

基于物理信息神经网络求解燃烧问题

刘诗雨, 王海鸥, 罗 坤, 樊建人

(浙江大学能源高效清洁利用全国重点实验室, 杭州 310027)

摘要: 提出基于物理信息神经网络 (physics-informed neural networks, PINNs) 框架求解燃烧问题. 考虑三类不同燃烧问题来评估模型性能: 零维绝热恒压反应器、一维层流预混自由传播火焰和二维层流非预混三叉火焰. 结果表明, 在零维和一维问题中, PINNs 可以实现不同燃烧工况模拟, 准确预测着火延迟时间或层流火焰速度. 在二维问题中, PINNs 能够较好预测速度、组分质量分数、温度等变量分布、准确捕捉火焰结构. 本文工作发掘了 PINNs 应用于实际燃烧问题的潜力, 为结合物理信息约束的燃烧模型开发提供了新的思路和方法.

关键词: 基于物理信息神经网络; 多类燃烧场景; 燃烧

中图分类号: TK11

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2025)03-0245-10

Physics-Informed Neural Networks for Combustion Problems

Liu Shiyu, Wang Haiou, Luo Kun, Fan Jianren

(State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: In the present work, a physics-informed neural networks (PINNs) framework was established for combustion problems. Three different combustion configurations are considered to assess the performance of the proposed PINNs, i.e., zero-dimensional (0D) adiabatic constant-pressure reactor, one-dimensional (1D) freely propagating premixed flame, and two-dimensional (2D) non-premixed triple flame. For the 0D and 1D problems, it was found that the predicted profiles of species mass fractions and temperature by PINNs agree well with those of Cantera. The ignition delay time and laminar flame speed under various operating conditions can be accurately captured using PINNs. For the 2D problems, it was found that the velocity, temperature, and species distributions can be predicted by PINNs with high accuracy. The results highlight the potential of PINNs for solving the combustion problems, and provide a new insight for the development of physics-informed combustion models.

Keywords: physics-informed neural networks; multiple combustion problems; combustion

近年来,机器学习(machine learning, ML)方法被广泛地应用于各类燃烧问题研究中^[1],如化学动力学计算加速^[2]、亚网格燃烧建模^[3]以及燃烧动力学模型不确定性分析^[4]等.然而,大多数机器学习模型往往依赖于大量实验或高保真模拟数据,尽管有着较好的非线性拟合及预测能力,但此类数据驱动模型通常无

法从训练数据中学习得到可解释的物理规律,其应用受限于特定数据特征范围,难以外推.为提高模型的可解释性,结合物理信息约束的机器学习方法受到了越来越多的关注^[5],其中一个代表性的例子就是基于物理信息的神经网络 (physics-informed neural networks, PINNs). Raissi 等^[6]最早提出 PINNs 这一概

收稿日期: 2024-06-14.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52022091, 51976185).

作者简介: 刘诗雨(1998—),女,博士研究生, shiyuliu@zju.edu.cn.

通信作者: 王海鸥,男,博士,研究员, wanghaiou@zju.edu.cn.

念,并将其用于求解多种类型的偏微分方程 (partial differential equations, PDEs). PINNs 的实现效果类似传统数值求解器,其能够在给定的初始条件/边界条件 (initial conditions/boundary conditions, IC/BC) 约束下求解方程,得到方程解。

目前,在纯流动问题中, PINNs 已被成功应用于求解各类流动条件下的纳维斯托克斯 (Navier-Stokes, N-S) 方程^[7]。例如, Jin 等^[8]使用 PINNs 通过求解速度-压力 (VP) 和涡量-速度 (VV) 两种形式的 N-S 方程,准确模拟了不可压层流以及湍流流动。Mao 等^[9]探讨了基于 PINNs 求解一维 (one-dimensional, 1D) 和二维 (two-dimensional, 2D) 高速空气流动问题的可能性。Wang 等^[10]基于 N-S 方程约束,成功从稀疏的粒子图像测速 (particle image velocity, PIV) 和粒子跟踪测速 (particle tracking velocimetry, PTV) 数据中重建得到高分辨速度场。除纯流动问题外, PINNs 也越来越多地被应用于多物理场问题中,如流动-传热耦合^[11-12]、多组分扩散^[13-14]。如 Cai 等^[12]使用 PINNs 从三维温度场快照中推理得到连续的三维速度和压力场信息。Laubscher 等^[14]基于多组 PINNs 模型成功预测了二维稳态空气蒸发的速度、组分质量分数及温度物理场分布。综上所述, PINNs 在流体动力学领域已展现出了较大的应用潜力和价值。

