

基于物理神经网络的导热问题无网格计算方法

王燕嘉, 邱璐, 朱剑琴

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 建立了物理神经网络(PINNs)求解导热问题的通用框架, 描述了三维非稳态问题、初始条件和三类边界条件及曲面边界的处理方法。使用 PINNs 求解了一个一维导热问题。求解结果与理论解的最大相对误差为 0.001 7%, 平均相对误差为 0.001 1%。使用一个简化叶片的导热问题作为案例, 将 PINNs 与传统有限元方法进行对比, 探究了 PINNs 不同的网络架构和超参数对结果的影响。对于简化叶片的导热问题, 有限元方法求解时间为 11.7 s, PINNs 平均求解时间为 8.96 s, 求解结果的最大误差为 1.03%, 平均误差为 0.139%。微调实心叶片的内冷源强度, 在训练收敛的 PINNs 基础上重新采样计算, 新的计算收敛时间为 1.41 s, 证明了 PINNs 方法具有设计条件微调时的快速计算能力。

关 键 词: 物理神经网络; 导热问题; 有限元; 无网格计算方法; 迁移学习

中图分类号: V231.1

文献标志码: A

Meshless computing method for thermal conductivity problem based on physical-informed neural networks

WANG Yanjia, QIU Lu, ZHU Jianqin

(School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: A general framework for solving thermal conductivity problems by physics-informed neural networks (PINNs) was developed and the treatment methods of three-dimensional unsteady problems, initial conditions, three types of boundary conditions, and surface boundaries were described. A one-dimensional thermal conductivity problem was solved by PINNs. The maximum relative error and average relative error between the solution and the theoretical solution were 0.001 7% and 0.001 1%, respectively. Using a simplified blade thermal conductivity problem as a case study, PINNs was compared with conventional finite element methods and the effects of different network architectures and hyperparameters of PINNs on the results were explored. The results showed that for the thermal conductivity problem of a simplified blade, the finite element method solved the problem in 11.7 s and PINNs solved in 8.96 s, with a maximum error of 1.03% and an average error of 0.139%. The internal cold source intensity of the solid blade was adjusted slightly, and the new convergence time was 1.41 s based on the PINNs training convergence, proving that PINNs method has the ability of fast calculation in case of minor change of the design condition.

Keywords: physical-informed neural networks; thermal conductivity problem; finite element method; meshless computing method; transfer learning

收稿日期: 2022-09-30

基金项目: 国家自然科学基金(51876005, 52122604)

作者简介: 王燕嘉(1998—), 女, 博士生, 主要从事航空发动机涡轮叶片冷却结构优化设计研究。E-mail: buaawyj@buaa.edu.cn

通信作者: 朱剑琴(1983—), 女, 教授、博士生导师, 博士, 主要从事航空发动机涡轮叶片先进冷却设计方法研究。E-mail: zhuqianqin@buaa.edu.cn

引用格式: 王燕嘉, 邱璐, 朱剑琴. 基于物理神经网络的导热问题无网格计算方法[J]. 航空动力学报, 2023, 38(7): 1626-1636. WANG Yanjia, QIU Lu, ZHU Jianqin. Meshless computing method for thermal conductivity problem based on physical-informed neural networks[J]. Journal of Aerospace Power, 2023, 38(7): 1626-1636.

导热问题是自然界中的常见问题, 涉及人们生活中的方方面面。传统方法求解导热问题时, 常常采用有限体积法、有限差分法、有限元法等数值方法, 通过对几何计算域及方程进行离散化, 建立线性方程组后进行迭代求解。传统数值方法被封装形成了成熟的数值模拟软件, 如 ANSYS, OpenFoam 等。然而, 传统方法存在划分网格工作量大, 设置复杂非均匀物性参数困难等问题。随着人工智能技术的发展, 使用神经网络求解导热问题成为一种新方法, 这种方法具有不依赖网格划分进行计算的特性, 具有解决传统方法存在问题的潜力。

Raissi 等^[1]最早提出了物理神经网络(PINNs), 在求解带定解条件的偏微分方程中取得了良好效果, 并且由于其方法的简明性、可扩展性而受到了极大关注。后续研究对 PINNs 在计算速度、准确度和适用性方面进行了诸多改进。Nabian、Wight、Lu 等^[2-4]通过改进在计算域中的采样方式, 提高了 PINNs 的计算效率和准确性。Jagtap 等^[5-6]提出了将计算几何域划分为子区域, 在子区域中使用不同的 PINNs 模型, 子区域的交界面上使用连续性条件相互约束的方法, 实现了 PINNs 在空间上训练的并行化, 提高了计算速度。Meng 等^[7]提出了在使用 PINNs 求解和时间相关的偏微分方程时, 可以将一个长时间序列划分为多个短时间序列问题进行求解, 能一定程度上提高训练的速度以及计算结果的准确性。Fang 等^[8]通过引入物理量的方向导数, 提出了求解曲面计算域上的偏微分方程的方法。Gao 等^[9]将卷积神经网络和 PINNs 相结合, 提出了物理卷积神经网络(Phy-GeoNet), 在求解不规则几何计算域的偏微分方程中, 比传统的 PINNs 收敛速度更快。Lu 等^[4]、Haghighat 等^[10]分别开发了基于 PINNs 的求解偏微分方程的 Python 包 DeepXDE 及 SciANN, 实现了 PINNs 方法的封装。

PINNs 求解偏微分方程的方法已经成功应用于多个领域, 如流体动力学^[11-14]、固体力学^[15]、电磁学^[16]、传热学^[17-18]中。在 PINNs 求解导热问题方面, 陆至彬等^[17]使用 PINNs 求解了平板模型的二维稳态导热问题。赵瞰等^[18]使用 PINNs 求解了非稳态一维导热问题。与传统数值模拟计算相比, PINNs 通过在计算域内采样替代了划分网格的过程, 通过神经网络的训练代替了离散化方程组迭代求解的过程, 因此是一种无网格的计算方法。在 PINNs 求解导热问题方面, 前人进行了初

