

DOI: 10.7511/jslx20230411001

区域压缩 PINN 算法在双曲守恒律方程求解中的应用

张蕊, 郑素佩*, 董安国, 汪浏博

(长安大学 理学院, 西安 710064)

摘要:为捕捉双曲守恒律方程间断,提高算法求解精度,本文应用区域压缩 PINN(physics-informed neural networks)算法对双曲守恒律方程近似求解。首先,对物理方程添加速度梯度监测函数,以此识别和压缩大梯度区域;随后,针对不同初始条件的双曲守恒律方程,设定相应的大梯度区域压缩控制系数,降低其在损失函数中占的比重;最后,将带有速度梯度权重项的损失函数放入神经网络中训练,通过最小化损失函数学习方程在整个区域上的解。利用区域压缩 PINN 算法求解各种经典双曲守恒律问题,通过对满足不同初始条件的一维和二维双曲守恒律方程进行数值模拟,并与经典 PINN 算法结果进行比较,验证了区域压缩 PINN 算法的良好性能。

关键词:双曲守恒律方程;PINN 算法;区域压缩;梯度权重;激波

中图分类号:O241.82

文献标志码:A

文章编号:1007-4708(2024)05-0935-07

1 引言

作为一类特殊的偏微分方程,双曲守恒律方程涉及的物理模型在气象、航空航天和化工等工程领域有着广泛应用。如通常使用浅水波方程模拟潮汐、灌溉和浅水海洋等波动问题,用交通流方程模拟各种交通现象,用二维 Burgers 方程模拟各种流体的湍流现象等,因此如何高精度求解该类方程具有很大现实意义。但这类方程不论初始条件如何光滑,随着时间推进其解都可能发生间断,这给方程求解带来极大困难。在过去几十年间,传统的数值求解方法在理论与应用方面都取得了巨大成就^[1-3]。该类算法的求解对网格依赖性强,对算法要求高,高维问题不易计算。

随着数据与计算资源的爆炸式增长,近年来以深度学习为代表的机器学习技术在众多领域取得了革命性成果,如图像识别^[5]、自然语言处理^[6]、认知科学^[7]和基因组学^[8]等。由于深度神经网络强大的近似表征能力以及处理非线性系统的能力,一些学者开始利用深度神经网络算法求解复杂 PDE (Partial Differential Equations) 问题。Raissi 等^[9-11]

提出了一种 PINN 算法处理与 PDE 相关的正问题和反问题。然而该算法对双曲守恒律问题求解在大梯度附近可能会出现抹平和伪振荡等现象。而后, Mao 等^[12]在大梯度附近对分散数据点采取随机聚类方式捕捉解的间断,以此提高求解精度。Jagtap 等^[13]将区域分解技术应用用于处理守恒律问题,提出了 cPINN (conservative PINN), 即在每个子域上使用一个单独的 PINN, 而后通过相应的守恒量将所有子域缝合起来, 该方法使得预测结果更准确。Lu 等^[14]提出了一种基于残差的自适应细化方法, 此方法是通过在陡峭梯度附近增加残差点, 以便更好捕捉间断。但上述三种方法需预先判断间断位置, 使得实现起来很复杂。赵青宇等^[15]利用 BP 神经网络求解双曲守恒律方程, 实现了对任一给定时间层数值解的预测。为提高 PINN 算法在间断区域的求解精度, 一些研究开始倾向于对光滑区域和间断区域分开处理。Liu 等^[16]通过构造加权函数提高激波捕捉能力, 先训练光滑区域, 逐步迫使梯度大区域的网络预测良好, 但目前只用于求解一维 Burgers 方程和部分 Euler 问题, 对一些经典问题是否适用有待进一步研究。

收稿日期:2023-04-11; 修改稿收到日期:2023-07-14.

基金项目:国家自然科学基金(11971075;12101073);陕西省重点产业创新链项目(2020ZDLGY09-09)资助。

作者简介:郑素佩*(1978-),女,博士,副教授,硕士生导师(E-mail:zsp2008@chd.edu.cn).

引用本文:张蕊,郑素佩,董安国,等.区域压缩 PINN 算法在双曲守恒律方程求解中的应用[J].计算力学学报,2024,41(5):935-941.
ZHANG Rui,ZHENG Su-pei,DONG An-guo,et al. Application of region compression PINN algorithm in solving hyperbolic conservation laws[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics,2024,41(5):935-941.