然而,在燃烧领域,尽管已有部分工作使用了 PINNs 求解刚性的化学动力学问题^[15],但很少有研究基于求解燃烧问题进行展开。不同于流动问题,燃烧涉及到剧烈的化学反应和多组分变化,其复杂的物理特性和控制方程大大增加了 PINNs 训练及应用的难度。现有的一些开源 PINNs 库,如 DeepXDE^[16]、Modulus^[17]和 NeuralPDE^[18]等也很少针对具体的燃烧问题进行开发工作,目前这些库所支持的偏微分方程对燃烧求解并不适用。

在这样的背景下,本文提出一个自建 PINNs 框架,探讨了 PINNs 求解燃烧问题的可能性。文中考虑了 3 种不同类型的燃烧问题,包括零维绝热恒压反应器、一维层流预混自由传播火焰和二维层流非预混三叉火焰。通过与数值求解器模拟结果的对比,本文定量评估了 PINNs 在求解不同燃烧问题及燃烧工况下的模型性能。

1 燃烧问题设置

1.1 燃烧设置及控制方程

本文的零维 (zero-dimensional, 0D) 燃烧问题基

于绝热恒压反应器模拟。求解该 0D 问题所涉及的质量、组分输运和温度方程如下:

$$\begin{aligned} \frac{dm}{dt} &= 0 \\ \frac{d(\rho Y_k)}{dt} &= \dot{\omega}_k \\ \frac{d(\rho T)}{dt} &= -\sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k / c_p \end{aligned}$$

式中: m 和 ρ 分别表示流体质量和密度。 Y_k 是第 k 个组分的质量分数。 $\dot{\omega}_k$ 和 h_k 分别是不同组分的反应速率和焓。 c_p 为混合物定压比热容。燃烧问题中具体的初始条件设置将在第 3 节给出。

求解 1D 和 2D 燃烧问题所涉及的控制方程包括质量、动量、组分质量分数和温度方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k \\ \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j T) &= \frac{1}{c_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \\ &\quad \sum_{k=1}^N \frac{c_{p,k}}{c_p} J_{k,j} \cdot \nabla T - \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k / c_p \end{aligned}$$

式中: λ 为导热系数; D_k 是扩散系数; $J_{k,j}$ 表示组分通量分量。

在求解一维自由传播火焰时,质量及动量方程可以简化为^[19]

$$\rho_u = \text{constant} = \rho_u S_L$$

式中: ρ_u 是未燃反应物密度; S_L 为层流火焰速度。为稳定模型训练过程中的火焰位置,本文引入一固定温度点 T_{fix} 作为额外训练约束,如图 1 所示。文中默认设置 $T_{\text{fix}} = 1000 \text{ K}$ 、 $L_{\text{fix}} = 0.35 L$,其中 L 为计算域长度。

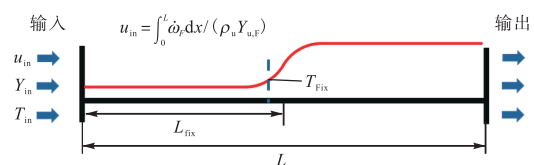


图 1 1D 层流预混自由传播火焰示意
Fig.1 Schematic of the 1D freely propagating premixed flame

当固定特定温度点时,层流火焰速度 S_L 将作为方程特征值^[20]进行求解,其计算公式为

$$S_L = u_{\text{in}} = \int_0^L \dot{\omega}_f dx / (\rho_u Y_{u,F})$$

式中 $Y_{u,F}$ 为未燃燃料的质量分数.

