为

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = -\mathbb{E}_{q(z_0|x)} \left[\log p(x \mid z)\right] + \lambda_{\text{KL}} \text{KL}(q(z_0 \mid x) \| p(z_0)) \\ + \lambda_u \mathcal{L}_{\text{control}} + \lambda_{\text{phys}} \mathcal{L}_{\text{energy}} + \lambda_{\text{pde}} \mathcal{L}_{\text{balance}}.\end{aligned} \tag{10}$$

本研究改为手动选择 KL散度、控制和物理惩罚项的权重，以兼顾数值稳定性与富有表现力的控制，而非通过穷举式网格搜索来确定。

5）超参数与优化器：训练使用 Adam优化器，并采用 [12], 中所述的权重衰减（AdamW）和余弦学习率退火。学习率调度在前 2k 步进行预热，随后逐渐衰减至 1e-5。控制成本尺度和扩散系数的初始设置旨在鼓励低方差轨迹，而物理权重则从接近零的值开始，以防梯度不稳定。

F. 推理

1) 联合*ODE*积分： 推理阶段从编码器中采样以获得后验上下文，然后对控制和扩散共同进行VSDE积分，从而生成潜在轨迹。随后通过连续归一化流解码输出，以重建可观测变量，同时借助粒子集成保留不确定性量化结果。

2) 积分方法： 我们为动力学的确定性部分提供欧拉法、Heun方法、四阶龙格–库塔法和Dormand–Prince方法积分器。扩散始终通过Euler–Maruyama方法（2）加入。推理API允许选择积分器和扩散尺度，以便实验在精度与速度之间进行权衡；不过，实证结果表明，在我们的应用中，不同积分器的精度差异很小。

G. 推理期间的防护机制

当轨迹接近无效状态时，特殊处理逻辑会限制控制量并强制施加吸收边界，从而防止数值爆炸。如果某条轨迹偏离训练流形，则在证据下界计算中降低其权重，以便将优化重点放在有效样本上。我们通过定义一个软有效性指示函数将其形式化

$$\gamma(z) = \exp\left(-\alpha \max\left(\|z\| - R, 0\right)^2\right), \tag{11}$$

其中， R 是从训练状态中提取的半径， α控制样本被降低权重的幅度。编码器权重在求平均之前会乘以 $\gamma(z)$，并且后验控制会根据以下规则进行截断

$$u_{\text{clamp}} = \text{sign}(u) \min\left(|u|, u_{\max}\right), \tag{12}$$

从而确保即使在外推时，VSDE 也无法注入无界漂移。

H. 算法描述

算法1概述了 PIVONet 完整的训练和推理流程。该方法首先预训练一个连续归一化流（CNF）骨干网络，然后通过加入变分随机微分方程（VSDE）控制器来捕捉随机动力学。

算法1PIVONet：神经网络训练

需要： 训练轨迹 $\{x^{(i)}\}_{i=1}^{N}$、流参数 α，
时间网格 $\{t_k\}_{k=0}^{T}$、学习率 η

阶段1：连续正规化流预训练
随机初始化 θ
重复
采样小批量 $\mathcal{B}$；采样 $z^{(i)} \sim \mathcal{N}(0, I)$
$\hat{x}^{(i)} \leftarrow f_\theta(z^{(i)}, \alpha)$；计算 $\mathcal{L}_{\text{CNF}} = \frac{1}{B}\sum_i \|x^{(i)} - \hat{x}^{(i)}\|_2^2$
通过 Adam 更新 θ
直到连续归一化流收敛
冻结 θ 以获得 $f_\theta(\cdot)$
阶段 2：VSDE 训练
随机初始化 ψ, ϕ, g
重复
采样小批量 $\mathcal{B}$；计算 $(\mu, \sigma) \leftarrow$ 编码器$\psi(\mathcal{B})$
对于 $j = 1$ **到** n_p，**执行**
$z_0^{(j)} \leftarrow \mu + \sigma \odot \mathcal{N}(0,\ I)$
对于 $k = 0$ **到** $T-1$，**执行**
$(u_k^{(j)},\ \tilde{g}_k^{(j)}) \leftarrow$漂移网络$\phi(z_k^{(j)},\ t_k,\ (\mu,\ \sigma))$
$z_{k+1}^{(j)} \leftarrow z_k^{(j)} + f_\theta(z_k^{(j)})\Delta t + u_k^{(j)}\Delta t + \tilde{g}_k^{(j)}\Delta W_k$
结束循环
结束循环
计算： $\mathcal{L}_{\text{recon}},\ \mathcal{L}_{\text{KL}},\ \mathcal{L}_{\text{control}},\ \mathcal{L}_{\text{energy}},\ \mathcal{L}_{\text{pde}}$
$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{recon}} + \lambda_{\text{KL}}\mathcal{L}_{\text{KL}} + \lambda_u\mathcal{L}_{\text{control}} + \lambda_{\text{phys}}\mathcal{L}_{\text{energy}} + \lambda_{\text{pde}}\mathcal{L}_{\text{pde}}$
通过 Adam 更新（$\psi,\ \phi,\ g$）
直到 证据下界收敛