受文献[16]思想启发,本文在经典 PINN 损失函数中嵌入速度梯度监测函数,通过设定梯度权重项系数,最小化损失函数获得最优的网络结构。下文用区域压缩 PINN 求解几类具有不同特点的双曲守恒律问题,由算例结果验证该算法的泛化能力。

2 双曲守恒律方程

一维双曲守恒律方程的一般形式为

$$U_t + f(U)_x = 0, \mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}, f(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{U}) \\ f_2(\mathbf{U}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{U}) \end{bmatrix} \quad (1)$$

式中 $x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}^+$ 和 $\mathbf{U} = \mathbf{U}(x, t)$ 为守恒型变量, $f(\mathbf{U})$ 为 x 方向的通量函数, $f(\mathbf{U})$ 关于 \mathbf{U} 的偏导数为

$$A(\mathbf{U}) = \frac{\partial f(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial u_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial u_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_1} & \frac{\partial f_n}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial u_n} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$A(\mathbf{U})$ 为 $f(\mathbf{U})$ 的雅可比(Jacobi)矩阵,若其有 n 个实特征值,且有 n 个线性无关的实特征向量与之对应,则称式(1)是双曲型的。

类比一维情况,二维守恒律方程的一般形式为

$$U_t + f(\mathbf{U})_x + g(\mathbf{U})_y = 0, \quad (3)$$

式中 $(x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}^+, \mathbf{U} = \mathbf{U}(x, y, t)$ 为守恒变量, $f(\mathbf{U})$ 为 x 方向的通量函数

$$g(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} g_1(\mathbf{U}) \\ g_2(\mathbf{U}) \\ \vdots \\ g_n(\mathbf{U}) \end{bmatrix} \text{ 为 } y \text{ 方向的通量函数。其对应的}$$

雅可比矩阵 $A(\mathbf{U})$ 与 $B(\mathbf{U})$ 分别为

$$A(\mathbf{U}) = \frac{\partial f(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}}, B(\mathbf{U}) = \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \quad (4)$$

对任意 $(m_x, m_y)^T \in \mathbb{R}^2$, 矩阵 $m_x A(\mathbf{U}) + m_y B(\mathbf{U})$ 若有 n 个实特征值,且有 n 个线性无关的实特征向量与之对应,则称式(3)是双曲型的。

3 区域压缩 PINN 算法

3.1 经典 PINN 算法^[9]

PINN 算法是将描述演化过程的物理方程和约束条件(初始、边界和混合)作为损失函数编码到神经网络中进行训练,通过最小化损失函数使得所有空间域上的点最符合演化方程和约束条件。以一维为例, PINN 算法如图 1 所示。

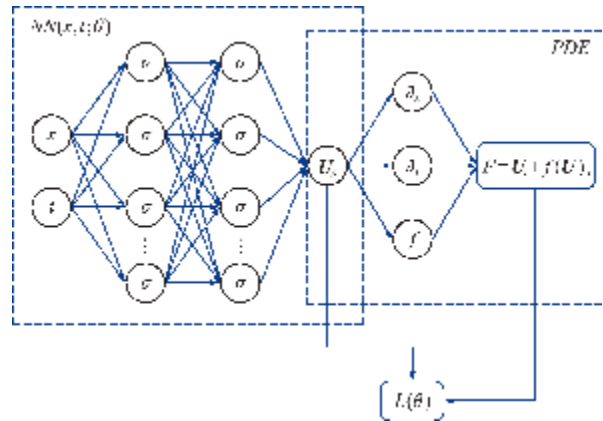


图 1 经典 PINN 算法
Fig. 1 Classical PINN

图 1 中 U_θ 为网络预测值, θ 为神经网络与 PDE 方程的共享参数。PINN 的损失函数由初边界条件约束(式(6))与偏微分方程约束(式(7))两部分构成。经典 PINN 算法损失函数可表示为

$$L(\theta) = \text{MSE}_U + \text{MSE}_F \quad (5)$$

$$\text{MSE}_U = \frac{1}{N_u} \sum_{i=1}^{N_u} |U_\theta^i - U(x_u^i, t_u^i)|^2 \quad (6)$$

$$\text{MSE}_F = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |F(x_f^i, t_f^i)|^2 \quad (7)$$