在 2D 燃烧问题中, 非预混三叉火焰^[21]算例设置如图 2 所示. 燃烧计算域设置为 $L_x \times L_y = 0.25 \text{ cm} \times 0.45 \text{ cm}$. 在入口处, 空气和甲烷分别从左右侧流入, 入口速度 u_{in} 满足如下函数分布:

$$u_{in} = u_{u,F} + (u_{u,O} - u_{u,F}) \cdot (1 - \tanh((x - 0.65L_x) / \delta_y)) / 2$$

式中空气速度为 $u_{u,O} = 6 \text{ m/s}$, 甲烷速度为 $u_{u,F} = 2 \text{ m/s}$, 混合层厚度为 $\delta_y = 0.84 \times 10^{-5} \text{ m}$.

入口温度曲线与速度一致, 其中空气温度为 $T_{u,O} = 1000 \text{ K}$, 甲烷温度为 $T_{u,F} = 500 \text{ K}$. 壁面设置为等温壁面, 两侧温度与对应侧的入口温度一致. 出口边界为一个大气压的恒压边界.

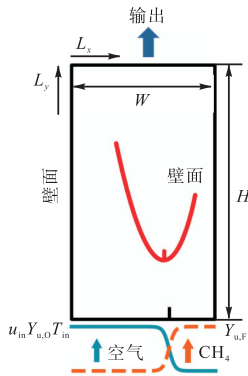


图 2 2D 层流非预混三叉火焰示意

Fig.2 Schematic of the 2D non-premixed triple flame

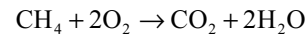
1.2 热力学及输运参数

数值模拟以及 PINNs 训练中所使用的热力学和输运参数计算方法在本小节给出. 基于理想气体假

设, 气体密度 ρ 计算为 $\rho = pW / RT$, 其中 R 是理想气体常数, W 为平均分子质量. 气体黏度 μ 近似为温度的函数, 计算为 $\mu = 1.935 \times 10^{-5} (T/300)^{0.76} \text{ m}^2/\text{s}$. 混合气体比定压热容 c_p 计算公式为 $c_p = \sum_{k=1}^N c_{pk} Y_k$, 其中各组分的比热容和焓均由 NASA 多项式^[22]计算得到. 本文使用常普朗特数 (Prandtl number, Pr) 和单位刘易斯数 (Lewis number, Le) 假设, 其中 $Pr = 0.7$, $Le = 1$. 在此假设的基础上, 导热系数 λ 和扩散系数 D_k 可分别计算为 $\lambda = \mu c_p / Pr$ 及 $D_k = \lambda / \rho c_p Le$.

1.3 化学反应机理

本文使用甲烷/空气一步反应机理^[23]模拟上述燃烧问题:



其正向反应速率 K 由阿累尼乌斯公式计算:

$$K = A e^{(-E_a/RT)} \phi_{\text{CH}_4}^{n_{\text{CH}_4}} \phi_{\text{O}_2}^{n_{\text{O}_2}}$$

式中: A 是反应指前因子, 取值为 $A = 1.1 \times 10^{10} \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s})$; E_a 是反应活化能, 取值为 $E_a = 83.8 \text{ kJ/mol}$; n 是对应组分的反应指数, $n_{\text{CH}_4} = 1$, $n_{\text{O}_2} = 0.5$.

2 PINNs 方法

2.1 PINNs 概述

图 3 展示了 PINNs 模型的大体框架. 模型输入为若干时空坐标 $\mathbf{x}(x, y, z, t)$, 其中包括来自计算域和边界/初始域的采样坐标. 模型输出为方程近似解, 若将 PINNs 记为 F , 则模型训练目标为: 通过网络参数 θ 近似方程解 $\tilde{u} = F(\mathbf{x}, \theta)$.