步研究, 解决了简单平板模型的一维、二维导热问题求解。为了使 PINNs 求解导热问题更加具有通用性, 还需要解决的 3 个问题为: 如何设计求解三维非稳态问题的网络结构; 如何针对 1、2、3 类边界条件及初始条件设计损失函数; 如何解决曲面边界的计算域问题。解决了这 3 个方面的问题, 才能够阐明 PINNs 求解导热问题的一般性方法。

本文在第 1 节介绍了导热问题基本控制方程及定解条件的一般形式。在第 2 节介绍了搭建 PINNs 求解导热问题的一般性方法: 描述了三维非稳态问题的网络结构, 给出了 1、2、3 类边界条件及初始条件在损失函数中的形式, 通过引入边界上数据点的外法向方向解决了计算域边界为曲面的问题。在第 3 节通过 PINNs 求解了 1 个简单一维导热问题, 将求解结果与理论解对比, 验证了 PINNs 方法的求解精度。在第 4 节针对 1 个简化的 C3X 叶型的实体叶片的三维稳态导热问题, 搭建 PINNs 进行求解, 并对比 PINNs 方法与数值模拟方法的求解速度。

1 导热问题的数学描述

描述导热物体中的温度场变化规律的基本控制方程称为导热微分方程。导热微分方程描述了导热物体内部的温度分布与时空坐标之间的联系, 方程的一般形式如式(1)所示:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{\phi} \quad (1)$$

其中 T 是温度, t 是时间, (x, y, z) 代表笛卡儿坐标系, λ 是导热系数, ρ 是材料密度, c 是热容, $\dot{\phi}$ 是单位时间单位体积内热源生成的热量。根据方程左端的时间导数项是否为零, 可以分为稳态导热问题或非稳态导热问题。

求解导热问题的最终目标是求得温度随时间、空间坐标的变化关系式 $T(x, y, z, t)$ 。对于某一具体问题, 仅仅依靠通用的控制方程无法求得温度场的确定解, 还需要辅助以定解条件。对于非稳态导热问题, 定解条件包括初始条件和边界条件; 而对于稳态问题则只有边界条件。

初始条件规定了初始时刻的温度场分布, 一般形式如式(2)所示:

$$T(x, y, z, t=0) = f_0(x, y, z) \quad (2)$$

边界条件描写了待求解物体几何边界上的温

度场变化规律,通常可以分为3类:第1类边界条件规定了边界上的温度值;第2类边界条件规定了流入边界的热流密度值;第3类边界条件规定了边界与外环境的对流换热关系。第1类~第3类边界条件的数学表达形式分别为式(3)~式(5)所示:

$$T_b = f_1(t) \quad (3)$$

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right)_b = f_2(t) \quad (4)$$

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right)_b = h(T_b - T_f) \quad (5)$$

$$\begin{cases} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \Phi & (x, y, z) \in \Omega, t \in [0, t_T] \\ T(x, y, z, t=0) = g_0(x, y, z) & (x, y, z) \in \Omega \\ T_{b1} = g_1(t) & (x, y, z) \in \partial\Omega^{b1}, t \in [0, t_T] \\ -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right)_{b2} = g_2(t) & (x, y, z) \in \partial\Omega^{b2}, t \in [0, t_T] \\ -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right)_{b3} = h(T_{b3} - T_f) & (x, y, z) \in \partial\Omega^{b3}, t \in [0, t_T] \end{cases} \quad (6)$$

在式(6)中变量上标和下标出现的b1、b2、b3分别代表第1类边界条件、第2类边界条件、第3类边界条件; Ω 代表偏微分方程对应的三维几何域。

根据导热微分方程,第2类和第3类边界条件,规定正则化项 f_0 、 f_{b2} 、 f_{b3} 如式(7)所示。当物性参数,如导热系数 λ ,是关于温度 T 的函数时,将 $\lambda(T)$ 代入式(7),能够适应物性参数随温度变化的情况。

$$\begin{cases} f_0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \Phi - \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \\ f_{b2} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z - g_2(t) \\ f_{b3} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z - h(T - T_f) \end{cases} \quad (7)$$

其中 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 为边界点 (x, y, z) 处的外法线方向向量,并且有

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 \quad (8)$$

通过引入外法线方向向量,能够实现具有曲面边界的导热问题的求解。

针对导热问题设计的PINNs结构示意图如图1中所示,包含温度预测层、自动微分层、方程约束的正则化项计算层3个部分, σ 代表神经元采用的激活函数,本文中搭建的网络全部采用了

其中 $\mathbf{n}$ 代表边界上的外法线方向, h 代表了物体与环境间的表面传热系数, T_f 为外界环境温度, T_b 是物体边界上的温度。

1个具体导热问题能够用1组确定的导热微分方程和定解条件建立完整的数学描述,理论上能够求解出唯一对应的温度场。

2 PINNs 求解导热问题的通用方法

在此给出了使用PINNs求解导热问题的通用方法。考虑包括了初始条件及第1、2、3类边界条件的假想导热问题,数学描述如式(6)所示:

tanh 激活函数。

神经网络的输入为时空坐标 (x, y, z, t) 。PINNs的1次完整正向传播路径为:输入参数首先经过1个深度神经网络预测温度场 T ;接着利用神经网络的梯度反向传播技术,计算出 T 关于输入参数 (x, y, z, t) 的1阶和2阶偏导数;最后,计算由式(7)规定的正则化项。

为了使整个计算域满足导热微分方程,从 $(x, y, z) \in \Omega, t \in [0, t_T]$ 随机采样 N_0 个数据点 $(x, y, z, t; \lambda, \Phi, \rho, c; f_{0-\text{train}} = 0)$,采样点包含的内容为该点的坐标、该点的物性参数和内热源强度及导热微分方程正则化项的目标值。将采样点的坐标输入PINNs,对应的正则化项预测值为 $(x, y, z, t, f_{0-\text{pred}})$,定义对应的损失项为

$$L_0 = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} (f_{0-\text{pred}}^i) \quad (9)$$

为了使初始时刻的温度场满足初始条件,从 $(x, y, z) \in \Omega, t = 0$ 中随机采样 N_i 个数据点 $(x, y, z, t = 0; T_{i-\text{train}} = g_0(x, y, z))$ 。将采样点坐标输入PINNs,对应的温度预测值为 $(x, y, z, t = 0; T_{i-\text{pred}})$,定义对应的损失项为

$$L_i = \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} (T_{i-\text{pred}}^i - T_{i-\text{train}}^i)^2 \quad (10)$$

