

《化工学报》网络首发论文

题目:	物理信息神经网络在两相流中的应用		
作者:	张橙,李雪,叶茂,刘中民		
收稿日期:	2024-11-01		
网络首发日期:	2024-11-20		
引用格式:	张橙,李雪,叶茂,刘中民.物理信息神经网络在两相流中的应用[J/OL].化		
	工学报.https://link.cnki.net/urlid/11.1946.TQ.20241120.1417.004		



www.cnki.net

网络首发:在编辑部工作流程中,稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶 段。录用定稿指内容已经确定,且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期 刊特定版式(包括网络呈现版式)排版后的稿件,可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出 版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出 版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定;学术研究成果具有创新性、科学性和先进性,符合编 辑部对刊文的录用要求,不存在学术不端行为及其他侵权行为;稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、 出版的技术标准,正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。 为确保录用定稿网络首发的严肃性,录用定稿一经发布,不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容, 只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认: 纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊(光盘版)》电子杂志社有限公司签约,在《中国 学术期刊(网络版)》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版,以单篇或整期出版形式,在印刷 出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊(网络版)》是国家新闻出 版广电总局批准的网络连续型出版物(ISSN 2096-4188, CN 11-6037/Z),所以签约期刊的网络版上网络首 发论文视为正式出版。 文章类型:综述与专论

DOI: 10.11949/0438-1157.20241241

物理信息神经网络在两相流中的应用

张橙^{1,2},李雪¹,叶茂¹,刘中民¹

(¹中国科学院大连化学物理研究所,辽宁 大连 116023; ²中国科学院大学,北京 100049) **摘要:**机器学习和数据科学相关研究从计算机科学学科涌向化学工程,将为化学工程领域创 造变革范式的机会,其中物理信息神经网络(PINN)因将物理方程嵌入神经网络中使得网络 输出满足物理规律而获得广泛关注。本工作首先介绍了 PINN 的算法思想及其采样策略;进 一步讨论了对 PINN 的损失函数不同的处理方式,主要包括无观测值、方程降阶、方程离散 化和只嵌入部分物理方程等;最后概述了 PINN 方法在气液两相流、多孔介质两相流、液固 两相流、两相流传热等领域最新进展。

关键词:流体力学;多相流;数值模拟;物理信息神经网络;采样策略;损失函数 中图分类号:TQ 021.9

Application of physics informed neural network in

two-phase flow

ZHANG Cheng^{1,2}, LI Xue¹, YE Mao¹, LIU Zhongmin¹

(¹ Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, Liaoning, China; ² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The influx of research on machine learning and data science from the field of computer science into chemical engineering presents transformative opportunities for chemical engineering paradigms. In this context, physics-informed neural network (PINN) has gained significant attention for embedding physical equations into neural networks, ensuring that network outputs adhere to physical laws. This work begins by introducing the algorithm ideas and sampling strategies of PINN. It further discuss various treatment of the PINN loss function, mainly including cases with no observational data, equation reduction, equation discretization, and partial embedding of physical equations. Finally, it provides an overview of recent progress in the application of PINN to areas such as gas-liquid two-phase flow, two-phase flow in porous media,

liquid-solid two-phase flow, and heat transfer in two-phase flow.

Key words: fluid mechanics; multiphase flow; numerical simulation; physics informed neural network; sampling strategy; loss function

收稿日期: 2024-11-01 修回日期: 2024-11-10

通信作者: 李雪(1988—),女,博士,副研究员,lixue@dicp.ac.cn;叶茂(1973—),男,博士,研究员, maoye@dicp.ac.cn

第一作者: 张橙 (1996—), 女, 博士研究生, chengzhang@dicp.ac.cn

基金项目:国家自然科学基金项目(22108269, 22293021, 22288101);大连化学物理研究所创新基金(I202238)

引言

多相流普遍存在于自然现象和工程系统中,例如油藏开采^[1, 2]、生物医学^[3]、工业制造 等领域^[4]。此类过程中的多相流涉及两个或多个相的连续接触,通常是通过气相冒泡进入液 相或在多孔介质中湿润相流体自然取代非湿润相流体来实现的。深入了解流体动力学行为对 涉及此类过程的设计开发至关重要,而数值模拟为理解流动机制的底层物理原理提供了有效 的途径。许多数值技术可以用来计算这些模型的偏微分方程的解,例如有限元、有限体积和 有限差分等基于网格的经典方法,同时为了捕获相界面运动规律,这些技术常与水平集^[4]、 流体体积^[5]或相场^[6]等方法相结合使用。尽管已经证明这些数值方法可以为复杂的流动问题 提供可靠的解决方案,但其仍然存在很大的局限性^[7],例如:(1)由于复杂的网格生成,可 能需要大量计算;(2)方程组中的非线性项需要迭代计算和采用数值稳定技术;(3)定义不 明确的物理(如模型的边界、初始条件或未知参数),非常具有挑战性,而通常采用随机方 法解决^[8, 9];(4)传统的数值方法通常难以处理复杂系统,特别是在面对不规则的几何形状 和由水力不连续性引起的流动特性的突然变化^[10]。

近年来机器学习算法在自然语言处理、语音处理、图像识别等领域得到广泛的应用。机器学习利用样本生成器的输入和系统的观测值生成其输出的近似值,具有拟合度高、泛化能力强的特点。其在流体力学领域也取得快速进展,提供了模块化、敏捷的建模框架^[11]。基于机器学习的流动建模包含数据驱动建模^[12-16]和物理机理建模^[17-22]。数据驱动建模包括:降 维^[23, 24]、聚类^[25]和分类^[26]、稀疏^[27]和随机方法^[28]以及超分辨^[29-31]。基于物理机理的建模包 括:通过非线性嵌入的线性模型^[32, 33]、神经网络建模^[34]、简约的非线性模型^[35]和机器学习 的闭合模型[36,37]。

将物理方程编码到学习算法中,非线性问题的处理引入了两个重要的约束(线性化和先 验假设)^[38]。与数据驱动建模相比,基于物理的神经网络必须遵循由物理定理推导出来的 对称性、不变性或守恒定律^[7]。物理信息神经网络(PINN)首次利用自动微分将偏微分方程 (PDE)嵌入到神经网络损失函数中,使得预测结果具有可解释性^[39]。该方法可应用于数据 驱动的 PDE 的求解,从而能够从大量数据中提取符合物理规律的流动信息。IB-PINN 是一种 融合直接浸入边界法的 PINN 方法,其损失函数由偏微分方程、边界条件、浸入边界和力误 差组成。这种独特的方法可以直接用来计算层流流经通道中圆柱体的流场速度、压力和圆柱 力^[40]。XPINN 则将 PINN 整合到多个区域,允许采用时空分解方式来求解微分方程。XPINN 的损失函数包含每个区域和区域间连接处的初始条件和偏微分方程,通过流场的边界速度和 局部速度可以准确预测整个流场速度^[41]。

以上研究只关注 Navier-Stokes (NS) 方程,而不包含输运方程 (或能量方程),同时主 要集中在 PINN 求解正问题的研究。PINN 求解逆问题典型案例是:HFM 对输出变量应用自 动微分,在物理信息神经网络中编码输运和 NS 方程,然后通过最小化损失函数来学习物理 非信息神经网络和物理信息神经网络的共享参数。该方法可实现根据流场的浓度信息获取流 场的速度和压力^[42]。目前,也有许多研究人员利用 PINN 来解决传热问题^[43-46]。Laubscher 采用 PINN 预测简单二维矩形空间中干空气加湿的动量、物种和温度分布^[45]以及在带有障碍 物的二维空间进行传热的不可压缩层流。Bararnia 使用 PINN 来解决边界层热流体问题,包 括 Blasius-Pohlhausen、Falkner-Skan 和自然对流^[43]。这些研究中不仅包含动量方程还涵盖能 量方程,只是 NS 方程和能量方程的高阶项被降阶或方程直接被转化为常微分方程。但也有 研究者直接求解 NS 方程和能量方程,对方程不做简化处理。如 Cai 等提出了一种类似 HFM 的 PINN 方法,可以从 Tomo-BOS 成像获得的三维温度场快照中推断出完整的连续三维速度 和压力场^[44]。

上述研究主要是 PINN 方法在单相流中的应用,本综述主要介绍 PINN 方法应用于两相流的研究。我们首先介绍了 PINN 的基本思想。然后,我们详细讨论了与传统固定采样方法不同的:基于残差的自适应性的离散点的采样策略。此外,PINN 的损失函数的构成通常包括描述物理现象的全部的偏微分方程残差、系统部分观测值与网络输出之间的数据误差、初始条件误差和边界条件误差。本工作中我们介绍了文献中对损失函数不同的处理方式,主要包括:损失函数中无观测值、控制方程的降阶、控制方程的离散化和只嵌入部分控制方程。

3

相流、液固两相流和两相流传热的应用。

1 方法

常用来描述物理场的 PINN 偏微分方程的形式[47]如下:

$$f(x, t, \hat{u}, \partial_x \hat{u}, \partial_t \hat{u}, \cdots, \lambda) = 0, x \in \Omega, t \in [0, T]$$
(1)

$$\hat{u}(x,t_0) = m_0(x), x \in \Omega \tag{2}$$

$$\hat{u}(x,t) = m_{\Gamma}(t), x \in \partial\Omega, t \in [0,T]$$
(3)

其中 x 为空间坐标系 x = [X,Y,Z], t 为时间,式(1)中的 f 为偏微分算子 $[\partial_x \hat{u}, \partial_t \hat{u}]$ 与参数 $[\lambda_1, \lambda_2]$ 组成的偏微分方程的残差。 \hat{u} 表示在初始条件 $m_0(x)$ 和边界条件 $m_{\Gamma}(t)$ 下偏微分方程的解。式(2)中的 Ω 和式(3)中的 $\partial\Omega$ 分别表示空间域和边界。