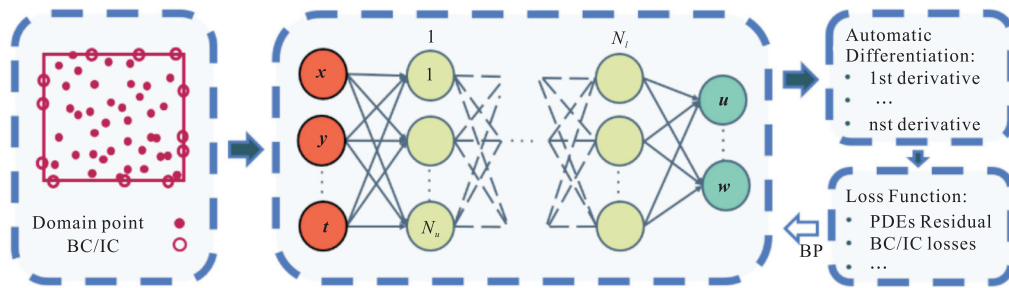


图 3 PINNs 框架示意

Fig.3 Schematic of the PINNs framework

模型训练时所使用的损失函数 L 通常包括方程残差 L_r 、初始条件约束 L_{ic} 或边界条件约束 L_{bc} :

$$L = L_r + \alpha L_{ic} + \beta L_{bc}$$

式中: α 和 β 为权重系数, 用以平衡不同损失函数项 (本文默认权重取值为 100).

本文 PINNs 训练时所涉及的具体损失函数形式在图 4 中给出. 其中, N_r 、 N_{ic} 和 N_{bc} 分别表示每轮次 (epoch) 模型训练在计算域、初始场和边界上随机采样点的数量, 表 1 给出了求解各燃烧问题时具体的采样点数量设置.