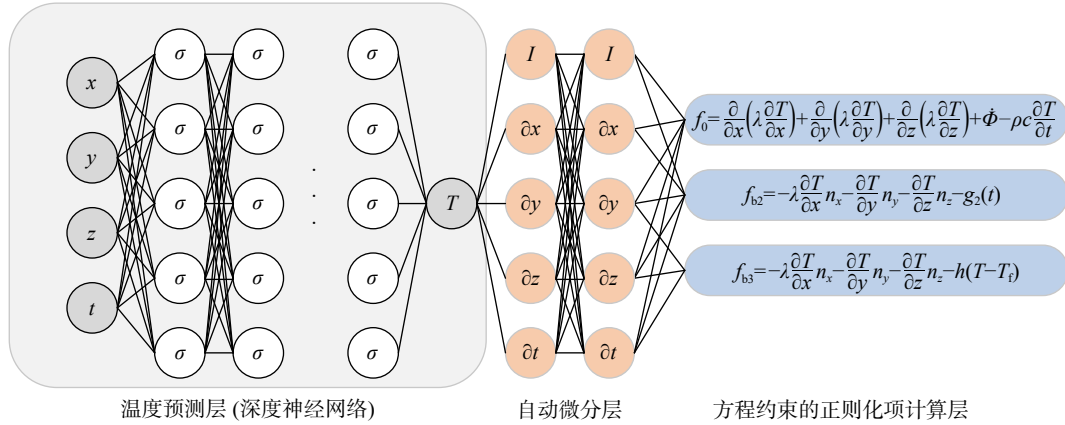


图 1 针对导热问题的 PINNs 示意图

Fig. 1 Schematic diagram of PINNs for thermal conductivity problems

为了使第 1 类边界上的温度满足给定的温度值, 在第 1 类边界 $(x, y, z) \in \partial\Omega^{b1}, t \in [0, t_T]$ 中随机采样 N_{b1} 个真实温度数据点 $(x, y, z, t, \mathbf{n}; T_{b1-\text{train}} = g_1(t))$, 将采样点坐标输入 PINNs, 对应的温度预测值为 $(x, y, z, t; T_{b1-\text{pred}})$, 定义对应的损失项为

$$L_{b1} = \frac{1}{N_{b1}} \sum_{i=1}^{N_{b1}} (T_{b1-\text{pred}}^i - T_{b1-\text{train}}^i)^2 \quad (11)$$

为了使第 2 类边界上的热流量满足给定值, 在第 2 类边界 $(x, y, z) \in \partial\Omega^{b2}, t \in [0, t_T]$ 中随机采样 N_{b2} 个数据点 $(x, y, z, t, \mathbf{n}; \lambda; f_{b2-\text{train}} = 0)$, 将采样点的坐标输入 PINNs, 对应的正则化项预测值为 $(x, y, z, t, f_{b2-\text{pred}})$, 定义对应的损失项为

$$L_{b2} = \frac{1}{N_{b2}} \sum_{i=1}^{N_{b2}} (f_{b2-\text{pred}}^i)^2 \quad (12)$$

为了使第 3 类边界上点满足给定的对流换热关系, 在第 3 类边界 $(x, y, z) \in \partial\Omega^{b3}, t \in [0, t_T]$ 中随机采样 N_{b3} 个数据点 $(x, y, z, t, \mathbf{n}; \lambda, h, T_f; f_{b2-\text{train}} = 0)$, 将采样点的坐标输入 PINNs, 对应的正则化项预测值为 $(x, y, z, t; f_{b3-\text{pred}})$, 定义对应的损失项为

$$L_{b3} = \frac{1}{N_{b3}} \sum_{i=1}^{N_{b3}} (f_{b3-\text{pred}}^i)^2 \quad (13)$$

因此, PINNs 的总损失函数规定为

$$L = L_0 + L_i + L_{b1} + L_{b2} + L_{b3} \quad (14)$$

对于真实的温度场解来说, 损失函数 L 的值应为 0, 极小化损失函数可以使 L 不断接近于 0, 从而接近真实的物理场解。极小化损失函数可以采用随机梯度下降、拟牛顿算法、Adam 算法等训练神经网络常用的优化算法。训练完成后, PINNs 中的温度预测网络部分, 为最终求得的温度场解 $T(x, y, z, t)$ 。

由本小节内容可知, PINNs 的输入层维度决定了求解问题的维度, 当输入层包含 4 个神经元, 分别代表求解问题的时空坐标 (x, y, z, t) 时, PINNs 能够适用于求解三维非稳态问题。导热问题的初始条件及第 1、2、3 类边界条件对应不同形式的损失项(式(10)~式(13)), 将损失项加入到总损失函数(式(14))中, 使得 PINNs 适用于求解各种边界条件的导热问题。通过引入边界上的外法线方向向量, PINNs 的求解能够适用于具有曲面边界的计算域。

此外, 由于 PINNs 通过采样点的训练实现导热问题的求解, 能够使每个采样点都适应真实物理情况, 因此适用于具有复杂非均匀边界条件问题的求解。

3 PINNs 的求解精度验证

3.1 一维导热问题描述及理论解

求解 1 个具有理论解的简单一维稳态导热问题, 几何模型为 1 个无限大的平壁, 如图 2 所示, 图中 q 表示热流密度。平板厚度 $\delta = 13 \text{ mm}$, 平板中内热源强度 $\dot{\phi} = 1.5 \times 10^7 \text{ W/m}^3$, 导热系数 $\lambda = 35 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$, 平板左侧为绝热边界条件, 右侧为对流换热边界条件, 表面传热系数 $h = 3500$

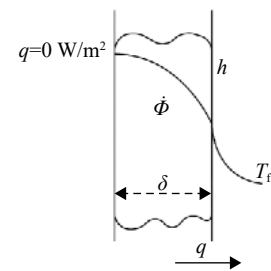


图 2 无限大平壁

Fig. 2 Infinite large flat wall model

$W/(m^2 \cdot K)$, 环境温度 $T_f = 423.15 K$ 。

该问题的控制方程为

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \dot{\Phi} = 0 \quad 0 \leq x \leq \delta \quad (15)$$