图1用于偏微分方程的物理信息神经网络[48]

Fig.1 Physics-informed neural network for partial differential Equation^[48]

$$a^0 = (\mathbf{x}, \mathbf{t}), \tag{4}$$

$$a^{k} = \sigma(w^{k}a^{k-1} + b^{k}), 1 \le k \ll L - 1$$
(5)

$$a^{k} = w^{k}a^{k-1} + b^{k}, k = L (6)$$

PINN 网络由式(4)至式(6)描述,由一个具有多个隐藏层的全连接前馈神经网络组成,用于近似输入 [x,t] 的输出解 \hat{u} 。其中 a^0 是由空间和时间坐标组成的网络的输入, a^k 为第 k 层的输出, w^k 和 b^k 分别为网络的第 k 层的权重和偏置参数, σ 为非线性激活函数。

$$Loss = \omega_1 Loss_{PDE} + \omega_2 Loss_{data} + \omega_3 Loss_{IC} + \omega_4 Loss_{BC}$$
(7)

式(7)中 PINN 网络的损失函数包括偏微分方程残差误差 Loss_{PDE}、观测值与网络输出之间的数据误差 Loss_{data}、初始条件误差 Loss_{IC}和边界条件误差 Loss_{BC},如图1所示。

而传统机器学习算法的损失函数主要关注网络输出与观测值之间的数据误差。如果数据和方 程都经过无量纲化处理,式(7)中权重 [ω₁,ω₂,ω₃,ω₄] 可以都设置为1。对于已知初始条 件、边界条件和方程参数的正问题,无需观测值即可求解。对于边界条件(初始条件)或方 程参数未知的反问题,则需要观测值。PINN 也可以在给定初始边界和观测值的情况下求解 超定(over determined)体系。

$$Loss_{data} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} |y(t^{n}, x^{n}) - y^{n}|^{2}$$
(8)

$$\text{Loss}_{PDE} = \sum_{i=1}^{q} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} |e_i(t^m, x^m)|^2$$
(9)

$$\operatorname{Loss}_{BC} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \left| \delta(t^{k}, x^{k}) - \delta^{k} \right|^{2}$$
(10)

$$\operatorname{Loss}_{IC} = \frac{1}{p} \sum_{p=1}^{p} |\vartheta(t^p, x^p) - \vartheta^p|^2$$
(11)

式(8)中数据损失 Loss_{data} 旨在将模型输出与观测数据直接匹配,该损失可使用训 练数据和网络输出之间的均方误差(MSE)计算得出。式(9)中物理损失 Loss_{PDE} 确保网 络预测遵循已知的物理定律,例如质量、动量和能量守恒。Loss_{PDE}的计算过程如下:首先 对网络的输出 û 采用自动微分求解偏微分算子 [∂_xû,∂_tû],接下来应用偏微分算子和网络 输出构建偏微分方程的残差,最后计算残差与 0 之间的均方误差,即 Loss_{PDE}。式(10)中 边界条件损失 Loss_{BC} 允许 PINN 学习边界条件有关信息,定义为 PINN 预测值与输入网络的 边界条件值之间的均方误差。在某些特殊的情况下,也可不需要边界条件信息,因为观察值 包含足够的边界条件信息^[42,44]。类似地,式(11)中初始条件损失 Loss_{IC} 允许 PINN 学习 初始条件有关信息,定义为 PINN 预测值与输入网络的初始条件值之间的均方误差,在一些 条件下初始条件信息也不是必须的。

可利用 TensorFlow 或 Pytorch 框架对网络进行训练,采用 Adam 优化器对网络参数 [w^k, b^k] 进行优化,使得损失函数 Loss 不断减小,从而网络输出 û 逼近偏微分方程的解。 与传统计算流体力学相比,PINN 方法 1)可以将微分方程和数据进行耦合,把实验数据加 入到模型的训练中,这是传统数值计算不具备的优势;2)不需要划分网格,对网络输出变 量采用自动微分技术后表示控制方程而不用对偏方程进行离散化处理,更改采样点位置或添 加更多采样点的计算成本便宜;3)特定条件训练完毕后的 PINNs 模型可以直接预测不同的 条件,而传统数值模拟需要重新进行模拟计算。

2 采样策略

传统的网格自适应有三种基本技术: h 自适应^[49]、r 自适应^[50]和 p 自适应^[50]。h 自适应 增加了更多节点,从而增加了自由度和网格连通性。r 自适应虽然保持相同数量的节点和自 由度,但节点会重新定位。p 自适应增加了元素的多项式度,同时保持网格固定。其他自适 应方法将一些基本技术结合在一起,例如: h-p 自适应^[51]和 r-h 自适应^[50]。

网格自适应主要有三种驱动因素:误差^[52]、解的特征^[53]和 PDE 残差^[54]。

基于误差的自适应在解误差较大的情况下增加了更多的自由度,这种技术忽略了误差在 域中传输的事实。因此,在误差较大的地方进行基于误差的自适应可能会忽略误差源本身的 区域^[55]。基于解的自适应利用解的特征(例如梯度或不连续性)进行自适应,这种技术背 后的理念是:通过在这些解的特征的位置采样更多的点,求解这些特征,从而提高解整体的 准确性。但是,如果同一问题中存在多个特征,则基于解的自适应会导致过度细化某些特征, 而忽略其他特征。残差可以看作是解的误差源^[56],在残差较大的地方进行细化被视为在误 差源所在位置进行细化的一种方式。因此,基于残差的自适应细化离散化 PDE 残差较大的 网格通常比基于误差的自适应和基于解的特征的自适应效果更好。

自适应过程通常计算成本昂贵,因为必须满足某些要求并更新网格连通性。此外,对于 非结构化网络,并行化变得十分复杂。但在 PINN 方法中,更改采样点位置或添加更多采样 点的计算成本便宜。主要原因是 PINN 是一种无网格方法,不需要处理元素体积或更新网络 连通性。此外,导数的近似与采样点位置无关。因此,不存在由采样点分布导致的离散化误 差。唯一要做的就是确定需要的更多采样点的位置。

PINN 训练点采集策略主要有:固定采样点策略和采用更多采样点来丰富残差较大的位置基于残差算法。基于残差的自适应细化方法(RAR)在时空域中选取了一组随机的密集点,评估其残差,然后将与最大残差值相对应的点添加到 PINN 的训练集中,训练集的逐步细化可实现对残差的控制。但是,当残差在非常狭窄的区域显示较大值时,这种采样策略可能会产生过度聚集的点,导致不必要的过度细化,添加的点容易集中在一个非常小的区域内^[57]。

为了避免这种可能导致模型过度拟合的点簇的生成,研究者设计了一个基于残差的概率 密度函数来控制添加点的选取。通过根据概率密度函数从密集集中提取点,并将这些点添加 到训练集中,收集的点将更均匀地分布在区域内。在概率高的地方(高残差)添加更多点, 在概率低地方(低残差)添加较少点^[58]。算法可以扩展到耦合的微分方程组,这样每个偏 微分方程残差将具有不同的采样点。此外,类似的策略丰富了数据点,以更好地捕捉初始/ 边界条件。算法如下:



$$P(\mathbf{X}) = \frac{\max(\log|r(\mathbf{X})/\epsilon|, 0)}{(\Omega, \max(\log|r(\mathbf{X})/\epsilon|, 0) d\mathbf{X})}$$

(12)

其中 **X** 是随机向量[**x**,**t**]^{**T**},**r** 是研究的残差, Ω 是时空域, ϵ 是用于过滤小残差值的容差。 实际上, ϵ 值的选择是为了控制采样点分布的传播。该函数的设计确保其在时空域积分为 1, 因此分母中存在该项,该项是使用密集点集上的蒙特卡诺积分计算得到的。

3 损失函数

不仅采样策略会影响结果,损失函数的构造对结果也十分重要。通常损失函数的构成即 如式(7)所示,包括偏微分方程残差 Loss_{PDE}、观测值与网络输出之间的数据误差 Loss_{data}、 初始条件误差 Loss_{IC}和边界条件误差 Loss_{BC}。本工作中我们介绍了文献中对损失函数不同 的处理方式,主要包括:损失函数中无观测值、控制方程的降阶、控制方程的离散化和只嵌 入部分控制方程。

3.1 无观测值

PINN 可视为与传统偏微分方程求解器相类似的求解器,不需要观察值,方程求解过程 是逐步通过上一时刻迭代到当前时刻,直至待求时刻。以基于相场法的物理神经网络 (PF-PINNs)为例展开说明。

在相场模型中,通常用 Cahn-Hillard 方程来描述两种不可压缩、不混溶流体之间的界面 ^[59-63]。下标"L"和"G"分别表示液相和气相。不可压缩两相流中序参数定义为相场变量 C。 当 C 达到 1 时,混合物的物理性质取下标 L。相反,如果 C 为-1 时,下标变为 G。混合物被 界面分成两部分,其中 C=0。根据序参数的定义,C 被限制在-1 和 1 之间。相场变量 C 的方 程为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C = \nabla \cdot (M_0 \nabla \phi)$$
(13)

$$\phi = C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C \tag{14}$$

其中 M_0 为迁移率, ϕ 为由混合物的自由能得出的化学势, ε 为界面厚度。

二维不可压缩、等温、不互溶两相流控制方程包括连续性方程、动量方程和界面演化方程。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{15}$$

$$\rho_M\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u}\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu_M(\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T)\right] + \boldsymbol{f}_\sigma + \rho_M \boldsymbol{g}$$
(16)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C = \nabla \cdot (M_0 \nabla \Phi)$$

$$\Phi = C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C$$
(17)

$$\boldsymbol{f}_{\sigma} = \frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{\sigma_0 \phi}{\varepsilon} \nabla C \tag{18}$$

$$\rho_M = \frac{1+C}{2}\rho_L + \frac{1-C}{2}\rho_G$$
(19)

$$\mu_M = \frac{1+C}{2}\mu_L + \frac{1-C}{2}\mu_G \tag{20}$$

其中 u = (u, v) 是二维流动的速度矢量, p 是压力, σ_0 是表面张力系数, $g = (g_x, g_y)$ 是 水平和垂直方向的重力加速度, ρ_M 和 μ_M 分别是混合物密度和动力粘度。