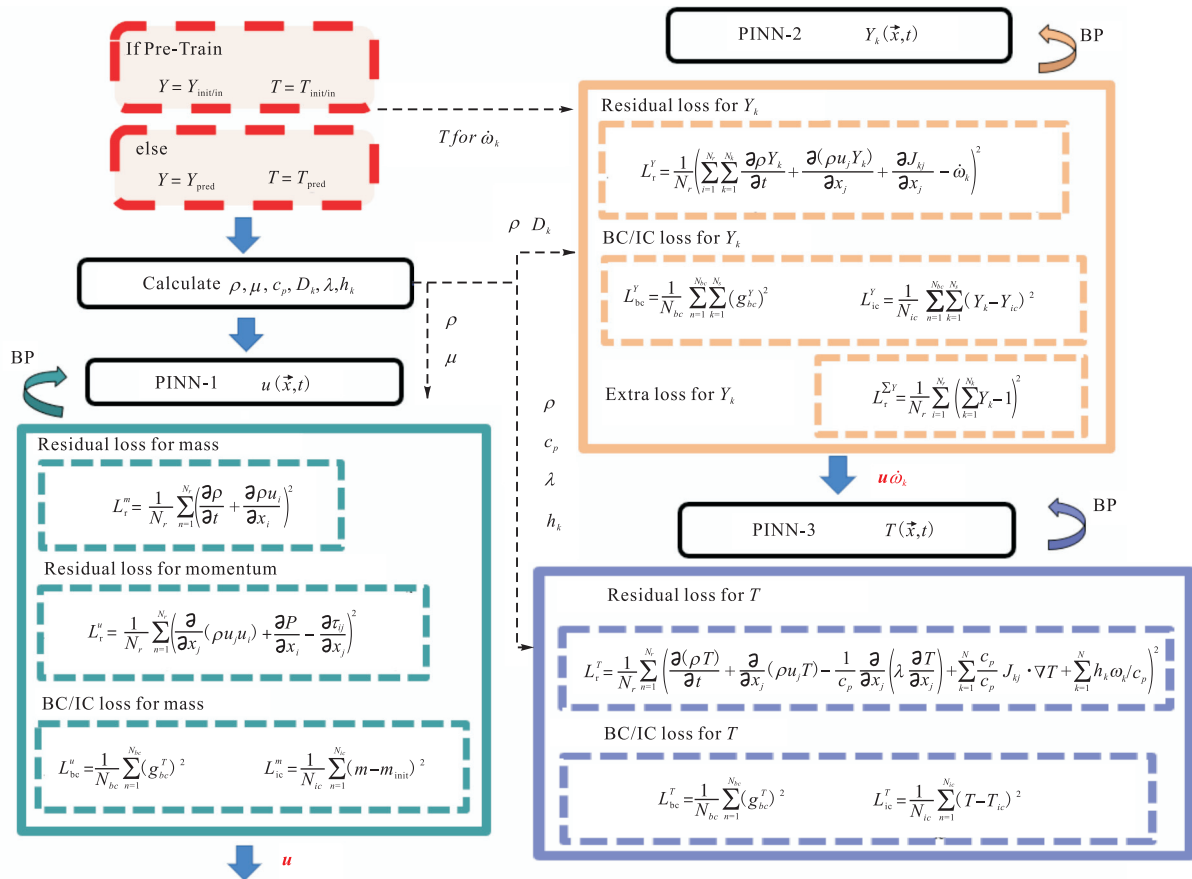


图4 PINNs训练流程示意

Fig.4 The diagram of the PINNs training process

表1 不同燃烧问题下采样点数量

Tab.1 Number of sampling points for different combustion problems

燃烧问题	N_r	N_{ic}	N_{bc}
0D	256	64	—
1D	256	—	64
2D	1 024	—	256

2.2 PINNs模型结构

如图3所示,本文使用的PINNs模型基于全连接神经网络,网络结构大小表征为 $N_1 \times N_n$, N_1 为线性隐藏层数量, N_n 为每层神经元数量. 表2给出了求解各燃烧问题时具体使用到的模型结构大小(模型结构大小设置依据在第3节给出).

在全连接神经网络结构基础上,本文引入自适应线性层^[24]和正弦激活函数^[25]替换常规的线性层和常规的ReLU或Tanh激活函数来进一步提高模型性能. 自适应线性层可以使模型训练更具针对性. 其权重会在训练损失较大处自适应增加,实现类似注意力机制^[26-27]的模型效果. 相较常规激活函数,正弦激活函数也在表示复杂信号及其导数方面有更强的表现能力. 本文使用均匀分布 U 来初始化神经网络权重

W , 即 $W \sim U(-\sqrt{6/f_{in}}, \sqrt{6/f_{in}})$, 其中 f_{in} 为对应层输入特征大小. 同时,使用缩放因子 w_0 提升正弦激活函数表征能力(本文默认设置 $w_0 = 10$).

表2 求解不同燃烧问题时PINNs网络结构大小

Tab.2 PINNs size for different combustion problems

燃烧问题	N_1	N_n
0D	7	50
1D	5	100
2D	7	100

2.3 PINNs训练过程

PINNs训练的整体流程在图4中给出. 3个独立的PINNs模型分别被用来学习质量和动量方程(PINN-1)、组分输运方程(PINN-2)和温度方程(PINN-3). 从图中可以看到,模型训练分为两个阶段. 在预训练阶段(pre-train),控制方程中所涉及的热力学/输运参数和反应速率由已知的初始条件值(0D问题)或边界条件值(1D和2D问题)计算得到,由此对PINNs训练进行预热,帮助3组模型的耦合和收敛. 本文所使用的预训练轮次一般设置在200左右. 在预训练后,热力学/输运参数和反应速率由

PINNs 预测得到的组分质量分数和温度计算, 模型进入正式训练阶段。

针对 0D 非稳态问题, 本文采用自适应时间采样方法^[28]提高模型训练准确性。例如, 在模型训练前先将目标时间域 $[0, t]$ 等分为 n 个区间。训练开始时模型首先会在时间域 $[0, t_1]$ 中进行时间随机采样, 专注于学习 t_1 ($t_1 = t/n$)时刻前的方程解。当该解趋于收敛时, 时间采样区域将扩展为 $[0, t_2]$, 其中 $t_2 = 2t/n$, 由此依次训练, 直到求解至 t 时刻。在 1D 和 2D 问题中, 本文针对特定计算域进行加密采样以加速模型收敛, 如在训练过程中适当增加 2D 三叉火焰上游强反应区的坐标采样点数量。