IV. 实验方法

A. 假设

该实验旨在检验以下假设：
1）使用基于神经常微分方程的生成模型，可以有效捕捉复杂的流体动力学。
2）将 VSDE控制器与 CNF骨干网络相结合，可增强模型表征流体流动中随机行为的能力。3）所提出的框架能够推广到不同的流动状态，包括无黏、有黏和不可压缩情形。

B. 数据模拟

为生成用于训练和评估连续归一化流（CNF）与随机微分方程（SDE）模型的高保真、时间分辨流场，我们采用开源 PyFR 框架作为数值模拟引擎 [14]。PyFR 是一个基于 Python 的计算流体力学（CFD）平台，采用通量重构方法实现高阶精度的空间离散化，并能够在异构硬件架构上使用非结构网格求解可压缩纳维–斯托克斯方程。

PyFR 编排的规格说明见附录 B。

可压缩流体流动的控制守恒定律表示为：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}), \tag{13}$$

其中，$\mathbf{U}$表示守恒变量向量，$\mathbf{F}$ 和$\mathbf{F}_v$ 分别表示无黏通量和有黏通量，右侧则包含黏性输运项。

PyFR 中的空间离散化采用高阶通量重构格式，将空间导数替换为在计算网格上定义的解点和通量点处计算的离散代数算子。空间算子离散化后，偏微分方程（PDE）系统被化简为一个大型常微分方程（ODE）系统：

$$\frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}(t)), \tag{14}$$

其中，$\mathbf{u}(t)$ 是由各节点上的密度、动量和能量组成的所有离散流动变量的向量，而$\mathbf{f}$ 则封装了半离散通量和源项近似。PyFR 使用适用于高阶方法的显式时间积分格式推进该系统。

由于所得解仍编码了守恒量，因此将其作为我们物理规律约束损失函数的参照。随后，我们从离散状态计算变换后的温度场和速度信号，并对热能方程的残差进行惩罚

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = k \nabla^2 T + \Phi, \tag{15}$$

该方程平衡了时间变化和对流加热与热传导及黏性耗散。这为变分自编码器加入了基于偏微分方程的约束，且该约束与可压缩流模拟数据一致。

C. 流动算例

我们在三种具有不同流动特性和复杂度的典型流体动力学场景中评估了我们的框架：

- **2D 欧拉涡：** 该案例涉及模拟由欧拉方程描述的无黏流体中的二维涡旋。涡旋动力学用于检验模型捕捉旋转流动特征并随时间保持涡量守恒的能力。

- **黏性激波管：** 该场景模拟黏性介质中激波和接触间断的演化。激波管问题考验模型准确表示黏性流动中陡峭梯度和耗散效应的能力。

- **不可压缩圆柱流：** 该案例研究不可压缩流体绕圆柱流动的情况。圆柱绕流问题用于评估模型捕捉边界层发展、涡脱落和尾流动力学的能力。

各流动案例的具体配置，包括计算域尺寸、网格分辨率、初始条件和边界条件，以及物理参数（例如雷诺数、马赫数），详见本文配套的代码仓库。此外，下面简要概述各个场景的控制方程和数值设置。

a) 二维欧拉涡：二维欧拉涡由无黏欧拉方程控制，该方程描述无黏性可压缩流体中的质量、动量和能量守恒。其控制方程以守恒形式表示如下：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0, \tag{16}$$

其中$\mathbf{U}$ 是守恒变量向量，$\mathbf{F(U)}$表示通量张量。初始条件由叠加在均匀流场上的高斯涡构成。计算域采用具有周期性边界条件的结构化网格进行离散。

b) 黏性激波管：黏性激波管问题由可压缩纳维–斯托克斯方程控制，该方程除考虑质量、动量和能量守恒外，还考虑黏性效应。控制方程如下：

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}), \tag{17}$$

其中，$\mathbf{F}_v\mathbf{(U}\ \nabla\mathbf{U)}$表示黏性通量张量。初始条件由相邻的高压区和低压区构成，两者之间由隔膜隔开。计算域采用非结构网格离散，管壁处施加反射边界条件。

c) 不可压缩圆柱绕流：不可压缩圆柱绕流由不可压缩纳维–斯托克斯方程控制，该方程描述不可压缩流体中的质量守恒和动量守恒。控制方程表示为：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{18a}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \tag{18b}$$

其中，$\mathbf{u}$ 表示速度场，p 表示压力场，ν 表示运动黏度。初始条件为均匀流场冲击圆柱。计算域采用非结构网格离散，圆柱表面施加无滑移边界条件，计算域边界处施加远场条件。

D. 实验工作流

下面所述的经验流程适用于多个流动案例（二维欧拉法涡旋、有黏激波管和不可压缩圆柱），其配置均记录在代码库中。附录 C 详细介绍了软件实现，其中包含定义明确、与以下步骤相对应的工作流模块。训练超参数见 D

1) **轨迹模拟：** 粒子以变化的 Δt 进行 240 步推进，生成轨迹集合、速度快照和网格坐标，供后续模块重复使用。2) **CNF 主干网络训练：** CNF 漂移网络基于轨迹端点进行训练。