式中 (x_u^i, t_u^i) 为初始点与边界点, (x_f^i, t_f^i) 为内部训练点。

3.2 区域压缩 PINN 算法

经典 PINN 在求解含有激波等间断的双曲守恒律方程时,可能会出现抹平和伪振荡等现象。本文将速度梯度监测函数嵌入物理方程,通过压缩间断区域提高间断表达能力。区域压缩 PINN 损失函数可表示为

$$L(\theta) = \omega_1 \text{MSE}_U + \omega_2 \text{MSE}_F \quad (8)$$

式中 MSE_U 同式(6), MSE_F 可表示为

$$\text{MSE}_F = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \left| \frac{F(x_f^i, t_f^i)}{\eta_\nabla} \right|^2 \quad (9)$$

添加权重使初始条件的损失比方程本身更快最小化,可保证网络更准确学习初始数据,从而更精确预测解,下文算例均基于 $\omega_1 = 10$ 和 $\omega_2 = 1$ 。式(9)中 η_∇ 为梯度相关量

$$\eta_\nabla = \lambda(|\nabla \cdot \mathbf{u}| - \nabla \cdot \mathbf{u}) + 1 \quad (10)$$

$\nabla \cdot \mathbf{u}$ 为速度散度,光滑区域 $\eta_\nabla = 1$, MSE_F 等同于式(7);间断区域激波出现, η_∇ 增大导致 MSE_F 接近 0,从而减弱间断位置的表达。下文针对不同初始条件和不同方程,通过设定梯度权重项系数 λ 的取值优化神经网络,提高算法求解精度。

4 数值算例

用区域压缩 PINN 算法求解双曲守恒律方程,并与经典 PINN 算法结果相比较。下文算例均基于 TensorFlow 1.15 版本训练,采用全连接神经网络,激活函数选取双曲正切函数 tanh,采用网格加密熵稳定格式的解作参考解。

4.1 交通流问题

作为制约国家经济发展的重要因素之一,交通运输问题的研究具有重要的理论及实际意义。用区域压缩 PINN 算法对实际交通流现象进行数值模拟,验证算法的泛化能力及其高分辨率特点。

算例 1 考虑一维标量情形下的交通流 LWR

(Lighthill Whitham Richards)模型满足如下初始条件

$$u_t + [u(1-u)]_x = 0 \quad (x \in \mathbb{R}, t > 0) \quad (11)$$
$$u(x, 0) = \begin{cases} 1/2 & (x < 0) \\ 1 & (x > 0) \end{cases}$$

Dirichlet 边界条件为 $u(-1/2, t) = 1/2, t \in [0, 1]$, 此时为交通拥堵问题。神经网络选用 5 个隐藏层,每层 20 个神经元,随机选取 110 个初边界点和 4000 个内置点进行训练,使用 L-BFGS 算法迭代至收敛,取式(10)中 $\lambda = 0.1$ 。图 2 为经典 PINN 与区域压缩 PINN 在 $t = 0.2, 0.3$ 和 0.4 时刻的预测解,结果表明区域压缩 PINN 可有效识别间断,明显优于经典 PINN。