模型训练使用 Adam 优化器^[29]进行权重及偏置学习, 使用 StepLR 方法调整学习率, 初始学习率设为 0.001。使用 Pytorch^[30]下的自动微分^[31](Automatic Differentiation, AD)求导计算方程残差, 并通过损失函数梯度反向传播(back propagation, BP)更新网络参数。为平衡各损失函数项及帮助模型收敛, 训练所涉及的所有物理量均进行了归一化处理。本文使用一张 NVIDIA Tesla A100 GPU 芯片进行模型训练, 0D 和 1D 问题训练时间约为 10 min; 2D 问题训练时间约为 30 min。

3 结果与讨论

本节讨论分析了 PINNs 求解 3 类不同燃烧问题的模拟结果。在 0D 和 1D 问题中, 本文使用开源软件 Cantera^[32]与 PINNs 结果进行对比; 在 2D 问题中, 使用直接数值模拟程序 S3D^[33]进行结果对比。

3.1 零维绝热恒压反应器

本小节首先探讨了模型结构大小对其性能的影响。以压力 $p=0.1\text{MPa}$ 、当量比 $\phi=1$ 、初始温度 $T_{\text{init}}=1000\text{K}$ 的 0D 算例为例, 表 3 列出了不同模型大小 $N_1 \times N_n$ 下对应的组分质量分数 Y 、温度 T 和反

应速率 $\dot{\omega}$ 的平均相对误差。平均相对误差 ε 计算如下:

$$\varepsilon = \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \frac{|y_i - y_{i, \text{PINNs}}|}{y_i} \times 100\%$$

式中: y_i 是由 Cantera 计算得到的参考值; $y_{i, \text{PINNs}}$ 为 PINNs 预测值。表 3 中 ε_Y 和 $\varepsilon_{\dot{\omega}}$ 为各组分误差平均值。

表 3 0D 问题不同模型结构下 PINNs 平均相对误差

Tab.3 Mean relative errors with different PINNs sizes

燃烧问题	$\varepsilon_Y / \%$	$\varepsilon_T / \%$	$\varepsilon_{\dot{\omega}} / \%$
3 × 50	5.76	2.31	6.54
3 × 70	2.07	0.67	5.78
3 × 100	4.92	2.63	2.97
5 × 50	0.36	0.19	0.26
3 × 50	5.76	2.31	6.54
5 × 70	0.46	0.22	0.41
5 × 100	0.36	0.2	0.46
7 × 50	0.29	0.14	0.21
7 × 70	0.5	0.27	0.57
7 × 100	0.48	0.21	0.43
10 × 100	3.79	8.32	3.29

从表中可以看出, 使用过大或过小的网络结构会导致模型过拟合或欠拟合问题, 使得其性能下降。当网络结构设置为 $N_1 \times N_n = 7 \times 50$ 时, PINNs 预测误差相对最小。因此, 本文使用该结构大小进行 0D 燃烧问题的训练。在 1D 和 2D 问题中, 模型结构大小的选择也同样进行了类似测试, 最终选定的模型参数可见表 2。

图 5 给出了模型训练过程中 3 组 PINNs 模型 (PINN-1、PINN-2 和 PINN-3) 分别对应的损失函数曲线。从图中可以看到, 随着训练轮次增加, PINNs 损失函数值逐渐接近于零, 模型趋于收敛。为具体评估训练收敛后的模型性能, 本文基于 PINNs 对不同燃烧工况下的 0D 问题进行了模拟验证。着火延迟时间 τ 是 0D 燃烧问题中的一个重要变量, 图 6 给出了 PINNs 和 Cantera 在不同初始压力 (0.1 MPa 和 1.0 MPa)、当量比 (0.6、0.8 和 1.0) 和温度 (1 000 ~