3) **VSDE 控制器训练：** 冻结 CNF 后，变分后验漂移网络对轨迹进行优化。4) **推理诊断：** 对包含 64 个粒子、跨越 120 步的集成进行解码和绘图，并同时展示评估指标。

E. 训练与实验指标

数据通过 Google Colab 提供的 80 GB NVIDIA H100 GPU 集群，在 Google Cloud 平台上以数据包的形式进行模拟。训练使用 Apple M 系列芯片（MPS 后端），使 CNF 和 VSDE 模块在缓存的轨迹数据包上各自在约 15 分钟内完成；我们在前 1k 步进行学习率预热，并采用 AdamW 与余弦退火来稳定收敛。计算流体力学轨迹被划分为训练和验证数据包，并着重涵盖涡旋阶段，使学习到的动力学聚焦于平流主导区域。

超参数值汇总于表 III、IV 和 V（附录 D）中。

F. 评估集

1) VSDE 与仅 CNF 动力学：我们在每种流动案例的留出数据包上测量重建精度，并报告 VSDE 增强的潜在路径以及基线仅含 CNF 的常微分方程。在欧拉涡、有黏激波管和不可压缩圆柱实验中，VSDE 始终能够提升均方根误差和似然表现：每当 CNF 开始偏离学习到的流形时，它便引导轨迹回归该流形。

2）积分器比较：通过叠加图和能量统计量化保真度，确认了每种流在欧拉法、Heun方法、四阶龙格–库塔法和Dormand–Prince方法积分器下的推理稳定性。调整 VSDE 扩散尺度后，所有积分器都达到了相近的精度，这表明学习到的控制主导了集成行为，而确定性积分器的选择对这些流动状态下的保真度仅有轻微影响。

V. 结果

本节展示了与第 IV-A 节所述假设相对应的实验结果。我们从模型表达能力、变分随机控制的作用、跨不同流动状态的泛化能力，以及不同常微分方程积分方案下的数值稳定性等方面评估所提出的 CNF–VSDE 框架。

模型性能主要通过所有评估场景中的平均绝对误差（MAE）进行量化。选择 MAE 是因为它具有良好的可解释性：它衡量预测误差的平均值，且单位与目标变量的物理单位相同，因此便于直接与真实流体轨迹进行比较。此外，MAE 提供线性误差度量，不会对较大的偏差施加不成比例的惩罚；在流体动力学应用中，相较于对罕见极端事件过度敏感，稳定的准确性更为可取。与平方误差指标相比，MAE 对湍流或数值噪声引起的偶发异常也具有更强的鲁棒性。

A. 用于流体动力学的常微分方程骨干网络的表达能力

我们首先评估不同的基于常微分方程的骨干模型在捕捉流体动力学方面的性能。总体而言，仅常微分方程方法能够学习主导性的平均流动行为，并生成平滑且符合物理规律的轨迹，与流动的大尺度结构相吻合。具体而言，齐次连续归一化流成功收敛到稳定解，反映了不可压缩圆柱流的主要确定性动力学。

然而，在对随机流体行为建模时，这种确定性反而成为一种限制。尽管模型隐式地学习了轨迹上的概率分布，但缺少潜变量限制了其表达能力。因此，学习到的动力学会收敛到一个占主导地位的模式，使模型过于保守，无法捕捉系统中存在的全部随机变化范围。这导致模型对真实数据中观察到的流动变化性和精细尺度随机性的表征不足。仅含 ODE 的模型的推理结果如图 5 所示。

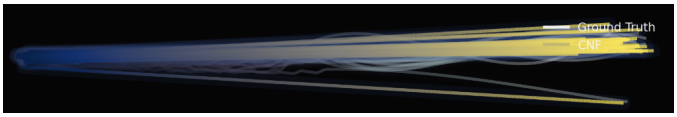


图 5. 仅含 ODE 的 CNF 模型在不可压缩圆柱流上的推理结果。预测轨迹叠加在真实流场实现上。尽管模型准确捕捉了整体平均流动结构，并生成平滑、稳定的轨迹，但预测结果趋于收敛为确定性解。这一现象凸显了模型无法表示随机变化和多模态流动行为，因此与真实动力学相比，生成结果的多样性有限。

此外，我们可以比较采用不同数值方法时的积分器性能。我们发现，对于 ODE 主干网络，使用欧拉法、四阶龙格–库塔法或 Dormand-Prince 方法作为积分器时，模型精度和稳定性均无显著差异。这表明学习到的动力学足够平滑且表现良好，因此欧拉法等低阶方法的表现可与高阶格式相当。因此，在此情形下，积分器的选择对模型捕捉流体行为的能力影响甚微。附录 A 的图 11 展示了积分器性能的比较。

B. 变分随机控制对轨迹保真度的影响

为提高与物理变化性的匹配度，我们评估了将变分随机微分方程（VSDE）控制融入连续归一化流主干网络的效果。该分析直接探讨随机增强是否能够提升轨迹保真度和不确定性表征。

图 6 展示了仅使用 CNF 的模型与 CNF–VSDE 模型之间平均绝对误差的空间比较。在所有空间区域中，VSDE 增强模型始终能实现更低的重建误差。这些改进表明，学习得到的后验控制能够主动补偿冻结的 CNF 漂移所引入的偏差，尤其是在随机效应显著的区域。