该问题的边界条件为

$$q = -\lambda \frac{dT}{dx} = 0 \quad x = 0 \quad (16)$$

$$-\lambda \frac{dT}{dx} = h(T - T_f) \quad x = \delta \quad (17)$$

该问题的理论解为

$$T_{\text{theory}} = \frac{\dot{\Phi}}{2\lambda} (\delta^2 - x^2) + \frac{\dot{\Phi}\delta}{h} + T_f \quad 0 \leq x \leq \delta \quad (18)$$

3.2 求解一维导热问题的 PINNs

PINNs 使用 Python 中的开源机器学习库 TensorFlow 搭建。训练环境为英伟达 GTX 1660S 显卡, 显存为 6 GB。

根据导热微分方程、第 2 类和第 3 类边界条件, 规定正则化项 f_0 、 f_{b2} 、 f_{b3} :

$$\begin{cases} f_0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \dot{\Phi} \\ f_{b2} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \\ f_{b3} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} - h(T - T_f) \end{cases} \quad (19)$$

根据文中第 2 节中叙述的方法搭建 PINNs, 输入层有 1 个神经元, 代表 x 坐标, 通过温度预测层计算温度值 T , 通过方程约束的正则化项计算层计算 f_0 、 f_{b2} 、 f_{b3} 。

在 $0 \leq x \leq \delta$ 范围内随机采 100 个采样点 $(x, f_{0-\text{train}} = 0)$, 在左侧边界采 1 个采样点 $(x = 0, f_{b2-\text{train}} = 0)$, 在右侧边界采 1 个采样点 $(x = \delta, f_{b3-\text{train}} = 0)$ 作为网络训练集, 定义损失函数为

$$L = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{100} (f_{0-\text{pred}}^i)^2 + f_{b2-\text{pred}}^2 + f_{b3-\text{pred}}^2 \quad (20)$$

极小化损失函数采用的优化算法为 L-BFGS (有限内存 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法, 初始搜索步长设置为 2.0, 线搜索的终止准则为强 Wolfe 条件, 算法的收敛条件为下降梯度的模 (代表优化每迭代一步目标值最多能下降多少) 小于 10^{-8} , 或迭代步数达到 10 000 步。

3.3 PINNs 求解结果与理论解对比

对比 PINNs 求解结果 (T_{PINNs}) 与理论解 (T_{theory}) (式(18)), 如图 3 所示。

相对误差 e 的定义如式(21)所示。沿 x 方向的相对误差变化如图 4 所示。

$$e = \frac{T_{\text{PINNs}} - T_{\text{theory}}}{T_{\text{theory}}} \quad (21)$$

PINNs 求解结果与理论解之间的最大相对误差为 0.001 7%, 平均相对误差为 0.001 1%。由此可以得出结论, PINNs 求解结果具有较高精度。

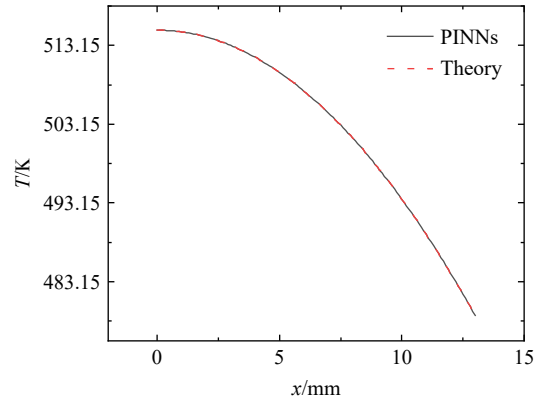


图3 PINNs 求解结果与理论解结果对比

Fig. 3 Comparison of PINNs solution results with theoretical solutions

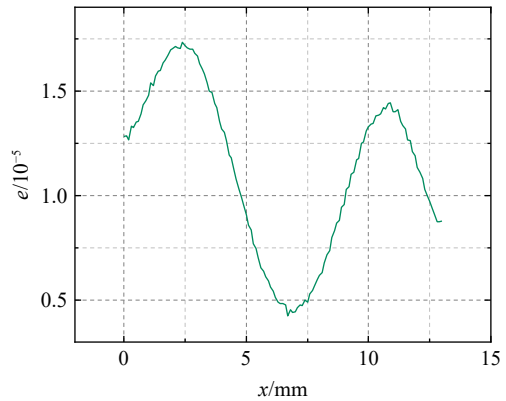


图4 相对误差变化曲线

Fig. 4 Relative error curve

4 PINNs 的求解速度验证

4.1 导热问题描述

待求解的几何模型为一简化地采用 C3X 叶型的实心直叶片, 如图 5 所示。叶片材料采用结构钢, 导热系数 $\lambda = 60.5 W/(m \cdot K)$ 。叶片的顶部(up)及底部边界(down)绝热, 叶片表面(surface)与温度为 $T_f = 1\,273.15 K$ 的外部环境进行对流换热, 表面传热系数 $h = 3\,700 W/(m^2 \cdot K)$, 叶片内部有

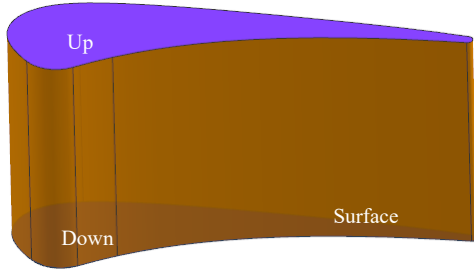


图 5 C3X 实心叶片模型

Fig. 5 C3X solid blade model

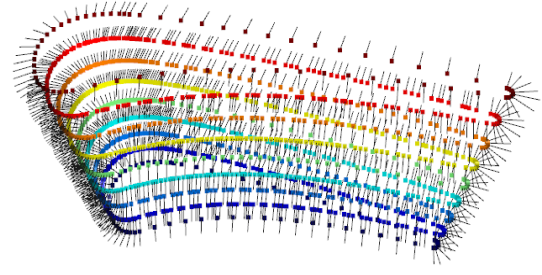


图 6 叶片表面的采样点及外法线向量

Fig. 6 Sampling points and external normal vectors of blade surface

内冷源强度 $\dot{\Phi} = -3.8 \times 10^7 \text{ W/m}^3$ 对整个叶片进行冷却。求解稳态时的温度场。

该问题的控制方程为

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{d}{dy} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{\Phi} = 0 \quad (x, y, z) \in \Omega \quad (22)$$