如图 2(A)所示,基于相场法的物理信息神经网络:先构造全连接的前馈神经网络(网络的输入变量为 (*x*, *y*, *t*),输出变量为 (*C*, *u*, *v*, *p*),通过自动微分(AD)获得每项导数后,控制方程(由式(15)-(20)可得)和初边界条件用于表达神经网络的物理信息部分,网络中没有任何观测值信息。



图 2 (A) 基于相场法的物理信息神经网络; (B) 基于相场法的物理信息神经网络的不同时间推进策略: (a) 整 个时间域内单网络训; (b) 在不同连续时间序列中的多网络训练^[64]

Fig.2 (A) Illustration of physics-informed neural network for the phase-field method; (B) Different time marching strategies of physics-informed neural networks for the phase-field method: (a) single network training in the whole time domain. (b) multiple-networks training in various time sequences. ^[64]

神经网络可以通过最小化离散采样点的均方总误差 Loss_{total}(式(21))来进行训练:

 $Loss_{total} = Loss_{PDE} + Loss_{IC} + Loss_{BC}$ (21)

当优化器训练神经网络时,它会通过调整权重和偏差来强制降低总误差。一般来说,在 整个空间域中直接训练网络很难收敛。将采样域分成几个部分可以提高网络的准确性并加速 训练过程。为了获得准确的训练结果,研究者提出了一种自适应时间推进策略^[65]。计算域 $\Omega \in (x, y, t)$ 被划分为随时间推进的 N 个小子域 ($\Omega^1, \Omega^2, ..., \Omega^N$), 然后分别采用 N 个子网络 进行求解。原始网络和改进的多网络示意图分别如图 2(B)(a)和(b)所示。在这个策略中,每 个子域的初始条件都是从前一个网络的收敛值中获得的。第一个子域的初始条件可以直接给

出,然后第一个网络就可以实现很好的训练。第一个网络的收敛值将被视为第二个子域的初 始条件。这个过程一直持续到最终网络的收敛值。因为该策略训练网络是随着时间推进逐步 进行的,从而可以促进网络的收敛。

3.2 方程降阶

为了加速神经网络的训练过程(求解速度),Lu等提出了深度混合残差方法,将一个高 阶导数降为多个低阶导数[66]。研究者在基于相场的物理信息神经网络基础上,加入化学能 相场法物理信息神经网络的输入变量为 (x, y, t),输出变量为 (C, u, v, p, ϕ) ,而原来的神经 网络的输入变量为 (x,y,t),输出变量为 (C,u,v,p)。因此,两者的界面演化方程的损失函 数会有所不同,而连续性方程、动量方程和初边值的损失函数是一致的。表一表示了普通形 式神经网络与深度混合残差形式神经网络在界面演化方程和损失函数的区别[67]。

表1 普通形式神经网络与深度混合残差形式神经网络在界面演化方程中的区别[67]

Table 1 Differences between a normal neural network and a deep mixed residual method network in interface

evolution equation ^[67]					
界面演化方程	显式形式 损失函数				
普通形式	$\frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C = \nabla \cdot (M_0 \nabla [C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C]) \qquad L = \left\ \frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C - \nabla \cdot (M_0 \nabla [C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C]) \right\ _2^2$				
深度混合残差形式	$\frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C = \nabla \cdot (M_0 \nabla \phi)$ $\boldsymbol{\phi} = C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C$ $L = \left\ \frac{\partial C}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)C - \nabla \cdot (M_0 \nabla \phi) \right\ _2^2 + \left\ \boldsymbol{\phi} - [C(C^2 - 1) - \varepsilon^2 \nabla^2 C] \right\ _2^2$				

3.3 方程离散化

除了对方程进行降阶处理,还有研究者对复杂方程进行离散化处理,以非均质石油储层 中的油水两相、微可压缩的达西流为例展开说明[68]。油储层是典型的多孔介质的例子,每 个相的质量守恒定律和达西定律控制方程如下:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\omega \rho_a S_a) = -\nabla(\rho_a \boldsymbol{u}_a) + q_a \tag{22}$$

$$\boldsymbol{u}_{a} = -\frac{k_{ra}K}{\mu_{a}} (\nabla \mathbf{p}_{a} + \rho_{a} \mathbf{g})$$
(23)

其中对于油相 α 可表示为 o, 对于水相 α 可表示为 w, ω 表示孔隙度, ρ 表示密度, S 表 示饱和度, u 表示达西速度, q 表示源项, k_r 表示相对渗透率, K 表示绝对渗透率, μ 表

示粘度, P 表示压力, g 是重力加速度。补充方程可表示为:

$$P_0 - P_w = P_c \tag{24}$$

$$S_0 + S_w = 1 \tag{25}$$

使用压缩系数和地表体积因子(FVF),同时忽略重力和毛细管力(当它们对储层动力学的影响远低于其他因素时),可得到以下方程:

$$\frac{\omega S_a}{B_a} \left(M_{\phi} + M_a \right) \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\omega}{B_a} \frac{\partial S_a}{\partial t} = \nabla \left(\frac{k_{ra}K}{B_a \mu_a} \nabla p \right) + q_a \tag{26}$$

其中类似地,对于油相 α 可表示为 o,对于水相 α 可表示为 w, M 和 B 分别表示压缩系数和地表体积因子, M_{ϕ} 表示岩石压缩系数。将油相和水相的两个方程相加可得到压力扩散方程。

$$\left[\frac{\omega S_0}{B_0} \left(M_{\phi} + M_o\right) + \frac{\omega S_w}{B_w} \left(M_{\phi} + M_w\right)\right] \frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \left[\left(\frac{k_{ro}K}{B_o\mu_o} + \frac{k_{rw}K}{B_w\mu_w}\right) \nabla \mathbf{p}\right] + q_o + q_w \tag{27}$$

因此,油水两相达西流可以通过求解式(26)和式(27)进行模拟。

通常采用自动微分获得包含物理控制方程及初边值信息的损失函数。然而,在石油储层 中,物理性质(如渗透率和孔隙率)分布不均匀,目前尚不清楚如何在两个具有不同物理性 质的收集点之间施加质量守恒。此外,注入井和生产井与难以准确模拟的高压力梯度相关。 自动微分的梯度刚度可能会影响神经网络的准确性和收敛性。



图 3 (a) CNN 结构作为模拟和数据同化的求解器; (b) 基于 PICNN 的油藏模拟训练方案[68]

Fig.3 (a) The CNN structure as a solver for simulation and data assimilation; (b) The training scheme for

PICNN-based reservoir simulation^[68]

因此,研究者提出物理信息卷积神经网络的方法(PICNN),如图 3 所示: CNN 的输入 是一个二维图像,以张量的形式存储,表示当前时间步长的压力空间分布,而输出是下一个 时间步长的压力分布。损失函数基于有限体积法(FVM)进行评估。通过 FVM 对控制方程 进行离散化,PDE 残差用神经网络输出表示的离散化方程而不是原始偏微分方程来近似,这 样就不需要采用自动微分。通过两点通量近似(TPFA)方案严格施加质量守恒,并且源(或 汇)附近的高梯度通过井模型近似。具体过程如下:

压力控制方程(27)的有限体积离散化是通过在每个控制体积 i 上积分并运用散度定理 得到的,即:

$$V\alpha \frac{\partial P}{\partial t} = \oint \left(\frac{k_{ro}}{B_o \mu_o} + \frac{k_{rw}}{B_w \mu_w}\right) K \nabla p \cdot \mathbf{n} dS + Q_t$$
(28)

其中 $\alpha = \frac{\omega S_0}{B_0} (M_{\phi} + M_o) + \frac{\omega S_w}{B_w} (M_{\phi} + M_w)$,利用隐式时间积分和 FVM,我们得到每个单元 i:

$$\frac{\nabla \alpha}{\Delta t} \left(\mathbf{p}_i^{n+1} - \mathbf{p}_i^n \right) = \sum_j T_{ij} \left(\mathbf{p}_j^{n+1} - \mathbf{p}_i^{n+1} \right) + Q_t$$
(29)

$$T_{ij} = \left[\left(\frac{k_{ro}}{B_o \mu_o} + \frac{k_{rw}}{B_w \mu_w} \right) \frac{KA}{d} \right]^{Harmonic}$$
(30)

其*中Q_t* = $V(q_o + q_w)$ 是总的体积源项, j 表示 i 的相邻单元, T_{ij} 是单元 i 向 j 的传递率和 j 向 i 传递率的调和平均值, 是 TPFA 的结果, 保证了两个单元之间的质量守恒。将神经网络的输 出代入离散化方程(30)中, 来近似求解最小的 PDE 残差, 可得:

Loss = Loss_{PDE} =
$$\frac{1}{N_P} \sum_{i=1}^{N_P} \left[\frac{V\alpha}{\Delta t} (p_i^* - p_i^n) - \sum_j T_{ij} (p_j^* - p_i^*) - Q_t \right]^2$$
 (31)

其中 p_i^* 是 NN 输出的第 i 个元素代表 p_i^{n+1} , N_p 是总的样本数量,通过最小化 Loss 对 NN 进行训练来获得 p_i^{n+1} 的解, i = 1,2,...,N_p。