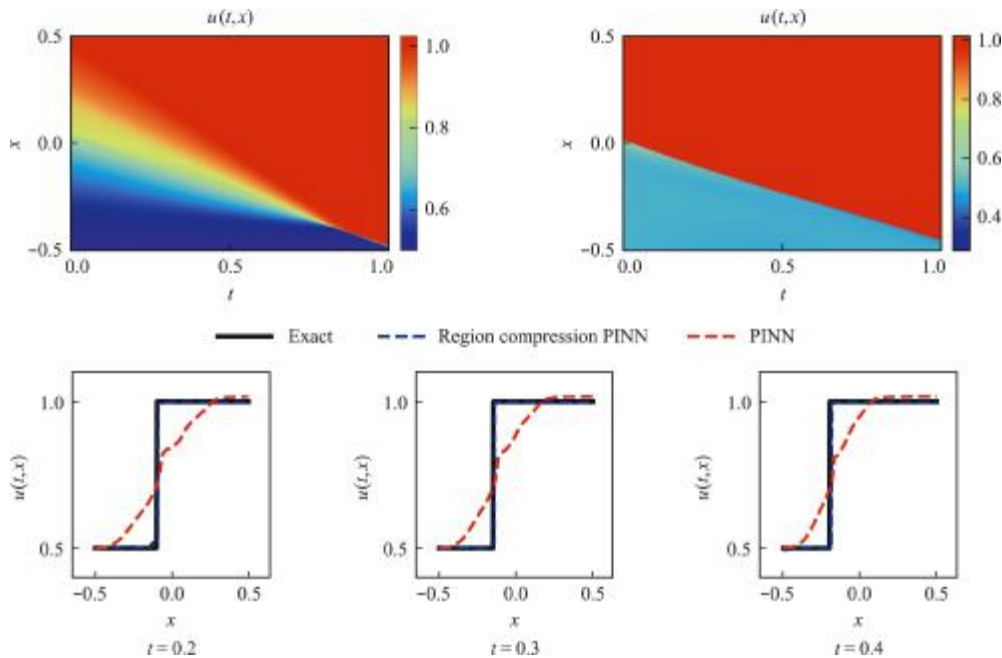


图 2 算例 1 结果对比
Fig. 2 Comparison of results on example 1

4.2 一维 Euler 方程

Euler 方程是无粘性流体动力学中最重要的基础方程,其数值结果有着重要的研究意义和应用价值。用区域压缩 PINN 算法对 Euler 方程进行数值模拟,验证算法的泛化能力。Euler 方程具有如下形式的守恒变量 \mathbf{U} 和通量函数 $f(\mathbf{U})$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix}, f(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}$$

式中 ρ 为密度, u 为流体速度, p 为压力, E 为单位体积总能,满足状态方程 $E = p/(\gamma - 1) + (1/2)\rho u^2$, 其中 $\gamma = 1.4$ 为比热比。

算例 2 单激波误差传递

在 $x \in [0, 1]$ 满足初始条件

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (0.532258, 1.206045, 0.3) & (x < 0.5) \\ (1.5, 0, 1.5) & (x > 0.5) \end{cases}$$

计算时间 $t = 0.15$, 神经网络选用 8 个隐藏层,每层 20 个神经元,随机选取 100 个初始数据、5000 个内置点进行训练,采用 L-BFGS 优化算法迭代至收敛,取式(10)中 $\lambda = 0.1$ 。 $t = 0.15$ 时刻经典 PINN 与区域压缩 PINN 解对比如图 3 所示。结果表明,经典 PINN 不能有效识别激波,而区域压缩 PINN 可以很好地捕捉激波。

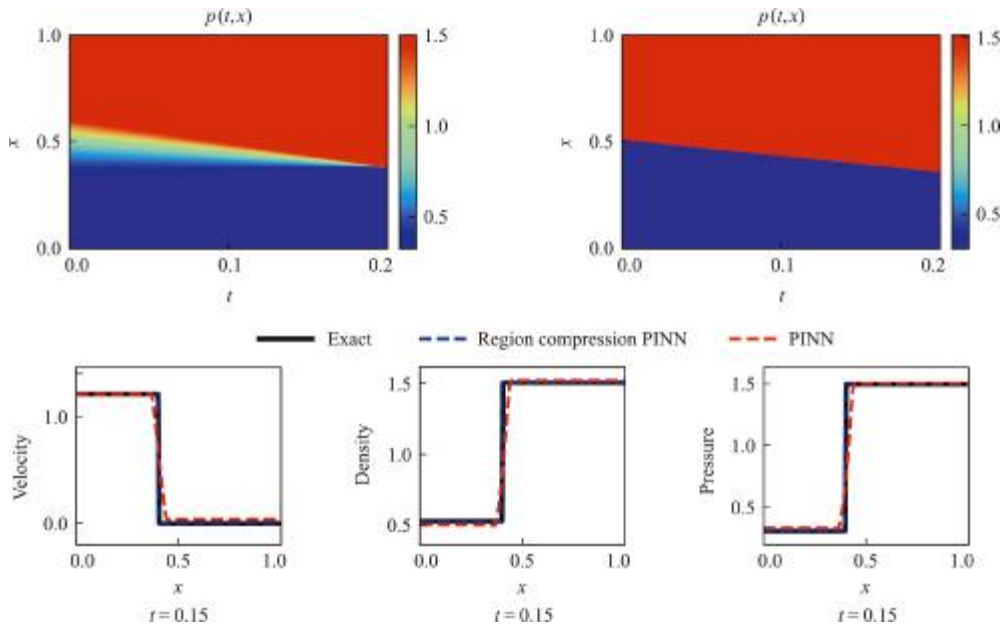


图3 算例2结果对比
Fig. 3 Comparison of results on example 2

4.3 浅水波方程

浅水波方程常用模拟灌溉、潮汐和海洋波浪等问题。用区域压缩 PINN 算法对具有不同特点的溃坝问题进行数值模拟,验证算法的泛化能力。浅水波方程具有如下形式的守恒变量 \mathbf{U} 和通量函数 $f(\mathbf{U})$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} h \\ hu \end{bmatrix}, f(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} hu \\ hu^2 + gh^2/2 \end{bmatrix}$$