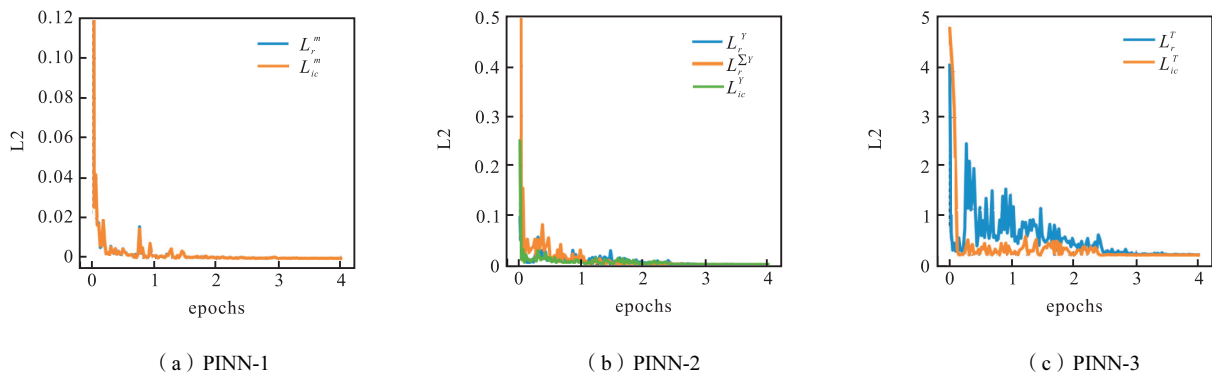


图 5 PINNs 模型损失函数曲线

Fig.5 The loss functions of the three PINNs during the training process

1500 K) 条件下的着火延迟时间 τ . 可以看到, 通过方程和初始条件的约束, PINNs 在训练收敛后能够学习得到相关燃烧物理规律, 实现着火延迟时间的准确模拟.

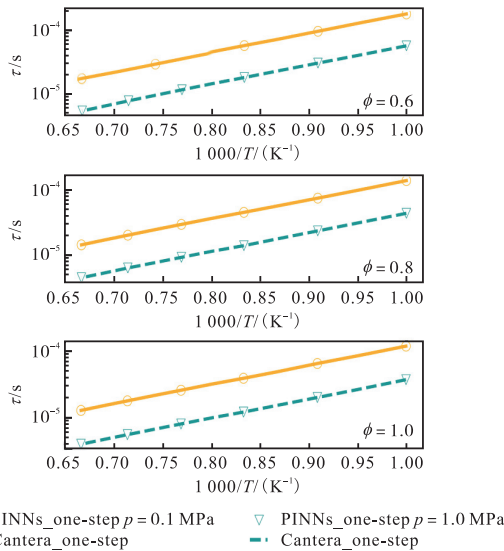


图 6 0D 问题不同初始条件下的着火延迟时间
Fig.6 Ignition delay for various initial conditions of 0D

图 7 具体展示了 3 组不同 0D 燃烧算例(具体初始条件设置见表 4)下组分质量分数 Y_k 、温度 T 和氧气反应速率 $\dot{\omega}_{O_2}$ 的 PINNs 和 Cantera 模拟结果, 以及各变量对应的平均相对误差. 从图中可以看出, 3 组算例中的平均相对误差值均小于 1%, PINNs 可以准确地模拟 0D 燃烧问题, 反映其着火过程.

3.2 一维层流预混自由传播火焰

在 1D 燃烧问题中, 本文首先对组分输运方程进行了收支 (Budget) 分析, 以展示方程中对流项 $C = \partial(\rho u_j Y_k) / \partial x_j$ 、扩散项 $D = \partial(\rho D_k \partial Y_k / \partial x_j) / \partial x_j$ 和反应项 $R = \dot{\omega}_k$ 的相对重要性, 并检查用于训练约束的方程残差是否为零. 以 $p = 0.1$ MPa、当量比 $\phi = 1$ 、温度 $T_{in} = 300$ K 的 Cantera 模拟结果为例, 图 8 展示了反应物 O_2 和生成物 H_2O 归一化后的收支分析. 从图中可以看出, 在反应区, 对流项、扩散项和反应项共同构成稳态火焰, 三者残差近似为零.