压力一旦采用上述方法求解完成,相应时刻的水饱和度可以根据等式(26)进行有限体 积离散化的显式求解。而 PICNN 作为压力的隐式求解器(PDE 残差通过 FVM 近似并作为损 失函数训练 CNN),不需要体系边界信息和观测值的可能原因是:对于接近均质的储层,压 力场在一个时间步内的变化是渐进的,CNN 可以直接用来训练近似局部最小值。

3.4 半物理信息

PINN 方法通常将整个物理控制方程以及相关的初边值嵌入到损失函数中。然而,将完整方程编码到损失函数中可能会在自动微分处消耗大量计算资源。此外,对于两相流问题, 在两种流体界面处,相组成及密度存在剧烈变化,对界面处及其周围梯度计算的准确性提出 了较高的要求。在传统的 CFD 中,这个问题通常是通过加密网格来解决的,但加密网格必 然会增加神经网络的训练时间。Karniadakis 等表明当数据量足够大的时候,即使没有物理信 息,神经网络也能够良好地近似数据。相比之下,只有在小数据的情况下才需要完整的物理 信息^[7]。因此,有研究者提出基于部分物理信息来预测气泡流的 BubbleNet 算法,以二维气 液两相流(空气和水)为例说明,该算法将不可压缩流体的连续方程和压力泊松方程进行编 码到神经网络损失函数中(即半物理信息神经网络),其使用潜在函数 ψ 来预测流场速度 u和 v:

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$
(32)

因此,连续方程自动满足。同时为了提高预测精度,在损失函数中引入压力泊松方程,表达 式为:

$$\nabla^{2} \mathbf{P} = \rho \frac{\nabla \cdot \boldsymbol{u}}{\Delta t} - \rho \nabla \cdot (\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}) + \mu \nabla^{2} (\nabla \cdot \boldsymbol{u})$$
(33)

这两个过程都是通过对输出物理场进行自动微分来实现的。

水平集方法用来捕获空气和水之间的界面,采用全局定义函数的某个水平集或等高线表示(例如二维空间中的水平集函数 $\varphi = \varphi(x, y, t)$)。在单气泡或多气泡流中, φ 是一个平滑的阶跃函数,对于水 φ 定义为0,对于空气 φ 为1。在界面上,有一个从0到1的平滑过渡。因此,界面处水平集定义为0.5。

水平集函数满足以下等式 (34):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \varphi = \gamma \nabla \cdot (\epsilon_{ls} \nabla \varphi - \varphi (1 - \varphi) \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|})$$
(34)

其中 γ 是重新初始化参数, 决定了水平集函数的重新初始化, 可设置为 1。 *ε*_{ls} 是控制界面 厚度的参数, 等于网格最大尺寸。

半物理信息神经网络 BubbleNet 算法的输出变量为 p, ψ 和 φ 。在 BubbleNet 算法中, 需要先通过传统的数值模拟方法获得数据 $U = (u, v, p, \varphi)$, 然后通过式(35)对数据 U 进 行归一化处理获得训练数据 $\mathcal{W} = (u, v, p, \varphi)$:

$$\mathcal{W} = \frac{u - u_{min}}{u_{max} - u_{min}} \tag{35}$$

其中 U_{max} 和 U_{min} 分别被视为每个时间步长 CFD 数据的最大值和最小值。因为流场中物 理量变化很大,这样处理可以消除变化造成的不确定性。

在 BubbleNet 算法中,采用均方误差计算损失函数中预测值和训练值的偏差。使用 \mathcal{W} 表示归一化数据集,并且 $\mathcal{W} = (u, v, p, \varphi)$,则损失函数 Loss 的形式为:

$$\text{Loss} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (\mathcal{W}_{pred(i)} - \mathcal{W}_{train(i)})^2 + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (\nabla^2 P_{(i)})^2$$
(36)

其中, \mathcal{W}_{pred} 是神经网络的预测值, \mathcal{W}_{train} 是从 CFD 模拟中获得的归一化训练数据。 $\nabla^2 P_{(i)}$ 表示训练集 i 样本的压力场, m 是训练集的样本量。

半物理信息神经网络 BubbleNet 的框架如图 4 所示:由三个子网络组成,分别用于推断 *p*, ψ, φ,每个子网络有 9 个隐藏层和 30 个神经元。半物理信息部分通过流体连续方程的自 动微分推断速度 *u*, *v*,并将压力泊松方程插入损失函数中。每个时间步的训练数据需要进 行归一化预处理。泊松方程用 ∇²P 表示,损失函数由推断的 *p*, *u*, *v*, φ 的残差和压力泊 松方程组成。



4 应用

目前物理信息神经网络在两相流中的应用可以分为四大类:气液两相流,多孔介质两相流,液固两相流和两相流传热。

4.1 气液两相流

研究者采用基于相场法的物理信息神经网络方法、基于深度混合残差改进的相场法物理信息神经网络、半物理信息神经网络 BubbleNet 算法求解气液两相流^[64, 67, 69]。

Qiu 等提出了基于相场法的物理信息神经网络方法用于求解气液两相中的单涡剪切流

和气泡上升算例^[64]。在单涡剪切流算例中,初始时气泡形状为圆形,在给定的流场作用下 气泡被拉伸,0-1s内气泡沿顺时针方向运动,1s时变形最大;随后1-2s内气泡沿原轨迹逆 时针恢复初始形状。网络在 t=0s, t=0.5s, t=1s, t=1.5s和 t=2s时相场变量*C*(-1代表气体,1 代表液体)的预测值如图 5(A)所示。基于相场法的物理信息神经网络方法可以准确捕获这一 过程。



图 5 (A) 单涡剪切流中基于相场法的物理信息神经网络相场变量 C 的预测值:(a) t=0s, (b) t=0.5s, (c) t=1s, (d) t=1.5s, (e) t=2s; (B) 气泡上升算例中: (a) 气泡质心位置和(b) 气泡上升速度随时间变化关系(红实线代表基于相场法物理信息神经网络结果,蓝虚线代表来自 Aland 和 Voigt 的参考值)^[64]

Fig.5 (A) Predicted results of phase-field variable C at a reverse single vortex based on physics-informed neural network for the phase-field method (a) t=0s, (b) t=0.5s, (c) t=1s, (d) t=1.5s, (e) t=2s; (B) At bubble-rising problem: temporal evolution of bubble (a) center of mass and (b) rising velocity. (The red solid lines correspond to the present result, while the blue dashed lines correspond to the reference result obtained from Aland and Voigt.) ^[64]

气泡上升算例与单涡剪切流算例相比更为复杂,网络输出变量除了相场变量 C,还有速度 u, v 和压力 p。因此,研究者提出采用前文已介绍的时间推进策略训练神经网络以求解 O 到 3s 时间区间内的 C, u, v, p。图 5(B)表示气泡上升过程中气泡质心位置和上升速度随时间变 化关系。我们可以看到基于相场法的物理信息神经网络预测的气泡质心位置和气泡上升速度 与参考值一致,整个时间序列的平均质心误差和上升速度误差分别为 0.48%和 3.70%,这表明该方法可精确地预测界面演化并恢复气泡周围的速度场,提供了一种在大密度比下模拟两相流的方法。

研究者更进一步基于深度混合残差改进的相场法物理信息神经网络求解瑞丽-泰勒 (Rayleigh-Taylor, RT)不稳定性问题^[67],整个求解区域的空间大小为 $\Omega \in [0, 0.5m] \times [0, 4m]$, 计算时长为 $t \in [0, 3s]$,计算区域上方为重流体 L,下方为轻流体 G,两流体间的初始分界 面可定义为一正弦函数形式的扰动,其扰动函数为 h = -0.1 cos(2πx),初始时刻全场的速 度为 0 m/s。基于深度混合残差改进的相场物理信息神经网络的输入为 (*x*, *y*, *t*),输出变量 除了相场变量、速度、压力还有化学能 φ。同样地采用前文提到的不同时间推进策略训练 网络,如图 6 所示,改进的相场法物理信息神经网络计算得到相分数演化过程与传统的计算 方法类似。此外,涡结构与传统算法得到的涡结构形状吻合,流场中速度矢量方向与大小基 本一致,除卷曲处的界面演化稍有差别,流场中大部分区域内界面形状保持一致。整体而言, 随着训练时间的推移,改进的相场法物理信息神经网络的总误差值在不断上升,速度 x 方向 分量的最大相对误差为 10.92%,速度 y 方向分量的最大相对误差最大为 12.35%。



图 6 (A) RT 不稳定性问题的计算区域和初始条件; (B) RT 不稳定性问题: (a) 改进的 PF-PINNs 预测的相分数演化; (b) 文献结果^[67]

Fig.6 (A) Computational domain and initial condition of RT instability; (B) Comparison of evolution of volume fraction of RT instability : (a) results from modified PF-PINNs (b) results from reference. ^[67]



图 7 (a) 单气泡流和多气泡流的计算区域和初始条件;(b) 单气泡流中 CFD, DNN 和 BubbleNet 中无、有泊松方程获得的物理量 u, v, p, φ 的比较;(c)多气泡流中 CFD, DNN 和 BubbleNet 中无、有泊松方程获得的物理量 u, v, p, φ 的比较^[69]

Fig.7 (a) Computational domain and initial condition of single bubble flow case and multiple bubble flow case; (b) At single flow case: comparison of physical quantity u, v, p, φ between CFD, DNN, BubbleNet (without Poisson equation) and BubbleNet (with Poisson equation); (c) At multiple bubble flow case: comparison of physical quantity u, v, p, φ between CFD, DNN, BubbleNet (without Poisson equation) and BubbleNet (with Poisson equation). ^[69]