由于要求解稳态温度场, 因此定解条件只有边界条件, 如式(16)~式(17)所示。

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z = 0 \quad (x, y, z) \in \partial(\Omega^{\text{up}} \cup \Omega^{\text{down}}) \quad (23)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z = h(T - T_f) \quad (x, y, z) \in \partial\Omega^{\text{surface}} \quad (24)$$

叶片几何边界上点的外法线方向使用开源三维几何处理软件 MeshLab 提取, 叶片表面生成的数据点及外法线结果如图 6 所示。

4.2 求解导热问题的 PINNs

根据导热微分方程、第 2 类和第 3 类边界条件, 规定正则化项 f_0 、 f_{b2} 、 f_{b3} :

$$\begin{cases} f_0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{\Phi} \\ f_{b2} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z \\ f_{b3} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} n_x - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} n_y - \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z - h(T - T_f) \end{cases} \quad (25)$$

针对该三维稳态, 带有第 2、3 类边界条件的问题设计的 PINNs 的结构如图 7 所示。

在整个几何计算域随机采样 N_0 个数据点 $(x, y, z, f_{0-\text{train}} = 0)$, 在叶片上下底面采 N_{ud} 个数据点 $(x, y, z, f_{b2-\text{train}} = 0)$, 在叶片表面采 N_s 个数据点 $(x, y, z, f_{b3-\text{train}} = 0)$, 用作神经网络的训练集, 因此定义损失函数为

$$L = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} (f_{0-\text{pred}}^i)^2 + \frac{1}{N_{\text{ud}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{ud}}} (f_{b2-\text{pred}}^i)^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} (f_{b3-\text{pred}}^i)^2 \quad (26)$$

为了保证神经网络的良好收敛性, 往往需要对数据进行标准化的预处理, 对于输入的坐标据点 (x, y, z) , 采用极差变换法对数据进行了标准化:

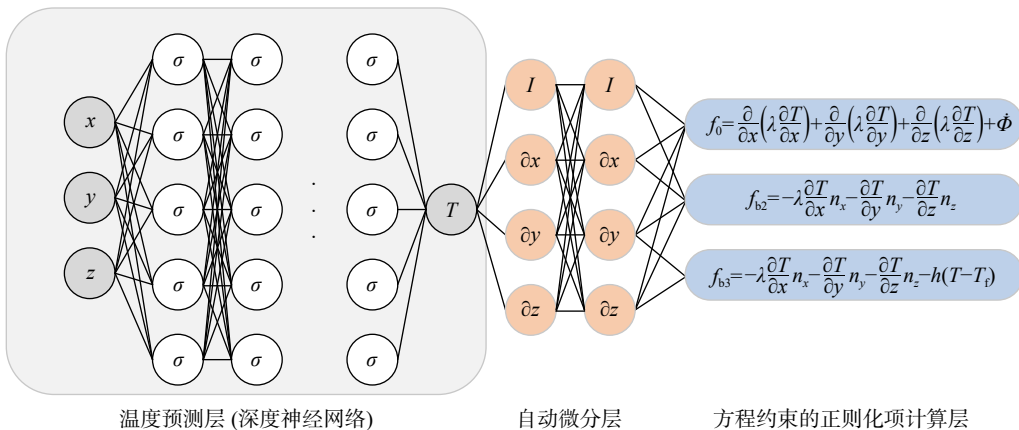


图 7 解决实心叶片导热问题的 PINNs 结构

Fig. 7 PINNs structure to solve the thermal conductivity problem of solid blades

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (27)$$

$$y^* = \frac{y - y_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}} \quad (28)$$

$$z^* = \frac{z - z_{\min}}{z_{\max} - z_{\min}} \quad (29)$$

对输出参数 T 进行标准化,由于在求解前,并不知道温度的具体范围,因此以外环境为温度标准,对输出参数进行了线性比例变换:

$$T^* = \frac{T}{T_f} \quad (30)$$

极小化损失函数采用的优化算法为 L-BFGS 算法,初始搜索步长设置为 2.0,线搜索的终止准则为强 Wolfe 条件,算法的收敛条件为下降梯度的模小于 10^{-8} ,或迭代步数达到 10 000 步。

4.3 PINNs 求解结果与有限元结果对比

对照组采用了 Workbench 中有限元计算,划分网格数为 10 943,总节点数为 51 164。划分网格的时间为 3 s,计算求解的时间为 8.7 s,总共使用了 11.7 s。得到温度场 T_{simulate} 。已知温度的 51 164 个节点在后续用作 PINNs 的测试集,以测试神经网络预测的精度。

神经网络的复杂度包括隐藏层层数(简称深度)、每层神经元个数(简称宽度)。实验组初始采用的网络结构中,温度预测层的隐藏层深度为 2,每层有 20 个神经元。采样点的数量为:在整个几何域随机采样 $N_0 = 10\,000$ 个数据点,在叶片顶部底部边界采样 $N_{\text{ud}} = 500$ 个数据点,在叶片表面采样 $N_s = 3\,000$ 个数据点。在 PINNs 训练完成后,使用 PINNs 预测和有限元计算中相同的 51 164 个节点处的温度值 T_{PINNs} ,定义最大相对误差 $e_{\max}$ 和平均相对误差 e_{ave} :

$$e_{\max} = \max \left(\frac{T_{\text{PINNs}} - T_{\text{simulate}}}{T_{\text{simulate}}} \right) \quad (31)$$

$$e_{\text{ave}} = \text{average} \left(\frac{T_{\text{PINNs}} - T_{\text{simulate}}}{T_{\text{simulate}}} \right) \quad (32)$$