式中 h 为总水深, u 为 x 方向的平均流速, g 为恒定加速度。

算例3 一维溃坝问题

在 $x \in [-1, 1]$ 上满足初始条件为

$$h(x, 0) = \begin{cases} 2 & (x < 0) \\ 1 & (x > 0) \end{cases}, u(x, 0) = 0$$

计算时间 $t = 0.4$, 总水深 h 由左行稀疏波和右行激波组成。隐藏层及神经元的选取同算例2, 随机选取 300 个初始数据、10000 个内置点训练, 该网络先采用 Adam 训练, 再使用 L-BFGS 优化算法迭代至收敛, 取式(10)中 $\lambda = 0.1$ 。PINN 与区域压缩 PINN 在 $t = 0.13, 0.26$ 和 0.39 时刻的解对比如图 4 所示。数值结果表明, 经典 PINN 虽能识别稀疏波, 但不能很好地捕捉激波, 而区域压缩 PINN 在激波捕捉方面优于 PINN。

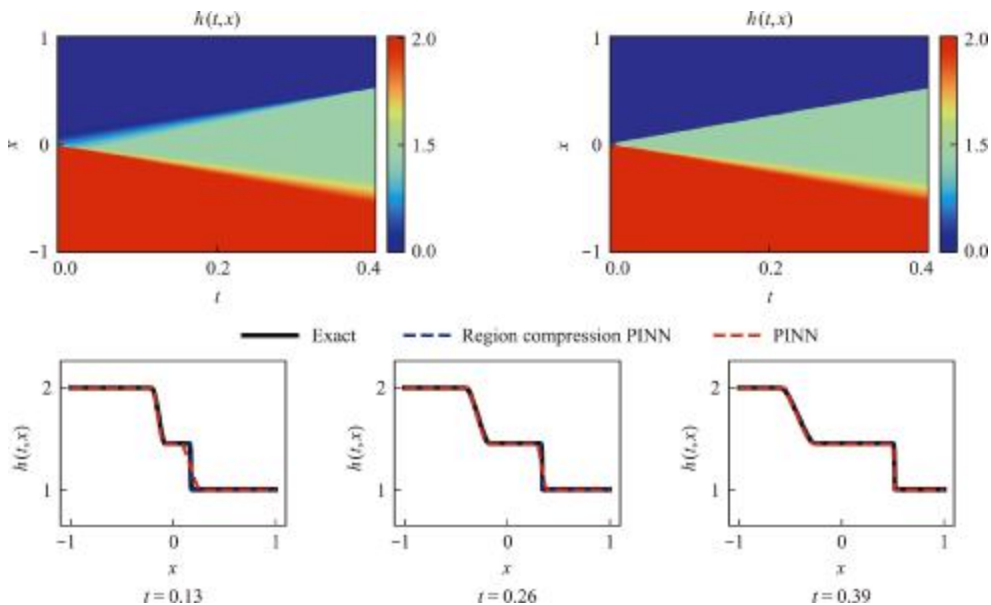


图4 算例3结果对比
Fig. 4 Comparison of results on example 3

算例4 理想溃坝水流实例

理想溃坝问题是典型的非线性流算例,经常用于检验算法对强间断的捕捉能力^[17]。方程满足初始条件

$$h(x,0) = \begin{cases} 5 & (x \leq 1/2) \\ 1 & (x > 1/2) \end{cases}, u(x,0) = 0$$

计算区间 $x \in [0, 1]$, 计算时间 $t = 0.2$, 水深 h 由左行稀疏波和右行激波组成。隐藏层及神经元的

选取同算例2,随机选取300个初始数据、10000个内置点进行训练,该网络先采用Adam训练,再使用L-BFGS优化算法进行迭代至收敛,取式(10)中 $\lambda = 0.049$ 。经典PINN与区域压缩PINN在 $t = 0.05, 0.10$ 和 0.15 时刻的解对比如图5所示。相较于经典PINN求解中出现的抹平和振荡现象,区域压缩PINN在强间断上仍有较强的激波捕捉能力,可以很好地抑制数值的振荡,能准确处理间断问题。