Zhai 等则采用半物理信息神经网络 BubbleNet 算法求解气液两相单气泡流和多气泡流, 如图 7 所示^[69]。对于单气泡流情况, 气泡的初始直径为 4 μm, 微通道长度为 15 μm, 宽度

为 5 μm,沿轴向施加压力差 10 Pa 来驱动流体流动,通道末端的压力保持为恒定压力 799.93 Pa, 该数值模拟设置旨在模拟脑血管中的气泡输运以研究血脑屏障。半物理信息神经网络 BubbleNet 算法(有泊松方程)在速度场 *u、v*, 水平集函数 *φ* 以及压力梯度的整体数值幅 度上都表现出良好的精度, *u, v, p, φ* 的平均绝对误差分别为 8.56 × 10⁻⁵, 3.09 × 10⁻⁵, 0.21, 0.0018。对于多气泡流, 60 个微气泡(每个微气泡直径为3 μm)随机分布在长度为 100 μm、宽度为 50 μm的二维微通道中,初始条件和边界条件与单气泡情况相同。因为多 气泡流动较单气泡流动更为复杂,所以预测难度大于单气泡流,BubbleNet 算法(有泊松方 程)预测的 *u, v, p, φ*的平均绝对误差分别为 0.0015, 7.74 × 10⁻⁵, 0.24, 0.0075。此外, 作者比较了深度神经网络(DNN)、BubbleNet 算法(无泊松方程)、BubbleNet 算法(有泊松 方程)三种模型的预测结果。可以发现在单气泡流中 BubbleNet(s)中有泊松方程效果优于无 泊松方程优于 DNN,能准确预测速度分量 *u、v*, m DNN 无法准确预测 *u、v*; 在多气泡流中, BubbleNet(s)方法优于 DNN,但损失函数中有泊松方程对压力预测效果提升不显著。整体而 言,与 DNN 算法相比,BubbleNet 算法因满足质量守恒定律可以提高对速度和水平集函数的 预测结果。

与基于相场的物理信息神经网络不同(需要嵌入全部物理方程但不需要任何训练数据), 半物理信息神经网络 BubbleNet 算法不需要全部的物理方程,但需要少量预测变量 *u*, *v*, *p*, *q* 的训练数据,这可以更加灵活地构建网络框架,得到满足工程需要的结果,同时这也提 出了一个有趣的思路,即我们可以通过选择性地将物理信息引入神经网络来优化网络性能。

4.2 多孔介质两相流

根据求解问题的需要,研究者采用基于残差的概率密度函数采样策略的物理信息神经网络(New Adaptive PINN)、物理信息卷积神经网络(PICNN)、丰富物理信息神经网络(E-PINN)、带有观测值的物理信息神经网络等不同的方法求解多孔介质两相流^[58, 68, 70-72]。

Hanna 等采用基于残差的概率密度函数采样策略的物理信息神经网络求解多孔介质两相流^[58]。如图 8(a)在一维注入案例中,求解域内充满一种流体(流体 1),另一种流体(流体 2)以恒压从左端流入,而右端压力为固定值。结果显示与固定采样点的 PINN 方法相比, New Adaptive PINN 方法提供的压力解更接近解析解。图 8(c)显示了在一维案例中 New Adaptive PINN 方法在不同阶段的不同 PDE 的采样点分布。我们可以发现,对流方程的采样 点在前沿位置比较密集,主要因为那里残差较大,这有助于准确捕获界面位置。而对于达西 定理和质量守恒控制方程,采样点几乎随机分布,因为残差遍布整个域空间,没有要捕获的 尖锐的解特征。在二维案例 8(b)中,如结构复合材料制造工艺(树脂传递模塑),求解域是 一个单位面积的正方形,中心有一个椭圆注射口,压力恒定(P=1),四个外侧是压力设置为 0的出口。New Adaptive PINN 方法可以预测此二维案例中不同时间的相分数函数和压力场, 且 x 和 y 方向的预测流动前沿位置与解析解接近。采用 New Adaptive PINN 可求解多孔介质 中一维和二维两相流问题。此外,采用新的技术比使用固定采样点的经典 PINN 获得了更好 的结果,也比基于残差的自适应细化技术有改进。自适应技术可以看作是神经网络的一种正 则化形式,减少了泛化误差。



图 8 (a) 一维计算区域和初始条件; (b) 二维计算区域和初始条件; (c) 一维示例中随着新的自适应性而演变的采样点(从左到右表示不同的控制方程,每个适应步骤后的新采样点用红色表示)^[58]
Fig.8 (a) Initial condition of one-dimensional computational domain; (b) Initial condition of two-dimensional computational domain; (c) Evolution of collocation points with new adaptivity (from left to right represent

different governing equations and new collocation points after each adaptation step are shown in red.) [58]

当方程较为复杂,前文介绍过的物理信息卷积神经网络的方法(PICNN),对方程进行 离散化处理而不需要标记数据,可用于求解石油储层中的油水两相、微可压缩的含有源/汇 项的达西^[68]。Zhang等在均匀和非均匀油藏模型进行验证该方法。在非均匀油藏模型中,如 图 9(A)和(B)所示:油藏尺寸为100m × 100m×5m,油藏压力初始时刻处处为 20 MPa,水 饱和度为 0.2,注水井位于左下角将水注入油藏,生产井位于右上角从油藏中产出水和油,

19

注水井和生产井的体积流量均为 5 m³/天,另外两个角设置狄利克雷边界条件(压力为固定 值)。图 9(C)显示了非均质油藏测试用例模拟结束时压力场和含水饱和度场,与参考值接近, 平均相对误差小于 1%。图 9(D)显示了非均匀油藏中采用 PICNN 方法得到的生产井井块压力 和井底压力的变化,可以发现与传统有限体积法得到的结果一致。虽然 PICNN 作为隐式求 解器不如传统的多重网格方法(AMM)求解器高效,但基于 PICNN 的隐式求解不强制需要 狄利克雷边界条件,而包括 AMM 在内的传统隐式求解器至少需要一个狄利克雷边界条件。



图 9 (A) 注入井、采油井和边界条件的储层模型; (B) 非均质油藏的渗透率场; (C) 非均质油藏测试用例模 拟结束时: (a) 压力场; 和 (b) 含水饱和度场; (D) 均匀油藏中采用 PICNN 方法和传统有限体积法得到的生 产井井块压力和井底压力的变化^[68]

Fig.9 (A) An illustration of the reservoir model with injector, producer and boundary conditions; (B) The permeability field for the heterogeneous test case; (C) The pressure (a) and water saturation fields (b) at the end of simulation for the heterogeneous test case; (D) The change of well-block and bottom-hole pressures of the producer obtained by PICNN for the heterogeneous reservoir, compared to reference solution by the conventional

FV approach^[68]

由于 PICNN 应用在二维非均质问题存在训练速度慢的问题,此外 PICNN 算法中使用的 CNN 难以处理具有非结构化网格的不规则模型,故 PICNN 不能直接用于裂缝多孔介质。因 此 Yan 等提出了一种丰富的物理信息神经网络(EPINN),用于模拟无需标记数据的二维/三 维非均质和裂缝多孔介质中的两相流^[70]。EPINN 与 PICNN 类似,都采用有限体积离散化控制 方程构造压力损失函数,再通过显式方程求解饱和度。而 EPINN 与 PICNN 不同的是 1)采用 嵌入式离散裂缝模型(EDFM)明确表示裂缝;2)设计一种新的物理信息神经网络架构,采 用邻接位置锚定、自适应激活函数、跳过连接和门控更新,以丰富压力信息并增强神经网络 的学习能力;3)将初始条件和边界条件编码到网络设计中,使网络具有更高的精度和效率。 在二维非均匀油藏模型中,EPINN 和 PICNN 的压力场、湿润相饱和度场与参考值十分接近, 与参考值的相对误差均小于 1%。而 EPINN 与 PICNN 相比,均方误差(MSE)损失下降更快 并保持在较低的水平,训练效率大幅提高。

Sheremetov 等用 PINNs 对天然裂缝储层,酸化增产设计中井附近流体流动进行建模^[72]。 该 PINNs 模型的输入是时空坐标,输出是速度、水饱和度、压力、孔隙率、渗透率和浓度。 每个变量分别用单独的全连接前馈神经网络进行训练,损失函数的构成包括数据误差、偏微 分方程误差(带有达西速度的质量控制方程、对流-扩散方程和化学反应方程)、初始条件和 边界条件误差。数值模拟方法获得的数据集将用于训练和测试 PINNs。基于真实案例:墨西哥 湾 PEMEX 运营的海上油田天然裂缝储层,生产井钻探偏差约为 27°,并已从古新统时期的 Brecha 地层开始生产。为了进行验证,用历史酸刺激数据以及井干预前后的压力测试数据 校准数值模型。把数值模拟的输出的参考解与 PINNs 预测的全场浓度的结果进行对比,发现 PINNs 模型误差为 1.82%。

New Adaptive PINN、PICNN、E-PINN等方法求解多孔介质两相流均不需要标记数据,但 一定程度上存在训练速度慢的问题,为了提高训练效率和预测准确度,研究者提出带有观测 值的物理信息神经网络求解多孔介质两相流^[71,72]。该方法的观测值需要网络全部输出变量 的数据点,这与半物理信息神经网络方法需要的数据点的特点类似,但与半物理信息神经网 络方法不同的是控制方程嵌入了全部控制方程信息而不是部分方程。Shokouhi等在用于预测 二氧化碳存储站点模拟响应的深度学习模型中,建立了输入为二氧化碳注入率、储层的水力 /地质特性(渗透率和孔隙度分布)及时空坐标,输出为产水率、压力及二氧化碳饱和度的 网络映射关系,如图 10(A)所示。比较了四种不同的模型:多层感知机(MLP)单输出训练 STT(即产水率、压力和气体饱和度分别用三个独立网络进行训练),多输出训练 MTT(即产 水率、压力和气体饱和度用一个网络进行训练),基于物理信息无插值点 PI w/o interp(即嵌 入控制方程但不包含观测值),基于物理信息有插值点 PI with interp(即嵌入控制方程同时 包含产水率、压力和气体饱和度观测值)。