对 PINNs 进行训练,损失函数 L 随迭代步数 I_{step} 的变化如图 8 所示。

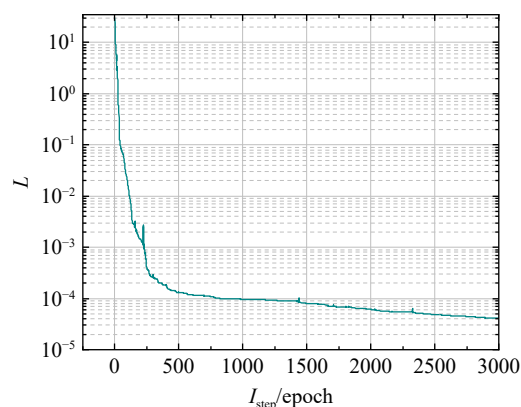
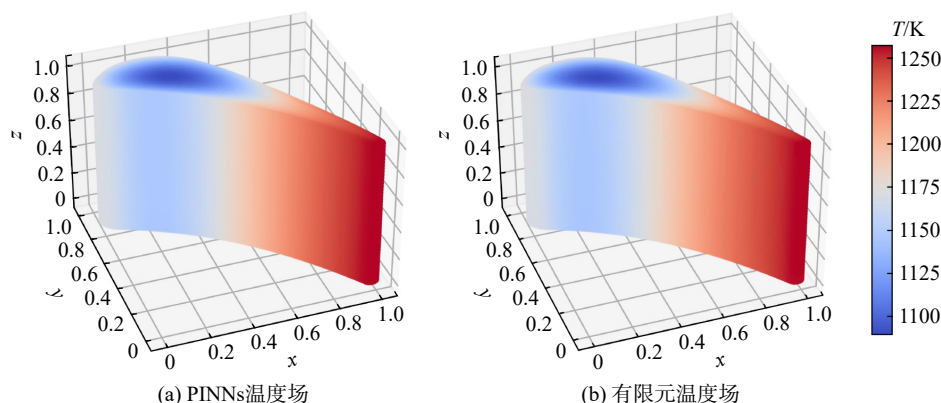


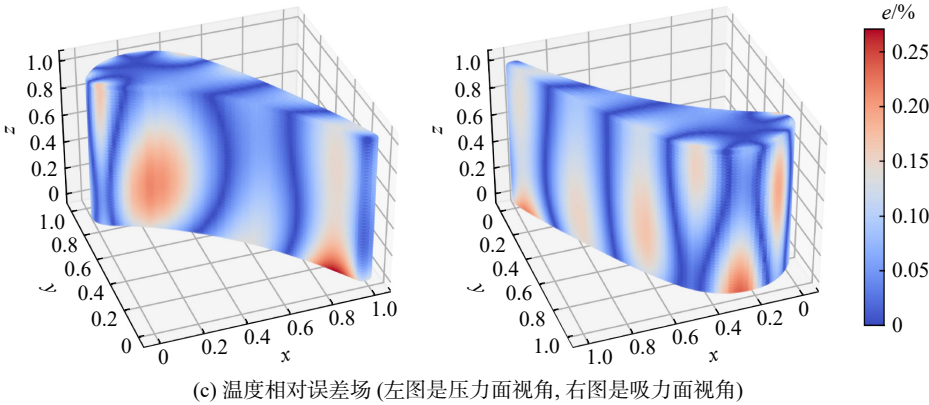
图 8 损失函数和相对误差随迭代步数的变化

Fig. 8 Loss function and relative error varying with the iteration steps

观察图 8 可以发现,迭代次数达到 1 000 步时,损失函数值及相对误差值基本不再变化,寻优算法下降梯度的模小于 10^{-8} ,认为模型已经收敛,此时损失函数的值约为 10^{-4} 。

使用迭代步数 1 000 步的网络预测温度场,预测结果如图 9(a)所示,图 9(b)是数值模拟结果,两种方法预测的温度场高度一致。与数值模拟结果对比, PINNs 预测的最大相对误差为 0.27%,平均相对误差为 0.07%,说明使用 PINNs 求解三维导热问题能和传统数值方法达到同一精度。当迭代步数 1 000 步时,网络训练时间为 11.63 s,有限元计算为 11.7 s,相较于传统数值方法, PINNs 的训练时间和有限元方法相当。





(c) 温度相对误差场 (左图是压力面视角, 右图是吸力面视角)

图 9 PINNs 三维温度场求解结果和误差可视化

Fig. 9 PINNs three-dimensional temperature field solution results and error visualization

PINNs 的初始化会对训练产生影响。初始化包括两方面的内容：一是随机采样点的初始化；二是神经网络权重的初始化。在固定配置点数量 $N_0=10\,000$, $N_{ud}=500$, $N_s=3\,000$, 固定网络结构：深度为 2, 宽度为 20 的情况下, 进行了 5 次随机初始化实验。计算结果如表 1 所示。

表 1 初始化对于计算时间和计算精度的影响				
Table 1 Effect of initialization on computation time and accuracy				
实验	计算时间/s	迭代步数	最大误差/%	平均误差/%
第 1 次	11.63	1 053	0.27	0.07
第 2 次	6.86	553	0.31	0.12
第 3 次	11.58	948	0.41	0.13
第 4 次	12.97	1 036	0.31	0.09
第 5 次	8.85	664	0.29	0.09
平均值	10.38	1 053	0.32	0.10

从表 1 可以看出, 在给定的计算收敛条件下, 5 次实验都达到了较高精度, 但初始化对于计算时间的影响较大。为了消除初始化对结果的影响, 在研究其他因素(网络复杂度、采样点)对 PINNs 计算速度和精度的影响时, 均进行了 5 次实验后对结果取均值。

研究温度预测网络的复杂度, 即网络深度及每层神经元个数(深度及宽度)对于计算速度和精度的影响。结果如表 2~表 5 所示。

从表 2、表 3 可以看出, 增加网络的深度和宽度会增加计算时间。这是由于增加网络的深度和宽度时, 神经网络的训练参数变多, 单步计算的时间变长, 同时收敛所需的步数往往会增加。从