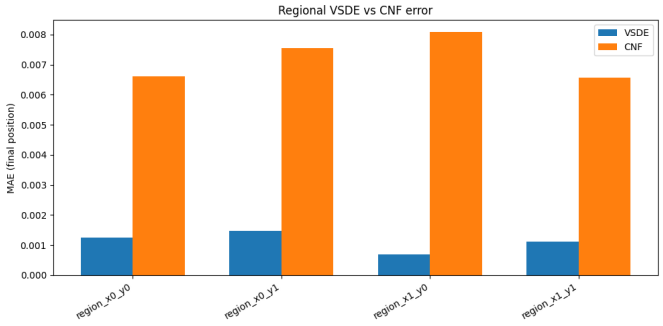


图 6. CNF-only 模型与 CNF–VSDE 模型的区域平均绝对误差（MAE）对比，结果显示 VSDE 在所有空间区域的误差始终较低。

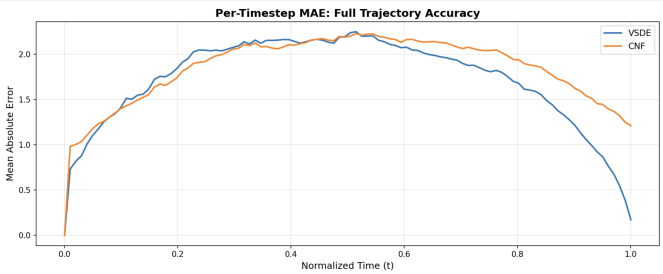


图 7. CNF-only 模型与 VSDE 模型的集成轨迹行为对比。CNF-only 模型生成的轨迹相对确定，而 VSDE 框架生成的集成则呈现出符合实际的弥散。尽管 VSDE 模型起初难以准确表征湍流主导区域和剪切主导区域，但其轨迹与计算流体力学真实值中观察到的随机行为相符。

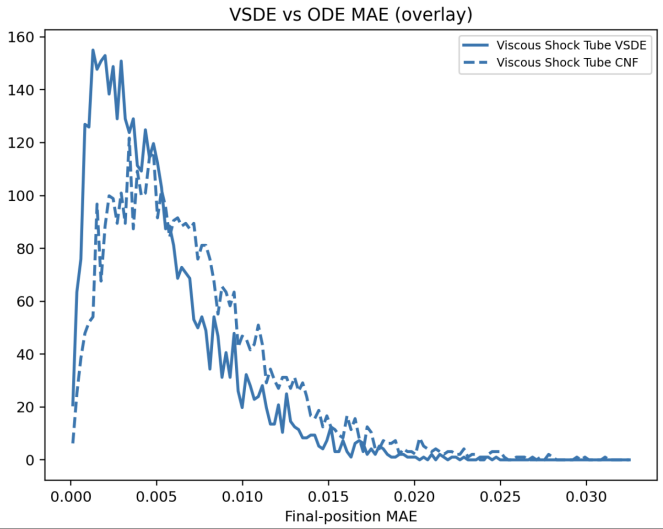


图 8. 黏性激波管的最终位置平均绝对误差分布。相较于 CNF-only 模型，VSDE 控制使误差分布向较低值偏移，表明轨迹保真度有所提升，同时未牺牲集成多样性。

C. 速度空间动力学中的物理一致性

通过比较速度相空间结构和速率分布，进一步评估物理一致性计算流体力学参考统计数据。如图 10 所示，真实速度场在 (v_x, v_y) 空间中呈现显著的各向异性，且具有宽广的非高斯速率分布，这是早期剪切和湍流驱动流的典型特征。

CNF–VSDE 模型成功再现了这些速度空间模式，并保留了粒子速率的经验分布范围。相比之下，仅 CNF 模型将轨迹压缩到速度空间中更狭窄的区域，表明其对物理变化性的表征不足。这些结果表明，变分随机控制使模型能够捕捉具有物理意义的速度分布，而非仅仅近似平均输运行为。

生成轨迹叠加图见附录 A 图 10。

VI. 讨论

A. 连续归一化流与变分随机微分方程的结构作用

我们提出的框架将学习动态分解为两个互补组件：由连续归一化流（CNF）实现的确定性、齐次骨干常微分方程，以及由变分随机微分方程（VSDE）实现的随机、非齐次校正过程。我们的 CNF 实现定义了一个全局的、时间条件化的速度场，如下所示

$$\frac{dz}{dt} = f_\theta(z, t, \alpha)$$

其中，漂移场 f_θ 由全局参数化，并在具有相同流参数条件的所有轨迹之间共享。CNF 实现利用这种确定性常微分方程，在给定条件上下文下定义一个单一且全局光滑的流映射。一旦参数和上下文固定，对于每个初始条件，该常微分方程都有唯一解，所有轨迹均在相同的时变向量场下演化。因此，从结构上看，CNF 倾向于捕捉流的平均平流行为，而非轨迹特定偏差。