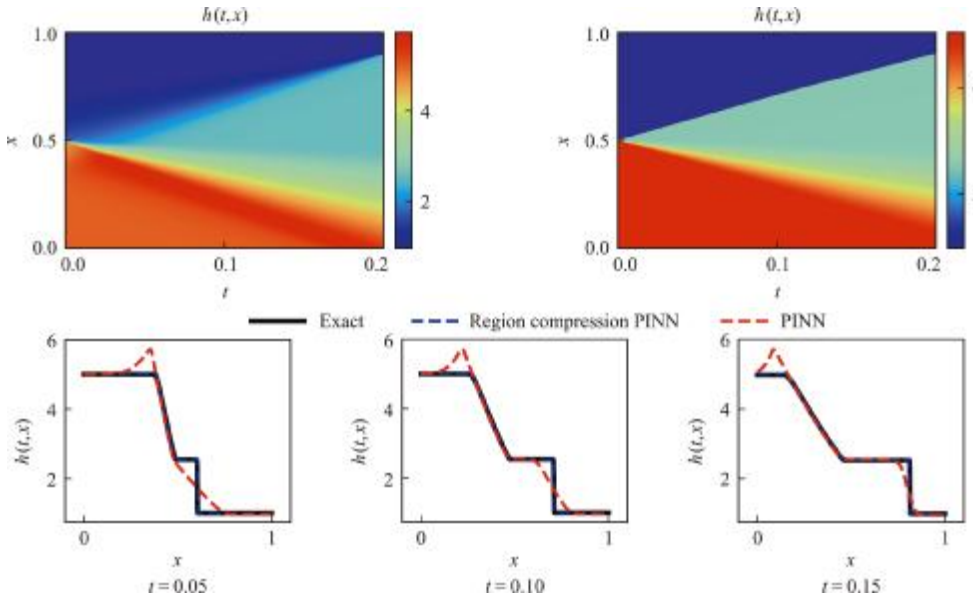


图5 算例4结果对比

Fig. 5 Comparison of results on example 4

算例5 相遇水波问题

在 $x \in [-1, 1]$ 上满足初始条件

$$h(x,0) = 1, u(x,0) = \begin{cases} 0.5 & (x < 0) \\ -0.5 & (x > 0) \end{cases}$$

计算时间 $t = 0.6$, 总水深 h 由一个双激波组成。

隐藏层及神经元的选取同算例2,随机选取300个初始数据、35000个内置点进行训练,该网络先采用Adam训练,接着用L-BFGS优化算法迭代至收敛,取式(10)中 $\lambda = 0.089$ 。PINN与区域压缩PINN在 $t = 0.2, 0.4$ 和 0.6 时刻的解对比如图6所

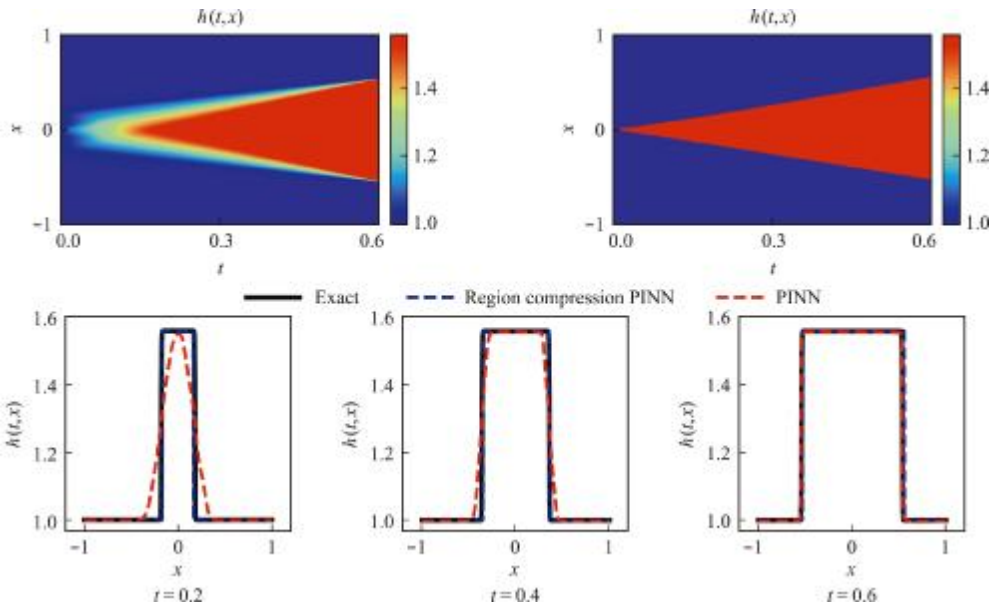


图6 算例5结果对比

Fig. 6 Comparison of results on example 5

示。数值结果表明,区域压缩 PINN 在双激波问题识别上明显优于 PINN。

4.4 二维 Burgers 方程

二维 Burgers 方程广泛应用于模拟各种流体的湍流现象,由于伴随时间推移会有激波产生,所以模拟比较困难。下文基于区域压缩 PINN 算法求解该类方程验证算法的可行性。