表 4、表 5 可以看出, 在规定的收敛准则下, 各个网络都达到了较高的计算精度, 增加网络的深度和宽度对计算精度没有明显提升作用。本次实验中最简单的神经网络(深度为 2, 宽度为 10)有

表 2 不同深度及宽度网络的计算收敛时间				
Table 2 Convergence time for different depth and width networks				
网络宽度	计算收敛时间/s			
	10	20	40	80
2 层	10.30	10.38	20.90	47.44
4 层	21.27	25.37	40.75	93.36
6 层	22.85	48.97	55.59	144.07

表 3 不同深度及宽度网络的计算收敛步数				
Table 3 Convergence steps for different depth and width networks				
网络宽度	计算收敛参数			
	10	20	40	80
2 层	799	1 053	1 288	1 396
4 层	796	1 237	1 505	1 598
6 层	766	1 355	1 539	1 694

表 4 不同深度及宽度网络计算结果的最大相对误差				
Table 4 Maximum relative error of the results calculated for different depth and width networks				
网络宽度	最大相对误差/%			
	10	20	40	80
2 层	0.30	0.32	0.39	0.36
4 层	0.36	0.25	0.38	0.32
6 层	0.28	0.28	0.23	0.59

表 5 不同深度及宽度网络计算结果的平均相对误差
Table 5 Average relative error of the results calculated for different depth and width networks

网络宽度	平均相对误差/%			
	10	20	40	80
2 层	0.088	0.096	0.111	0.104
4 层	0.104	0.074	0.102	0.091
6 层	0.057	0.055	0.062	0.133

161 个训练参数,最复杂的网络(深度为 6,宽度为 80)有 32 801 个训练参数,经过 13 500 个采样点进行训练后,均在测试集上有良好预测精度,这说明 PINNs 方法有不易产生过拟合的性质。根据表 2~表 5 可以得到结论:对于简单导热问题,适合用较为简单的网络结构进行计算。

研究采样点数量对网络训练的影响,网络深度为 2,每层神经元个数为 10。计算结果如表 6 所示。

表 6 不同采样点数量下的网络计算时间和计算精度
Table 6 Computation time and accuracy under different number of sampling points

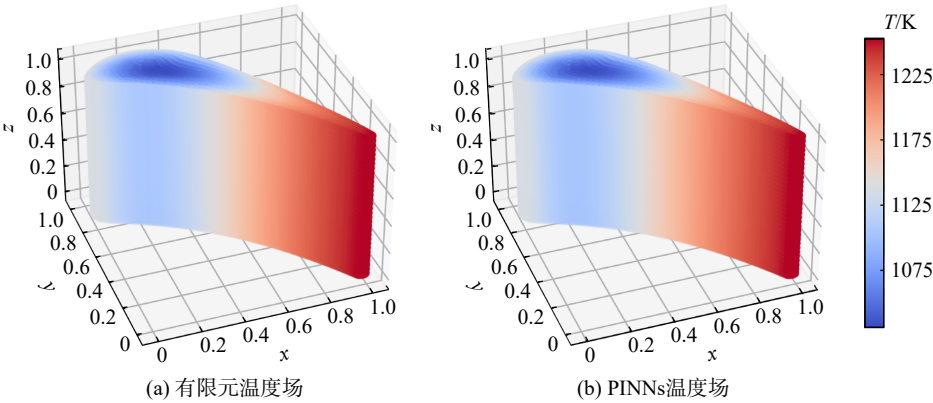
实验	N_0	N_{ud}	N_s	平均计算时间/s	平均计算步数	最大误差/%	平均误差/%
1	100	10	30	8.96	711	1.03	0.139
2	1 000	50	300	9.21	708	0.66	0.142
3	10 000	500	3 000	10.30	799	0.30	0.088
4	50 000	2 300	15 000	26.77	1 235	0.29	0.076

如表 6 所示,在采样点数量较少时,增加采样点数量有利于提高计算精度,在采样点数量增加到一定程度时,计算精度便不再增加。在采样点数量过多时,会增加计算收敛的难度导致计算时间变长。从第 1 组实验结果可以看出,在采样点很少时,计算结果的误差仍然不是很大(温度场平均偏移了 2 K),这可能与计算模型的计算域较为简单,且为单连通域有关。从表 2~表 6 的结果看出,网络深度为 2,每层神经元个数为 10,采样点数量为(100, 10, 30),是解决该实心叶片导热问题的较优 PINNs 网络配置。

在上述较优网络配置基础上,验证 PINNs 是否具有设计条件微调时的快速计算能力,更改本小节中导热问题的内冷源强度 $\phi=-5.0\times10^7$ W/m³,在已经训练收敛的 PINNs 基础上重新进行采样计算,求解的温度场结果与数值模拟结果相

对比如图 10 所示,求解结果的平均相对误差为 0.08%,最大相对误差为 0.35%。然而,新的计算收敛时间仅为 1.41 s,这证明 PINNs 具有在设计条件微调时的快速计算能力。

传统的数值模拟方法经过长时间的发展已经形成了完整的计算和加速方法,有了成熟的商用软件。PINNs 在求解偏微分方程方面能够达到与数值模拟方法相同的精度速度,是一种行之有效的替代方案。PINNs 的优势在于,能够适应复杂非均匀边界条件的赋值,以及能够在设计条件微调时快速计算收敛。本文验证了 PINNs 在内热源强度微调时的快速计算能力,在未来还需要重点研究在几何结构发生微调时,PINNs 是否具有快速计算能力,这对于解决传统方法在几何结构微调时存在大量重复划分网格工作的问题具有重要意义。