这种表述非常适合学习全局一致的输运动力学，但当真实动力学呈现强烈的局部变化性时，它本质上会限制模型的表达能力。由于控制方程具有确定性，且在不同轨迹上保持齐次，学习到的向量场与真实动力学之间的局部偏差会沿流映射单调累积。连续归一化流动力学具有微分同胚性和稳定性，这些特性对于准确实现全局输运至关重要，但也限制了模型表示急剧转变、局部混合或轨迹依赖校正的能力。要引入这些效应，就必须重新定义全局向量场，这会损害学习到的流映射的平滑性和一致性。因此，连续归一化流缺乏在不牺牲其全局结构属性的前提下进行局部适应的机制。

VSDE 的设计明确旨在通过为 CNF 动力学增加依赖于轨迹的随机校正来解决这一限制。在每个积分步中，首先评估冻结的 CNF 漂移 $f_\theta(z,\ t)$，并将其与学习得到的

后验控制 $u_\phi(z,\ t,$ ctx) 结合，以形成总漂移。随后，在更新过程中注入带有时变标量系数 $g(t)$ 的布朗扩散：

$$dz = \left[f_\theta(z,t) + u_\phi(z,t,\mathrm{ctx})\right] dt + \sqrt{2\,g(t)}\,dW_t. \qquad (19)$$

控制项 u_ϕ 通过引入轨迹依赖的强迫，打破了连续归一化流动力学的齐次性。对于固定的 $(z,\ t)$，不同的后验上下文会产生不同的有效漂移。扩散项 $g(t)$为动力学引入受控方差，以便围绕确定性流进行随机探索，并减轻因漂移对齐不准确而导致的误差累积。这些项将控制方程从单一的确定性流映射转变为一系列由后验信息条件化的随机轨迹。由于骨干漂移 f_θ 保持不变，变分随机微分方程保留了连续归一化流学习到的全局流结构，同时在局部扰动动力学，以修正轨迹特定偏差。

这些结构差异在实证结果中清晰显现。在所有数值积分器下（见图 11），连续归一化流的最终位置平均绝对误差（平均绝对误差）始终高于变分随机微分方程。尽管积分器之间的差异可以忽略不计，这表明我们的模型学到了平滑、稳定的表示，而非过拟合其训练设置，但欧拉法、改进欧拉法、四阶龙格–库塔法和五阶多步龙格–库塔法下的误差差距始终存在，这说明误差的主要来源并非数值离散，而是控制动力学本身的结构。具体而言，连续归一化流常微分方程的确定性和齐次性导致了系统性误差累积，仅靠提高积分精度无法减轻这种误差。虽然前文图示展现了持续的定性改进，表 I 则量化总结了代表性流动状态下的误差降低情况。在所有情况下，相较于连续归一化流，变分随机微分方程均显著降低了最终位置平均绝对误差，各流动状态下的降幅均超过 80%，在激波主导的欧拉流动中更接近 96%。值得注意的是，这些提升在平滑流和高度非均匀流中均持续存在，证实观察到的改进并非求解器依赖，而是源于控制动力学的结构差异。

空间分辨误差分析进一步支持了我们对这一限制的讨论。如图 6 所示，连续归一化流在所有子区域中累积的误差都更大，其中最显著的差异出现在与陡峭梯度和激波驱动的动力学相关的区域。这些状态需要局部且针对特定轨迹的调整，而单一的全局流映射无法表示这些调整。变分随机微分方程显著降低了这些区域的误差，这验证了后验条件控制 u_ϕ 能够有效补偿单一均匀漂移场无法表示的局部动力学。

这一现象在终点误差的分布分析中也很明显。仅 CNF 模型呈现出宽广且重尾的平均绝对误差分布，表明沿轨迹存在系统性漂移和误差累积。与之叠加后，

表 I 连续归一化流与变分随机微分方程的平均绝对误差对比。

流动状态	连续归一化流平均绝对误差	变分随机微分方程平均绝对误差	降幅（%）
有黏激波	0.0711	0.0119	83.2
欧拉涡	1.5828	0.0659	95.8
不可压缩圆柱	1.7010	0.2646	84.4

VSDE 的结果显示，其分布明显更集中于零误差附近，反映出轨迹对齐效果有所改善。差值分布（图 8）明显集中在正值区域，表明对于大多数轨迹而言，CNF 的终点误差更高。小幅正偏移附近的显著峰值反映出 VSDE 带来的系统性改进，而非偶发或由离群值驱动的收益。相对较轻的尾部也进一步表明，与 CNF 相比，VSDE 并未引入显著的新失效模式或不稳定性。

B. 误差特征与来源

结果中观察到的主要误差模式源于控制微分方程固有的限制，而非数值离散。在连续归一化流公式中，学习到的漂移与真实动力学之间的微小局部偏差会沿确定性轨迹相干传播，从而导致系统性误差增长。这些影响在存在激波、扩散占主导以及空间梯度陡峭的区域最为明显，因为真实动力学表现出局部变异性，而全局平滑的流映射无法捕捉这种特征。在包括高阶求解器在内的各种数值积分方案中，这种误差仍持续存在，进一步证实这些偏差源于常微分方程公式中的结构偏差，而非数值精度不足。