表 2 单输出训练(STT)、多输出训练(MTT)、基于物理信息无插值点(PI w/o interp)、基于物理信息有插值点(PI with interp)的 MSE 值(包括产水率、压力和气体饱和度)^[71]

interpolated points) for water production rate, pressure field and gas saturation field.^[71]

Table 2 Recorded MSE Values (original un-normalized scale) for STT (Single-output training), MTT (Multi-output training), PI w/o interp.(Physics-informed without interpolated points), PI with interp.(physics-informed with

场	产水率	压力	气体饱和度
STT	1.05	0.13	4.45×10^{-5}
MTT	1.40×10^{-2}	2.09×10^{-2}	2.43×10^{-5}
PI w/o interp.	4.14×10^{-4}	2.35×10^{-2}	2.11×10^{-5}
PI with interp.	2.52×10^{-4}	5.83×10^{-7}	6.03×10^{-6}

(A)



(B)



图 10 (A) 带有观测值的用于预测压力、气体饱和度和产水率的物理信息神经网络; (B) (a)气体饱和度和(b)压力的真实值、预测值及相应的相对误差的比较:多输出训练(顶部)、基于物理信息无插值点(中间)和基于物理信息有插值点(底部)^[71]

Fig.10 (A) Physics informed neural network with observed values for prediction of pressure, gas saturation and water production; (B) A comparison between the ground truth and predicted value together with the corresponding relative error for (a) gas saturation and (b) pressure field: multi-output data-driven model(top); physics-informed model without interpolated points (middle) and physics-informed model with interpolated points (bottom)^[71] 从表二可以看出与单输出训练模型相比,对三个输出变量使用多输出模型能实现更好的

预测性能,其中产水率的均方误差由 1.05 降低为1.40×10⁻²。由于控制方程的嵌入,物理 信息模型表现优于数据驱动模型,产水率的均方误差进一步减少达到 4.14×10⁻⁴。此外, 当使用插值点训练基于物理信息的模型后,三个输出变量的预测结果与无插值的物理信息模 型相比都能得到改善,其中产水率均方误差由4.14×10⁻⁴减少到2.52×10⁻⁴,压力均方误 差由2.35×10⁻²减少到5.83×10⁻⁷,气体饱和度均方误差由2.11×10⁻⁵减少到6.03×10⁻⁶。 这些结果表明,带有观测值的物理信息神经网络可以显著提高网络的预测准确度。图 10(B) 更加直观的显示了多输出训练(顶部)、基于物理信息无插值点(中间)和基于物理信息有插值 点(底部)的(a)气体饱和度和(b)压力的真实值、预测值及相应的相对误差。可以发现三个算法 都基本能预测出全场的气体饱和度和压力场,但误差从上往下逐渐减少,基于物理信息有插 值点模型误差最小。

4.3 液固两相流

毛细管力会影响液液两相在多孔介质中的分布,主要存在液固界面上。PINN 方法可用 于求解基于毛细管力驱动的两相流。



图 11 (a) 一维自发吸收设置; (b) 瞬态自发渗吸溶液的 PINN 架构^[73]

Fig.11 (a) One-dimensional spontaneous imbibition configuration; (b) PINN configuration for self-similar

spontaneous imbibition solution^[73]

Deng 等利用 PINN 方法解自相似和瞬态场景的自发吸收问题,损失函数主要由一维非稳态不可压缩水平流方程,以及物理规律控制的边界条件(例如毛细管末端效应)构成。考虑下图 11(a)的线性自发吸收问题:在入口处设置具有毛细管末端效应的典型边界条件,毛细管压力为 0;在出口处设置压力边界条件或流量边界条件。自吸收过程可获得顺流和逆流石油产品。R 定义为出口通量与进水通量比值,在非常有限的物理场景将导致自相似解(如 R 为 0 的纯逆流自发吸收或 R 为 1 的单向流),自相似解与时间无关。而在一般情况下 R 随时间变化,这本质是瞬态解,瞬态解(归一化水通量和毛细无量纲群)将与时间有关^[73]。

采用 PINN 求解上述自发吸收问题的瞬态解,如图 11(b)所示网络的输入层包含拉格朗日 空间坐标(与水饱和度有关)和时间坐标(与总吸水量有关),输出层产生两个变量(分别 与平均归一化水通量和毛细无量纲群有关)。图 12 显示了 PINN 的预测结果以及与有限差分 计算结果相比的绝对误差:从图 12(a)中,可以看到归一化水通量随时间的变化,这与瞬态 解的预期相符。更重要的是从毛细无量纲群的图 12(b)的结果中,可以发现 PINN 模型成功捕 获到了物理约束,即毛细无量纲群相对于水饱和度保持不变,但却是时间的函数。图 12(c) 和图 12(d)分别显示了 PINN 预测结果的平均归一化水通量绝对误差在 0.0042 以内,毛细无 量纲群绝对误差在 0.10 以内。



图 12 (a) PINN 预测的瞬时自发吸收平均归一化水通量; (b) PINN 预测的瞬时自发吸收毛细管无量纲群; (c) PINN 和有限差分间的平均归一化水通量的绝对差; (d) PINN 和有限差分间的毛细管无量纲群的绝对差^[73] Fig.12 (a) PINN predicted average normalized water flux for transient spontaneous imbibition; (b) PINN predicted capillary dimensionless group for transient spontaneous imbibition; (c) Absolute difference in average normalized

water flux between PINN and FD results for transient spontaneous imbibition (d) Absolute difference in capillary

dimensionless group between PINN and FD results for transient spontaneous imbibition ^[73]

与传统有限差分方法相比, PINN 计算方法更加简单,尤其是对于瞬态情况。此外,它 允许算法以更大的灵活性采样数据点,这可进一步确保更好的准确性。

Chakraborty 等采用如图 13 所示的 PINN 框架求解毛细管非均匀性的一维稳态两相流, 并应用于不同的流动问题中^[74]。PINN 框架使用可变的输出参数进行训练,这些输入参数包 括相流速(总流速和分流)、渗透值、出口连续性条件和相对渗透率曲线。将如此多的输入 和水力参数变化纳入其中,使得单个神经网络的训练成为可能,该网络可以在可变条件下为 均质两相流问题提供无限解。训练好的 PINN 系统可分别应用于毛细管的每个分段来获得非 均质域的解构造。这种构造允许在几秒内获得具有无限水力不连续性的非均质域的饱和度和 毛细管压力曲线。PINN 模型在 6 个数值模拟和 1 个真实实验等 7 种不同情况下进行测试, 这些情况包括水力结构、各相的流速和水力状态函数(压力和相对渗透率曲线)的变化。结 果表明, PINN 方法结果与传统数值模拟方法结果或真实实验数据具有很好的一致性,在所 有案例中, PINN 预测的饱和度和毛细管压力平均绝对误差均小于 4%。



图 13 求解毛细管非均匀性的一维稳态两相流的 PINN 框架[74]



heterogeneity at various flow conditions $^{\left[74\right] }$

真实实验数据来源于岩心驱替实验。该实验在"谢扎夫"岩石样本上进行,样本来自以 色列阿尔科夫地层的上层,实验条件为 50 ℃的储层温度和 10 MPa 的压力。岩心总长度为 6.6 cm,直径为 4.9 cm。将超临界 CO₂ 和盐水同时注入岩心,总注入速率为 3 mL/min,分流 比为 0.5、0.8、0.9 和 0.95。在稳态条件下的 CT 图像被用于估算三维亚岩心盐水饱和度。采 用如图 13 所示的 PINNs 方法可预测岩心长度内的一维盐水饱和度。下图 14 显示了在不同分 流比条件下得到的实验值(红色交叉点)和 PINNs 预测的(黑色虚线)一维饱和度。从图中 可以看出,训练后的 PINNs 得到了与实验数据匹配的饱和度分布。对于所有测试条件下的不 同分流比值, PINNs 预测值与实际实验的平均绝对误差(MAE)均小于 1%,表明该方法在 实际岩心驱替实验中的适用性。还需注意的是,实验数据中每个切片仅提供一个值(位于切 片入口处),而 PINNs 提供了详细的解,能够以高度细化的分布捕获亚岩心饱和度。



图 14 实际岩心驱替实验的 1D 饱和度剖面(红色十字)和 PINN 预测(黑色虚线),分流比为(a) 0.5、(b) 0.8、(c) 0.9 和(d) 0.95^[74]

Fig. 14 1D saturation profiles of the actual core-flooding experiment (red crosses) and PINNs predictions (dotted black lines) at fractional flows of (a) 0.5, (b) 0.8, (c) 0.90, and (d) 0.95^[74]

这项工作的创新之处在于前文提到的 PINN 方法的研究仅考虑了训练系统的特定情况, 因此,在考虑不同情况(例如边界条件、水力结构和水力特性的) PINN 的结果时,必须进 行重新训练。而在这项工作中 PINN 系统不限于特定情况,可以针对各种结构和输入参数获 得两相问题的解。此外,这项工作提出的 PINN 系统的训练过程中没有纳入任何观测结果(以 测量或数据的形式),因此可以作为数值模型的替代方案。尽管训练过程不如传统的数值方 法高效,但 PINN 系统效率会随着训练系统获得解的数量以及异质性的增加而提高。例如, 具有 50 个渗透率切片结构的传统数值模拟解大约需要 30 min,而训练 PINNs 系统需要大约 3 h。PINNs 训练完毕后可以直接预测不同的条件,而数值模拟需要重新计算。因此,当需 要进行 6 次以上不同的模拟(涉及不同的流速和水力参数)后,PINNs 系统的计算效率将超 过数值模拟的效率。此外,考虑非常异质的域(具有 1000 个渗透率切片),数值模拟的结果 需要 2 h 获得,而 PINNs 系统的训练时间保持不变(约 3h)。这表明,在高度异质性的情况 下,PINNs 解的效率更高,因为在仅计算两个案例后,它的效率就会超过数值模拟。