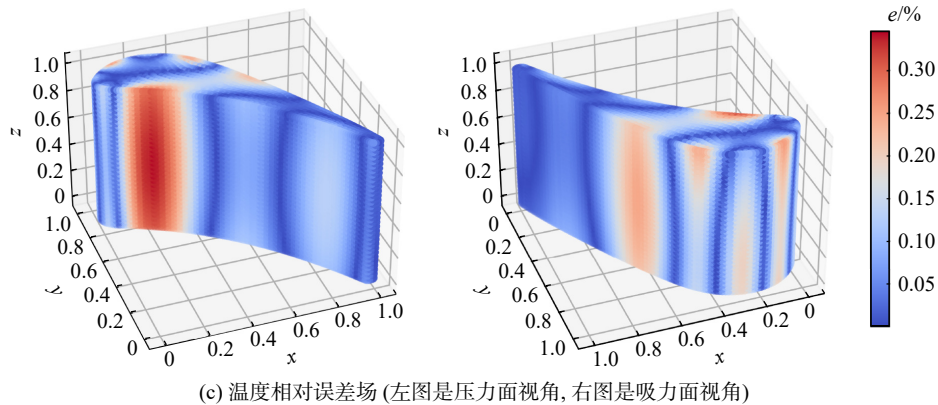


图 10 内冷源微调后 PINNs 三维温度场求解结果和误差可视化

Fig. 10 PINNs three-dimensional temperature field solution results and error visualization after the minor change of the internal cold source

5 结 论

本文建立了 PINNs 求解导热问题的通用框架, 重点描述了三维非稳态问题的处理方法、初始条件和 3 类边界条件在损失函数中的表现形式, 引入了边界点的外法线方向使提出的框架适用于带有曲面边界的计算域。为了验证所提出框架的有效性, 首先采用具有理论解的一维导热问题验证了 PINNs 的求解精度, PINNs 求解结果与理论解的最大相对误差为 0.001 7%。接着采用 C3X 叶型的简化实心直叶片的三维稳态温度场的求解验证了 PINNs 的求解速度, 研究了初始化, 网络复杂度, 采样点数量对神经网络收敛结果的影响。优化了网络结构和采样点数量后, PINNs 方法求解的平均计算时间为 8.96 s (有限元方法为 11.7 s), 最大误差为 1.03%, 平均误差为 0.139%。与有限元方法计算的温度场相比, PINNs 方法在求解导热问题中有很高准确性, 计算速度和发展成熟的有限元方法相近。对原 C3X 导热问题中的内冷源强度进行微调, 在原问题训练收敛的 PINNs 基础上, 重新进行采样计算, 新的收敛时间为 1.41 s, 证明 PINNs 有边界条件微调时的快速计算能力。在未来, 应该重点研究在几何结构微调时, PINNs 如何利用其无网格特性实现快速计算, 这对于解决传统方法几何结构微调时需要重复划分网格的问题将具有重要意义。

参考文献:

- [1] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.
- [2] NABIAN M A, GLADSTONE R J, MEIDANI H. Efficient training of physics-informed neural networks via importance sampling [J]. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, 2021, 36(8): 962-977.
- [3] WIGHT C L, ZHAO Jia. Solving Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations using the adaptive physics informed neural networks[J]. *Communications in Computational Physics*, 2021, 29(3): 930-954.
- [4] LU Lu, MENG Xuhui, MAO Zhiping. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations[J]. *SIAM Review*, 2021, 63(1): 208-228.
- [5] JAGTAP A D, KARNIADAKIS G E. Extended physics-informed neural networks (XPINNs): a generalized space-time domain decomposition based deep learning framework for nonlinear partial differential equations[J]. *Communications in Computational Physics*, 2020, 28(5): 2002-2041.
- [6] JAGTAP A D, KHARAZMI E, KARNIADAKIS G E. Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: applications to forward and inverse problems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 365: 113028.1-113028.27.
- [7] MENG Xuhui, LI Zhen, ZHANG Dongkun. PPINN: parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 370: 113250.1-113250.16.
- [8] FANG Zhiwei, ZHAN J. A physics-informed neural network framework for PDEs on 3D surfaces: time independent problems[J]. *IEEE Access*, 2020, 8: 26328-26335.
- [9] GAO Han, SUN Luning, WANG Jianxun. PhyGeoNet: physics-informed geometry-adaptive convolutional neural networks for solving parameterized steady-state pdes on irregular domain[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 428: 110079.1-110079.27.
- [10] HAGHIGHAT E, JUANES R. SciANN: a keras/tensorflow wrapper for scientific computations and physics-informed deep learning using artificial neural networks[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 373: 113552.1-113552.17.
- [11] BAI Xiaodong, WANG Yong, ZHANG Wei. Applying physics informed neural network for flow data assimilation[J]. *Journal of Hydrodynamics*, 2020, 32(6): 1050-1058.
- [12] CHENG Chen, ZHANG Guangtao. Deep learning method based on physics informed neural network with resnet block for solving fluid flow problems[J]. *Water*, 2021, 13(4): 423.1-423.17.

- [13] FLORIO M D, SCHIASSI E, GANAPOL B, et al. Physics-informed neural networks for rarefied-gas dynamics: thermal creep flow in the Bhatnagar-Gross-Krook approximation[J]. *Physics of Fluids*, 2021, 33(4): 047110.1-047110.14.
- [14] ZHU Qiming, LIU Zeliang, YAN Jinhui. Machine learning for metal additive manufacturing: predicting temperature and melt pool fluid dynamics using physics-informed neural networks[J]. *Computational Mechanics*, 2021, 67(2): 619-635.
- [15] HAGHIGHAT E, RAISSI M, MOURE A, et al. A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 379: 113741.1-113741.22.
- [16] FANG Zhiwei, ZHAN J. Deep physical informed neural networks for metamaterial design[J]. *IEEE Access*, 2020, 8: 24506-24513.
- [17] 陆至彬, 瞿景辉, 刘桦, 等. 基于物理信息神经网络的传热过程物理场代理模型的构建[J]. *化工学报*, 2021, 72(3): 1496-1503.
LU Zhibin, QU Jinghui, LIU Hua, et al. Surrogate modeling for physical fields of heat transfer processes based on physics-informed neural network[J]. *CIESC Journal*, 2021, 72(3): 1496-1503. (in Chinese)
- [18] 赵瞰, 周宇, 程艳青, 等. 基于内嵌物理机理神经网络的热传导方程的正问题及逆问题求解[J]. *空气动力学学报*, 2021, 39(5): 19-26.
ZHAO Tun, ZHOU Yu, CHENG Yanqing, et al. Solving forward and inverse problems of partial differential equations of heat conduction using physics-informed neural networks[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2021, 39(5): 19-26. (in Chinese)

(编辑: 陈 越)