变分随机微分方程通过在确定性骨干中加入加性随机校正来减少这些误差，但由于这种公式本身的固有限制，残余误差仍然存在。由于后验控制以加性方式介入，变分随机微分方程只能对确定性流进行局部扰动，而无法重新定义该流。因此，冻结骨干漂移中的较大结构性不匹配无法被完全消除，从而产生不可约误差下限。随机分量引入了随机微分方程动力学固有的偏差—方差权衡。扩散虽然带来了灵活性，并防止轨迹始终被困在错误的确定性路径上，但也会引入限制可达精度的方差。尽管随时间衰减的扩散调度能够抑制端点噪声，早期的随机扰动仍可能沿动力学向前传播。

VII. 结论

A. 贡献总结

本项目旨在利用高效的生成模型对物理表征进行建模，使其适用于流体建模中的各种应用，并能有效发挥作用。我们考察了连续归一化流在用于

对复杂的梯度变化动力学进行建模时存在的结构性限制，并展示了变分随机微分方程的形式如何克服这些限制。通过从控制方程的角度解读连续归一化流和变分随机微分方程，我们表明，确定性、均匀的流模型本质上容易产生系统性误差累积，而轨迹条件随机校正则能够实现局部适应，同时不牺牲全局一致性。多种积分方案和空间区域下的实证结果支持了这一解读；与连续归一化流相比，变分随机微分方程始终能够降低误差。随机分量带来了随机微分方程动力学固有的偏差—方差权衡。研究发现，已学习动力系统中的模型结构影响是决定结果表现和质量的关键因素，这也促使我们进一步探索对确定性基于流的模型进行随机扩展和受控扩展。

B. 未来工作

虽然 VSDE 通过对冻结的确定性漂移进行加性增强，有效纠正了轨迹层面的偏差，但当骨干动力学本身存在结构性失真时，这种表述方式固有地限制了模型的表达能力。在这种情况下，加性控制可能不足以捕捉底层流几何形状中的状态依赖变化。未来的探索可以进一步研究乘性控制或状态依赖控制机制，从根本上重塑控制动力学。所采用的随时间衰减的扩散调度并非基于现实且理论上最优的策略。未来工作可以研究自适应或学习得到的扩散调度，以便动态平衡不同时刻的随机探索与精度，从而在保持稳定性的同时提高准确性。

参考文献

[1] T. M. Squires 和 S. R. Quake，《微流控：纳升尺度的流体物理》，《现代物理评论》，第 77 卷，1026，2005年 977pp. – 。[2] D. L. Ermak 和 J. A. McCammon，《具有流体动力学相互作用的布朗动力学》，《化学物理学杂志》，第 69 卷，第 1352–1360 页，1978年。[3] R. L. Devaney 和 S. G. Krantz，《style id='8'>《微分方程：现代方法导论》。Brooks/Cole，第 2 版，2007年。[4] G. I. Taylor，《可溶物质在缓慢流经管道的溶剂中的扩散》，《伦敦皇家学会会刊：*A*辑》，第 219 卷，第 186–203 页，1953年。[5] R. T. Q. Chen、Y. Rubanova、J. Bettencourt 和 D. Duvenaud，《神经常微分方程》，载于《神经信息处理系统进展》*(NeurIPS)*，2018年。[6] W. Grathwohl、R. T. Q. Chen、J. Bettencourt、I. Sutskever 和 D. Duvenaud，《Ffjord：面向可扩展可逆生成模型的自由形式连续动力学》，载于国际机器学习会议 *(ICML)* 论文集，2019年。[7] L. Dinh、D. Krueger 和 Y. Bengio，《NICE：非线性独立成分估计》，载于*ICLR*研讨会专题，2014年。[8] L. Dinh、J. Sohl-Dickstein 和 Y. Bengio，《使用 Real NVP 进行密度估计》，载于国际学习表征会议 *(ICLR)* 论文集，2017年。[9] D. P. Kingma 和 P. Dhariwal，《Glow：具有可逆1×1卷积的生成流》，载于《神经信息处理系统进展》*(NeurIPS)*，2018年。[10] D. J. Rezende 和 S. Mohamed，《基于正规化流的变分推断》，载于第*32*届国际机器学习会议 *(ICML)* 论文集，2015年。

[11] I. Goodfellow、Y. Bengio 和 A. Courville，《style id='2'>深度学习。麻省理工学院出版社，2016年。[12] D. P. Kingma 和 J. Ba，《Adam：一种随机优化方法》，*arXiv* 预印本 *arXiv:1412.6980*，2015年。[13] K. Cho、B. van Merrienboer、C. Gulcehre、D. Bahdanau、F. Bougares、H. Schwenk 和 Y. Bengio，《使用 RNN编码器–解码器学习用于统计机器翻译的短语表示》，载于*EMNLP*，2014年。[14] F. D. Witherden、B. C. Vermeire、P. E. Vincent等，《PyFR v2.0.3：迈向尺度解析模拟的工业化应用》，*Computer Physics Communications*，第 311 卷，第 109567 页，2025年。[15] Ahrens、James、Geveci、Berk 和 Law、Charles，《ParaView》。https: // www.paraview.org/，2005年。5.11版。