4.4 两相流传热

上述研究主要集中在冷态, Jalili 等提出如下图 15 所示的 PINN 的框架和训练策略(包含 全部输出变量的观测值及全部方程),在流经加热圆柱体、带温度的单相通道流、两相不互 溶通道流、等温上升气泡和带热量壁面的上升气泡等五个基本案例,研究流动分离、涡流尾 流、浮力和变形界面相互依赖效应^[75]。



图 15 两相流传热 PINN 算法(a) 网络架构; (b) 训练策略[75]

Fig.15 Configuration and training strategy of the PINN algorithm for heat transfer in two-phase flow: (a)

network architecture; (b) training strategy^[75]

其中单向通道流情况表明,无需向 PINN 算法提供边界条件,即可准确推断出热边界层 和动量边界层。对于两相不混溶通道流,PINN 方法可推断出准确的体积分数分布,并准确 重建两相界面。而在等温上升气泡案例中,PINN 算法可准确预测等温椭球上升气泡和裙边 上升气泡流型的全场的体积分数、流速度及气泡质心位置随时间变化曲线。定量和定性的结 果都表明 PINN 可以成功地以合理的精度捕捉等温上升气泡的界面边界的位置。上述过程都 是求解正问题,而 PINN 也可以被用于求解逆问题(使用己知观测数据确定未观测场的行为 ——如由全场体积分数推理相应的速度场)及外推(预测流体性质与先前观测数据不同的气 泡的行为)。在外推中,尽管没有向 PINN 提供有关球冠气泡的任何数据,但因为其通过椭 球气泡和裙边气泡流型训练仍可以高度准确地推导出球冠气泡的形状和轨迹,界面处预测的 体积分数与 CFD 的参考值 MSE 约为 0.08。

在带热量壁面的上升气泡算例中, PINN 能够推断浮力和自然对流对气泡的运动的共轭 效应,准确预测了尾流涡旋对壁面附近流体温度的影响,预测的相浓度和温度的最大误差分 别为 3.6%和 6.8%。因此 Jalili 等提出的策略能准确解决复杂的多相流体流动问题。

5 总结和展望

这篇论文回顾了物理信息神经网络算法思想、及其采样策略、损失函数和物理信息神经 网络算法在气液两相流、多孔介质两相流、液固两相流、两相流传热等领域最新进展。

研究者提出了基于残差的概率密度函数采样策略来控制添加点的选取,改进了原来固定 点采样的策略,以更准确地捕获物理现象。根据求解问题的需要,损失函数中可以不包含观 测值也可以包含网络的全部输出变量的观测值;物理方程可以选择性地嵌入而不是全部嵌入 损失函数中来优化网络性能;原始偏微分方程可以进行离散化处理而不采用自动微分来构造 残差提高网络收敛速度;网络架构也可以不采用 ANN 而采用 CNN 满足变量的空间相关性。

在气液两相流中,基于相场法的 PINN 方法可视为求解器不需要任何观测直接对方程进 行求解,预测的单气泡质心位置和气泡上升速度与参考值一致,精确地预测界面演化并恢复 气泡周围的速度场。改进的相场法物理信息神经网络求解瑞丽-泰勒(Rayleigh-Taylor, RT)不 稳定性问题,计算得到的涡结构与传统算法得到的涡结构形状吻合,流场中速度矢量方向与 大小基本一致。 在多孔介质两相流中,如二维均匀和非均匀油藏模型,EPINN 和 PICNN 求解的压力场、 湿润相饱和度场与参考值十分接近,相对误差均小于 1%。在预测二氧化碳存储站点模拟响 应的深度学习模型中,由于控制方程的嵌入,物理信息模型表现优于数据驱动模型。此外, 当使用观测点训练基于物理信息的模型后,产水率、压力及二氧化碳饱和度等输出变量的结 果都得到显著改善。在液固两相流(如非均匀性的一维稳态两相流),因为 PINN 方法构建 了包括相流速(总流速和分流)、渗透值、出口连续性条件和相对渗透率等多个输入和单一 饱和度输出的映射,训练好的 PINN 网络可分别应用于毛细管的每个分段来获得非均质域的 饱和度。最重要的是,在求解不同情况(例如边界条件、水力结构和水力特性) PINN 的结 果时,不用重新训练,只需针对各种结构和输入参数直接获得两相问题的解。PINN 效率也 会随着训练系统获得解的数量以及固体非均匀性的增加而提高。

基于 PINN 的方法在两相流传热中可以被用于求解流经加热圆柱体、带温度的单相通道 流、两相不互溶通道流、等温上升气泡和带热量壁面的上升气泡等问题。虽然训练网络时需 要网络所有输出变量的观测值及全部的偏微分方程信息,但网络可用于预测流体性质与先前 观测数据不同的气泡的行为(外推)。

由上我们可以看到 PINN 搭建了数据和物理规律的桥梁,求解效率、外推能力可以通过 合适的方法进行提高,PINN 在两相流领域得到广泛的应用。但是目前 PINN 方法在气固两相 流的应用还是空白,这可能与描述气固两相方程较为复杂有关,我们或许可以借鉴其应用在 气液两相流、多孔介质两相流、液固两相流的策略,考虑1)采用简单物理方程或部分方程 嵌入损失函数中 2)获得更多的观测值等方式进行求解。此外,我们的研究发现,PINN 外 推能力是通过大量数据获得的而不是物理方程获得的。总而言之,PINN 是一种全新的方法, 其在不同多相流过程中的应用需要进一步尝试。

参考文献

[1] Dillard L A, Essaid H I, Herkelrath W N. Multiphase flow modeling of a crude-oil spill site with a bimodal permeability distribution[J]. Water Resources Research, 1997, **33**(7): 1617-1632.

[2] Gerritsen M G, Durlofsky L J. Modeling fluid flow in oil reservoirs[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2005, **37**(1): 211-238.

[3] Ferdian E, Marlevi D, Schollenberger J, et al. Cerebrovascular super-resolution 4D Flow MRI– Sequential combination of resolution enhancement by deep learning and physics-informed image processing to non-invasively quantify intracranial velocity, flow, and relative pressure[J]. Medical Image Analysis, 2023, **88**: 102831.

[4] Magnaudet J, Mercier M J. Particles, drops, and bubbles moving across sharp interfaces and stratified layers[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2020, **52**: 61-91.

[5] Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. Journal of Computational Physics, 1981, **39**(1): 201-225.

[6] Chen L Q. Phase-field models for microstructure evolution[J]. Annual Review of Materials Research,2002, **32**: 113-140.

[7] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning[J]. Nature Reviews Physics, 2021, **3**: 422-440.

[8] Moreno Z, Paster A. Prediction of pollutant remediation in a heterogeneous aquifer in Israel: reducing uncertainty by incorporating lithological, head and concentration data[J]. Journal of Hydrology, 2018, **564**: 651-666.

[9] Moreno Z. Fine-scale heterogeneous structure impact on the scale-dependency of the effective hydro-electrical relations of unsaturated soils[J]. Advances in Water Resources, 2022, **162**: 104156.

[10] Moreno Z, Rabinovich A. Evaluating numerical simulation errors of CO 2-brine flow with capillary heterogeneity using a 1D semi-analytical solution[J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2021, **110**: 103416.

[11] Brunton S L, Noack B R, Koumoutsakos P. Machine learning for fluid mechanics[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2020, **52**: 477-508.

[12] Chang C W, Dinh N T. Classification of machine learning frameworks for data-driven thermal fluid models[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2019, **135**: 559-579.

[13] Yan B C, Chen B L, Robert Harp D, et al. A robust deep learning workflow to predict multiphase flow behavior during geological C O 2 sequestration injection and Post-Injection periods[J]. Journal of Hydrology, 2022, **607**: 127542.

[14] Zhang K, Zuo Y D, Zhao H J, et al. Fourier neural operator for solving subsurface oil/water two-phase flow partial differential equation[J]. SPE Journal, 2022, **27**(3): 1815-1830.

[15] Montañez-Barrera J A, Barroso-Maldonado J M, Bedoya-Santacruz A F, et al. Correlated-informed neural networks: a new machine learning framework to predict pressure drop in micro-channels[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, **194**: 123017.

[16] Li W, Bazant M Z, Zhu J E. Phase-Field DeepONet: Physics-informed deep operator neural network for fast simulations of pattern formation governed by gradient flows of free-energy functionals[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2023, **416**: 116299.

[17] Zhao X G, Shirvan K, Salko R K, et al. On the prediction of critical heat flux using a physics-informed machine learning-aided framework[J]. Applied Thermal Engineering, 2020, **164**: 114540.

[18] Seyed-Ahmadi A, Wachs A. Physics-inspired architecture for neural network modeling of forces and torques in particle-laden flows[J]. Computers & Fluids, 2022, **238**: 105379.

[19] Quintino A M, Da Rocha D L L N, Fonseca Junior R, et al. Flow pattern transition in pipes using data-driven and physics-informed machine learning. Journal of Fluids Engineering-Transactions of the Asme. 2021;**143**(3): 031401. Flow Pattern Transition in Pipes Using Data-Driven and Physics-Informed Machine Learning | J. Fluids Eng. | ASME Digital Collection

[20] Wu Y Q, Sun S Y. Removing the performance bottleneck of pressure-temperature flash calculations during both the online and offline stages by using physics-informed neural networks[J]. 2023, **35**(4): 043326.