算例 6 二维无黏 Burgers 方程

$$u_t + u(u_x + u_y) = 0 \quad ((x, y) \in \mathbb{R}^2, t > 0) \quad (12)$$

在 $z = (x, y) \in [0, 1]^2$ 上满足初边界条件

$$\phi(z) = \begin{cases} 1 & (z \in [0, 1/2]^2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

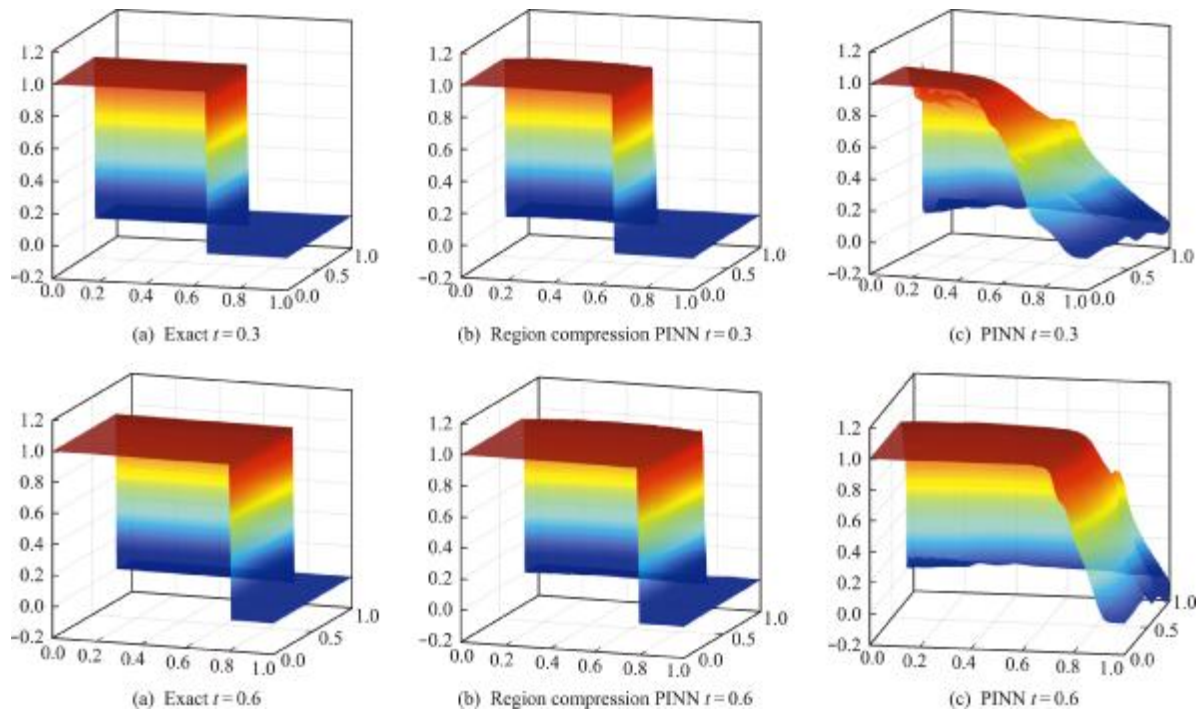


图7 算例6结果对比

Fig. 7 Comparison of results on example 6

5 结论

本文通过在 PINN 损失函数中嵌入速度梯度监测函数,设定梯度权重项中大梯度区域压缩控制系数,求解了几类经典的双曲守恒律问题。数值结果表明,区域压缩 PINN 算法在激波等间断问题的捕捉上具有显著优势。网络训练过程中发现,损失函数中梯度权重系数的大小严重影响数值结果,如何自适应选择权重还需进一步研究。

参考文献(References):

[1] Ismail F, Roe P L. Affordable, entropy-consistent Euler flux functions II: Entropy production at shocks [J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, **228** (15): 5410-5436.