附录 A
精选补充图

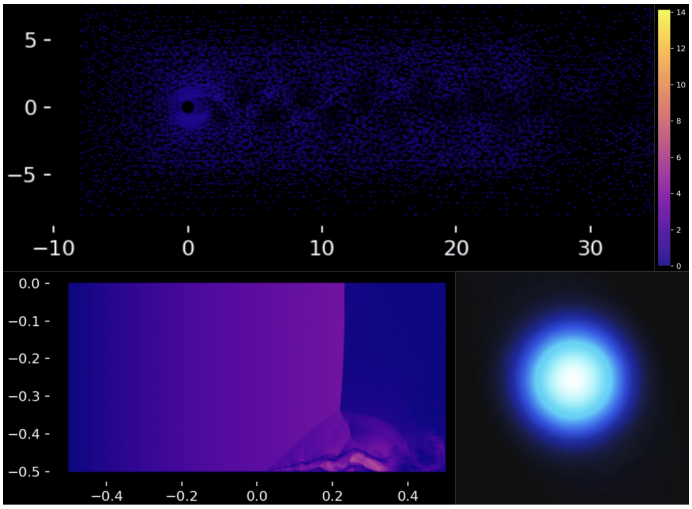


图 9. **轨迹生成的流动剖面**。 (a) 和 (b) 分别为右上方和右下方的速度剖面。(c) 位于右下方，是通过 ParaView [15] 可视化的压力剖面。(a) 激波管配置，显示了壁面附近的间断复杂行为。(b) 圆柱绕流，流体冲击圆柱后，在下游产生径向速度分布和振荡尾迹。(c) 欧拉涡，展示了具有中心线速度 $U_{\max}$的旋转剪切流。

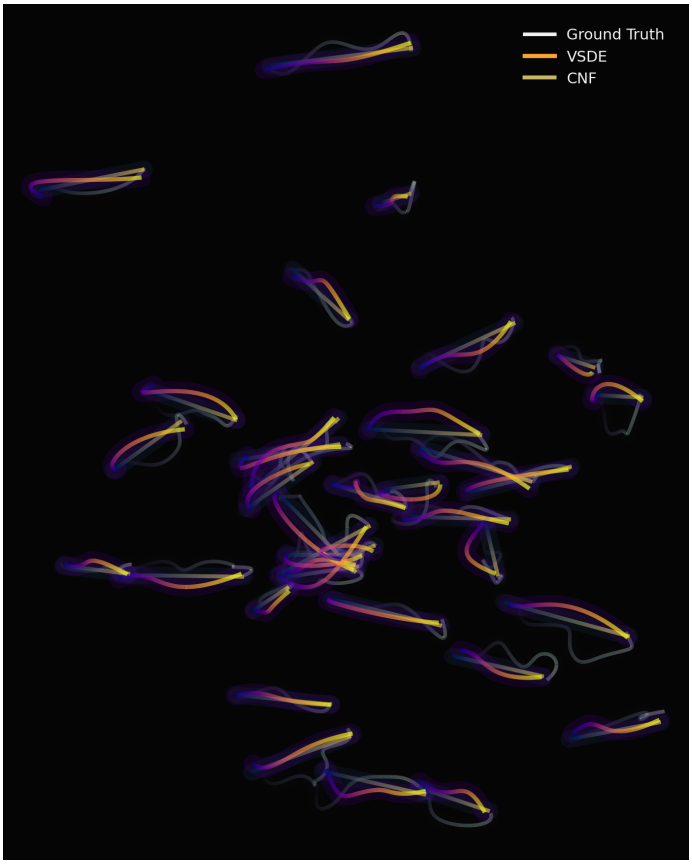


图 10. 黏性激波管轨迹重建的定性比较。真实粒子轨迹（灰色）与 CNF–VSDE 模型（紫色）和仅 CNF 模型（黄色）的预测结果叠加显示。VSDE 轨迹更贴近真实值的几何形状和弥散情况，尤其是在强曲率和剪切区域；而仅 CNF 模型则呈现累积漂移且变异性降低。

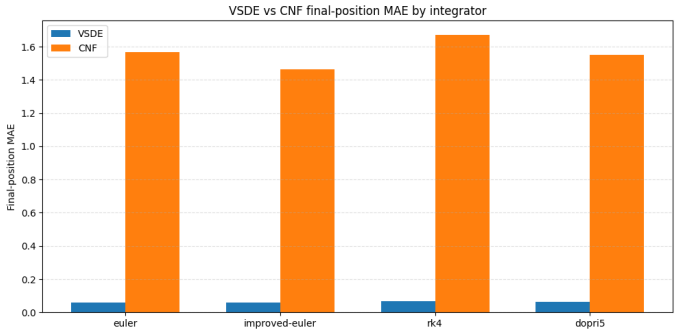


图 11. 比较仅含 ODE 的 CNF 模型在不可压缩圆柱流中的不同常微分方程积分器（欧拉法、Heun方法、四阶龙格–库塔法、Dormand-Prince 方法）的平均绝对误差（MAE）。结果表明，各积分器在准确性和稳定性方面的差异可以忽略不计，这说明学习到的动力学足够平滑，因此低阶方法的表现可与高阶格式相当。