[21] Cheng Z H, Wachs A. Physics-informed neural network for modeling force and torque fluctuations in a random array of bidisperse spheres[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2023, **169**: 104603.

[22] Dang Z R, Ishii M. Towards stochastic modeling for two-phase flow interfacial area predictions: a physics-informed reinforcement learning approach[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2022, **192**: 122919.

[23] Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures[J].Quarterly of Applied Mathematics, 1987, 45(3): 561-571.

[24] Sirovich L, Kirby M. Low-dimensional procedure for the characterization of human faces[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1987, **4**(3): 519-524.

[25] Kaiser E, Noack B R, Cordier L, et al. Cluster-based reduced-order modelling of a mixing layer[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2014, **754**: 365-414.

[26] Colabrese S, Gustavsson K, Celani A, et al. Smart inertial particles[J]. Physical Review Fluids, 2018,3(8): 084301.

[27] Manohar K, Brunton B W, Kutz J N, et al. Data-driven sparse sensor placement for reconstruction:

demonstrating the benefits of exploiting known patterns[J]. IEEE Control Systems Magazine, 2018, **38**(3): 63-86.

[28] Halko N, Martinsson P G, Tropp J A. Finding structure with randomness: probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions[J]. SIAM Review, 2011, **53**(2): 217-288.

[29] Dong C, Loy C C, He K M, et al. Learning a deep convolutional network for image super-resolution[M]//Lecture Notes in Computer Science. Cham: Springer International Publishing, 2014: 184-199.

[30] Lee Y, Yang H, Yin Z P. PIV-DCNN: cascaded deep convolutional neural networks for particle image velocimetry[J]. Experiments in Fluids, 2017, **58**(12): 171.

[31] Xie Y, Franz E, Chu M Y, et al. tempoGAN: a temporally coherent, volumetric GAN for super-resolution fluid flow[EB/OL]. 2018: 1801.09710.https://arxiv.org/abs/1801.09710v2

[32] Mezić I. Analysis of fluid flows *via* spectral properties of the koopman operator[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2013, **45**: 357-378.

[33] Schmid P J. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2010, **656**: 5-28.

[34] Raissi M, Karniadakis G E. Hidden physics models: Machine learning of nonlinear partial differential equations[J]. Journal of Computational Physics, 2018, **357**: 125-141.

[35] Schmidt M, Lipson H. Distilling free-form natural laws from experimental data[J]. Science, 2009,324(5923): 81-85.

[36] Ling J L, Jones R, Templeton J. Machine learning strategies for systems with invariance properties[J]. Journal of Computational Physics, 2016, **318**: 22-35.

[37] Ling J L, Kurzawski A, Templeton J. Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2016, **807**: 155-166.

[38] Raissi M, Wang Z C, Triantafyllou M S, et al. Deep learning of vortex-induced vibrations[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2019, **861**: 119-137.

[39] 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.

[40] Huang Y, Zhang Z Y, Zhang X. A direct-forcing immersed boundary method for incompressible flows based on physics-informed neural network[J]. Fluids, 2022, **7**(2): 56.

[41] Shukla K, Jagtap A D, Karniadakis G E. Parallel physics-informed neural networks *via* domain decomposition[J]. Journal of Computational Physics, 2021, **447**: 110683.

[42] Raissi M, Yazdani A, Karniadakis G E. Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations[J]. Science, 2020, **367**(6481): 1026-1030.

[43] Bararnia H, Esmaeilpour M. On the application of physics informed neural networks (PINN) to solve boundary layer thermal-fluid problems[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2022, **132**: 105890.

[44] Cai S Z, Wang Z C, Fuest F, et al. Flow over an espresso cup: inferring 3-D velocity and pressure fields from tomographic background oriented schlieren *via* physics-informed neural networks[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2021, **915**: A102.

[45] Laubscher R. Simulation of multi-species flow and heat transfer using physics-informed neural networks[J]. 2021, **33**(8): 087101.

[46] Laubscher R, Rousseau P. Application of a mixed variable physics-informed neural network to solve the incompressible steady-state and transient mass, momentum, and energy conservation equations for flow over in-line heated tubes[J]. Applied Soft Computing, 2022, **114**: 108050.

[47] Cai S Z, Mao Z P, Wang Z C, et al. Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: a review[J]. Acta Mechanica Sinica, 2021, **37**(12): 1727-1738.

[48] Bradley W, Kim J, Kilwein Z, et al. Perspectives on the integration between first-principles and data-driven modeling[J]. Computers & Chemical Engineering, 2022, **166**: 107898.

[49] Díez P, Huerta A. A unified approach to remeshing strategies for finite element h-adaptivity[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1999, **176**(1/2/3/4): 215-229.

[50] Askes H, Rodríguez-Ferran A. A combined *rh*-adaptive scheme based on domain subdivision.
Formulation and linear examples[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2001,
51(3): 253-273.

[51] Babuška I, Suri M. Thepandh-pVersions of the finite element method, basic principles and properties[J]. SIAM Review, 1994, **36**(4): 578-632.

[52] Zhang X D, Trépanier J Y, Camarero R. A posteriori error estimation for finite-volume solutions of hyperbolic conservation laws[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2000, **185**(1): 1-19.

[53] McRae D S. R-Refinement grid adaptation algorithms and issues[J]. Computer Methods in Applied

Mechanics and Engineering, 2000, 189(4): 1161-1182.

[54] Lee D, Tsuei Y M. A formula for estimation of truncation errors of convection terms in a curvilinear coordinate system[J]. Journal of Computational Physics, 1992, **98**(1): 90-100.

[55] Choudhary A, Roy C. Efficient residual-based mesh adaptation for 1d and 2d cfd applications 49th aiaa aerospace sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition. https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/6.2011-214

[56] Roy C. Strategies for driving mesh adaptation in cfd (invited) 47th aiaa aerospace sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition.

https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/6.2009-1302

[57] Lu L, Meng X H, Mao Z P, et al. DeepXDE: a deep learning library for solving differential equations[J]. SIAM Review, 2021, **63**(1): 208-228.

[58] Hanna J M, Aguado J V, Comas-Cardona S, et al. Residual-based adaptivity for two-phase flow simulation in porous media using Physics-informed Neural Networks[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2022, **396**: 115100.

[59] Gurtin M E, Polignone D, Viñals J. Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter[J]. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 1996, **6**(6): 815-831.

[60] Ma C, Wu J, Zhang T W. A high order spectral difference-based phase field lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows[J]. Physics of Fluids, 2020, **32**(12): 122113.

[61] Kou J S, Wang X H, Zeng M L, et al. Energy stable and mass conservative numerical method for a generalized hydrodynamic phase-field model with different densities[J]. Physics of Fluids, 2020, **32**(11): 117103.

[62] Dadvand A, Bagheri M, Samkhaniani N, et al. Advected phase-field method for bounded solution of the Cahn-Hilliard Navier-Stokes equations[J]. Physics of Fluids, 2021, **33**(5): 053311.

[63] De Rosis A, Enan E. A three-dimensional phase-field lattice Boltzmann method for incompressible two-components flows[J]. Physics of Fluids, 2021, **33**(4): 043315.

[64] Qiu R D, Huang R F, Xiao Y, et al. Physics-informed neural networks for phase-field method in two-phase flow[J]. Physics of Fluids, 2022, **34**(5): 052109.

[65] Zhao C L W, 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.

[66] Lyu L Y, Zhang Z, Chen M X, et al. MIM: a deep mixed residual method for solving high-order

partial differential equations[J]. Journal of Computational Physics, 2022, 452: 110930.

[67] 丘润荻, 王静竹, 黄仁芳, 等. 改进的物理融合神经网络在瑞利-泰勒不稳定性问题中的应用 [J]. 力学学报, 2022, 54(8): 2224-2234.

Qiu R D, Wang J Z, Huang R F, et al. The application of modified physics-informed neural networks in Rayleigh-Taylor instability[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2022, **54**(8): 2224-2234.

[68] Zhang Z, Yan X, Liu P Y, et al. A physics-informed convolutional neural network for the simulation and prediction of two-phase Darcy flows in heterogeneous porous media[J]. Journal of Computational Physics, 2023, **477**: 111919.

[69] Zhai H F, Zhou Q, Hu G H. Predicting micro-bubble dynamics with semi-physics-informed deep learning[J]. AIP Advances, 2022, **12**(3): 035153.

[70] Yan X, Lin J Q, Wang S, et al. Physics-informed neural network simulation of two-phase flow in heterogeneous and fractured porous media[J]. Advances in Water Resources, 2024, **189**: 104731.

[71] Shokouhi P, Kumar V, Prathipati S, et al. Physics-informed deep learning for prediction of CO₂ storage site response[J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2021, **241**: 103835.

[72] Sheremetov L, Lopez-Peña L A, Díaz-Cortes G B, et al. Deep learning model of two-phase fluid transport through fractured media: a real-world case study[M]//Lecture Notes in Computer Science. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024: 55-68.

[73] Deng L C, Pan Y W. Application of physics-informed neural networks for self-similar and transient solutions of spontaneous imbibition[J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2021, **203**: 108644.

[74] Chakraborty A, Rabinovich A, Moreno Z. Physics-informed neural networks for modeling two-phase steady state flow with capillary heterogeneity at varying flow conditions[J]. Advances in Water Resources, 2024, **185**: 104639.

[75] Jalili D, Jang S, Jadidi M, et al. Physics-informed neural networks for heat transfer prediction in two-phase flows[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2024, **221**: 125089.

35