$$u(x, 0, t) = \begin{cases} 1 & (x < (1/2)(t+1), t \in [0, 1]) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$$u(0, y, t) = \begin{cases} 1 & (y < (1/2)(t+1), t \in [0, 1]) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

网络优化过程中选取 5 个隐藏层,每层 20 个神经元,随机选取 400 个初边界点、30000 个内置点进行训练,该网络先采用 Adam 训练,再用 L-BFGS 优化算法迭代至收敛,取式(10)中 $\lambda = 0.08$ 。经典 PINN 与区域压缩 PINN 在 $t = 0.3$, $t = 0.6$ 时刻的解对比如图 7 所示。结果表明,经典 PINN 在求解激波问题时会出现大范围抹平现象,而区域压缩 PINN 可以相对较好地捕捉到激波。

[2] Harten A, Hyman J M. Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws [J]. *Journal of Computational Physics*, 1983, **50**(2): 235-269.

[3] 翟梦情,李琦,郑素佩. 求解一维理想磁流体方程的移动网格熵稳定格式 [J]. *计算力学学报*, 2023, **40** (2): 229-236. (ZHAI Meng-qing, LI Qi, ZHENG Su-pei. A moving-grid entropy stable scheme for the 1D ideal MHD equations [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2023, **40** (2): 229-236. (in Chinese))

[4] Tang H Z, Tang T. Adaptive mesh methods for one-and two-dimensional hyperbolic conservation laws [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2003, **41**(2): 487-515.

- [5] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks [J]. *Communications of the ACM*, 2017, **60**(6): 84-90.
- [6] Li H. Deep learning for natural language processing: Advantages and challenges [J]. *National Science Review*, 2018, **5**(1): 24-26.
- [7] Lake B M, Salakhutdinov R, Tenenbaum J B. Human-level concept learning through probabilistic program induction [J]. *Science*, 2015, **350**(6266): 1332-1338.
- [8] Alipanahi B, DeLong A, Weirauch M T, et al. Predicting the sequence specificities of DNA-and RNA-binding proteins by deep learning [J]. *Nature Biotechnology*, 2015, **33**(8): 831-838.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Yazdani A, Lu L, Raissi M, et al. Systems biology informed deep learning for inferring parameters and hidden dynamics [J]. *PLoS Computational Biology*, 2020, **16**(11): e1007575.
- [12] Mao Z P, Jagtap A D, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks for high-speed flows [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, **360**: 112789.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] 赵青宇, 郑素佩, 李霄. 机器学习在求解一维双曲守恒律方程中的应用 [J]. *计算力学报*, 2022, **39**(2): 229-236. (ZHAO Qing-yu, ZHENG Su-pei, LI Xiao. Application of machine learning in solving one-dimensional hyperbolic conservation law equation [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2022, **39**(2): 229-236. (in Chinese))
- [16] Liu L, Liu S P, Xie H, et al. Discontinuity computing using physics-informed neural networks [J]. *Journal of Scientific Computing*, 2024, **98**(1): 22.
- [17] 耿艳芬, 王志力, 金生. 一维浅水方程的高精度GODUNOV格式 [J]. *水动力学研究与进展(A辑)*, 2005, **20**(4): 507-512. (GENG Yan-fen, WANG Zhili, JIN Sheng. A high resolution GODUNOV-type scheme for one dimensional shallow water flow [J]. *Chinese Journal of Hydrodynamics*, 2005, **20**(4): 507-512. (in Chinese))

Application of region compression PINN algorithm in solving hyperbolic conservation laws

ZHANG Rui, ZHENG Su-pei*, DONG An-guo, WANG Liu-bo

(School of Science, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

Abstract: In order to capture the discontinuities and improve the accuracy of the algorithm, the region compression PINN algorithm is used to approximate the hyperbolic conservation laws. First of all, the velocity gradient monitoring function is added to the physical equation to identify and compress the large gradient region. Then, for hyperbolic conservation laws with different initial conditions, the corresponding compression control coefficient of the large gradient region is set to reduce its proportion in the loss function. Finally, the loss function with the velocity gradient weight term is put into the neural network for training, and through learning the solution of the equation over the entire region is obtained by minimizing the loss function. This paper applies this algorithm to various classical cases, by numerical simulation of one-dimensional and two-dimensional hyperbolic conservation laws satisfying different initial conditions. Compared with the results of classical PINN algorithm, the good performance of this algorithm is verified.

Key words: hyperbolic conservation laws; PINN algorithm; region compression; gradient weight; shock wave