附录 B PyFR 编排

仿真通过 Jupyter Notebook 环境进行编排，以便实现可复现的执行、自动化工作流控制、借助 CUDA 实现 GPU 加速，并与后续的后处理及数据集管理流程无缝集成。

仿真流程的输出是一组真实物理轨迹，表示流场变量随时间的演变。每次仿真均从网格文件（.msh）和求解器配置文件（.ini）开始初始化，前者定义计算域离散化，后者指定物理参数和时间积分设置；执行前，这些输入会转换为 PyFR 的内部格式。后处理将求解器状态输出转换为结构化数值数组，同时保留空间和时间上的连贯性，从而得到由式（13）所描述的连续时间动力系统的离散样本。这些数据集提供了用于训练和验证学习到的动力学模型的参考轨迹 [14]。

为支持结果的可复现性，所有数据、模拟脚本和配置文件均随附于相应的 GitHub 代码仓库中。

所有代码都位于 github.com/haysonc/pivonet。克隆代码仓库、安装依赖项，然后按以下步骤运行 VSDE 模型：

1) 设置虚拟环境并安装依赖项：
python -m venv venv source
venv/bin/activate pip install -r 依赖项.txt

2) 使用 pivo 命令行界面编排训练/推理，或调用 flow 模块：

```
pivo
```

PyFR 数据集已上传至 Google 云端硬盘：https://drive.google.com/drive/folders/13ykGleAmZTNAz1lhR0x6FekYqyGYbper?usp=sharing。你可以下载并将其解压到代码仓库根目录下的 data/ 文件夹中。

示例代码仓库结构如下：

```
pivonet/├-- data/|       ├--
2d-euler-vortex/|       '-- ...├--
src/|       ├-- models/|       ├--
utils/|       '-- ... '--...
```

如需更详细的说明，请参阅代码仓库根目录中的 README.md。代码风格由 ruff 强制执行，并通过 pyproject.toml 配置；所有配置值均遵循类 YAML 语义，并使用前置键以便清晰辨识，因此新增脚本时请遵循这些默认设置。

附录 D
超参数汇总

下表汇总了我们评估的各个流动案例所采用的代表性超参数，包括轨迹采样、CNF 主干网络训练、VSDE 控制器拟合和推理诊断。我们首先提供一张概览表，说明各超参数的含义。

表 II 所有流的超参数描述。

组件	描述
轨迹	
粒子	流中模拟粒子的数量
步数	轨迹采样的积分步数
Δt	积分时间步长
CNF	
批次大小	每个训练批次中的样本数
训练轮数	遍历数据集的训练遍数
学习率	优化器更新的步长
隐藏单元	每个隐藏层中的神经元数量
深度	隐藏层数量
上下文维度	用于条件化的上下文向量维度
限制	每个训练轮次的最大训练样本数
VSDE	
批次大小	每个训练批次的样本数
训练轮数	遍历数据集的训练遍数
学习率	优化器更新步长
粒子	VSDE拟合的受控粒子数
步数	VSDE动力学的积分步数
控制成本	损失函数中控制惩罚项的权重
可学习扩散	是否学习扩散系数
推理	
粒子	推理所用的集成粒子数量
步数	推理期间的积分步数
诊断	用于评估的输出类型

A. 欧拉涡

表 III 欧拉涡旋流的超参数。

组件	值
轨迹	
粒子	4096
步数	240
Δt	0.01
CNF	
批次大小	512
训练轮数	8
学习率	0.002
隐藏单元	64
深度	3
上下文维度	3
限制	1024
VSDE	
批次大小	2048
训练轮数	50
学习率	0.01
粒子	64
步数	120
控制成本	1.0
可学习扩散	Yes
推理	
粒子	64
步数	120
诊断	叠加输出 +相图

B. 黏性激波管

表 IV 有黏激波管流动的超参数。

组件	值
轨迹	
粒子	1024
步数	240
Δt	0.01
CNF	
批次大小	512
训练轮数	8
学习率	0.001
隐藏单元	64
深度	3
上下文维度	3
限制	512
VSDE	
批次大小	128
训练轮数	4
学习率	0.005
粒子	4
步数	60
控制成本	1.0
可学习扩散	Yes
推理	
粒子	32
步数	60
诊断	叠加输出 +相图

C. 不可压缩圆柱

表 V 不可压缩圆柱流的超参数。

组件	值
轨迹	
粒子	1024
步数	240
Δt	0.01
CNF	
批次大小	512
训练轮数	8
学习率	0.001
隐藏单元	64
深度	3
上下文维度	3
限制	512
VSDE	
批次大小	128
训练轮数	4
学习率	0.005
粒子	4
步数	60
控制成本	1.0
可学习扩散	Yes
推理	
粒子	32
步数	60
诊断	叠加输出 +相图

这些超参数经过精心选择，以平衡不同流动状态下的训练稳定性和推理准确性。连续归一化流和变分随机微分方程的设置会随流动复杂度调整，而推理配置则确保集成多样性足以支持性能评估。所有值也可在代码仓库 src/experiments/ 目录下的 YAML 配置文件中找到。为缩短演示的运行时间，上传到 GitHub 的版本可能采用了精简后的参数。