表 4 0D 问题 3 组不同初始条件下的燃烧算例设置
Tab.4 Cases setups for the 0D combustion problems

算例	p /MPa	ϕ	T_{in} /K
A0	0.1	0.6	1 000
B0	1.0	0.8	1 000
C0	0.1	1.0	1 500

在 1D 燃烧问题中, 考虑到当前使用的一步机理在富燃条件下对层流火焰速度 S_L 拟合效果不佳^[34], 本文基于 PINNs 和 Cantera 模拟结果, 计算验证了一

个大气压下, 3 组当量比不大于 1 ($\phi = 0.6, 0.8$ 和 1.0), 两组温度 (T_{in} 为 300 K 和 500 K) 下的层流火焰速度 S_L . 如图 9 所示, PINNs 的 S_L 结果和 Cantera 高度吻合, 且符合 GRI-Mech 3.0^[35] 详细机理模拟结果下贫燃层流火焰速率变化规律.

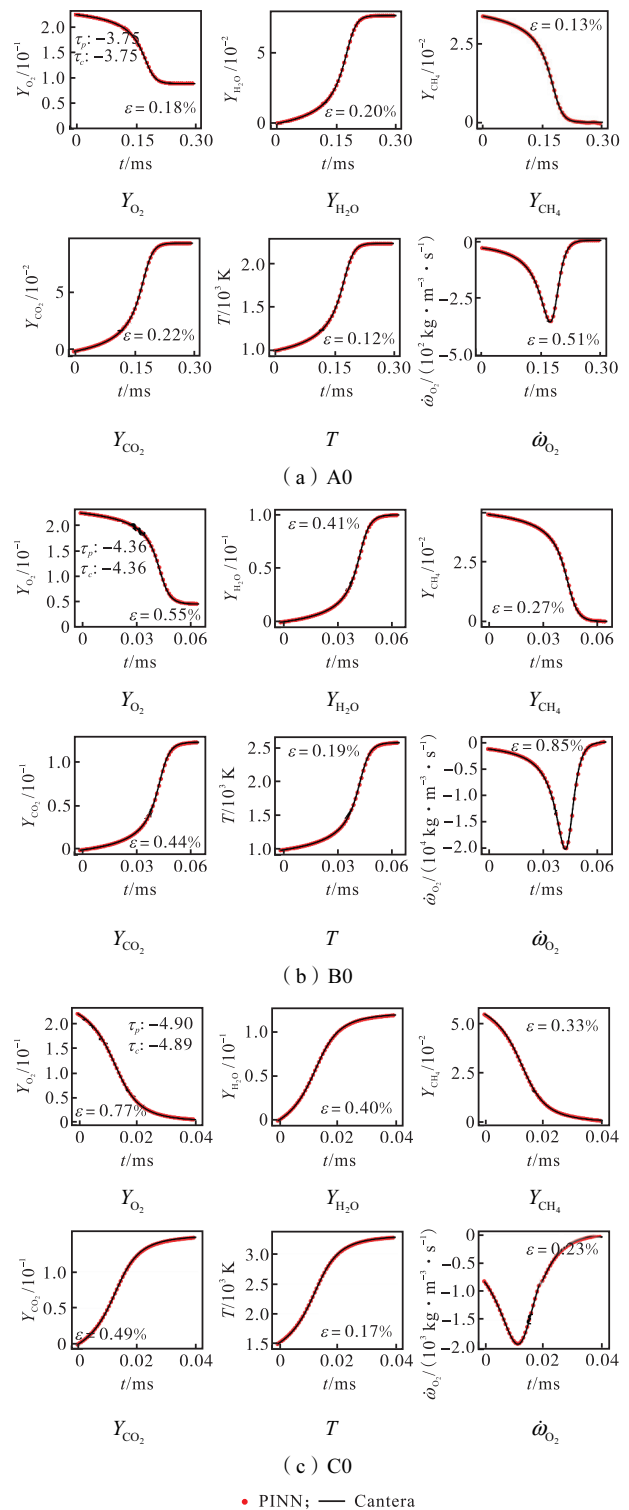


图 7 0D 问题不同初始条件下组分质量分数、温度和氧气反应速率曲线

Fig.7 The Y_k , T and $\dot{\omega}_{O_2}$ profiles of PINNs and Cantera under different initial conditions of 0D

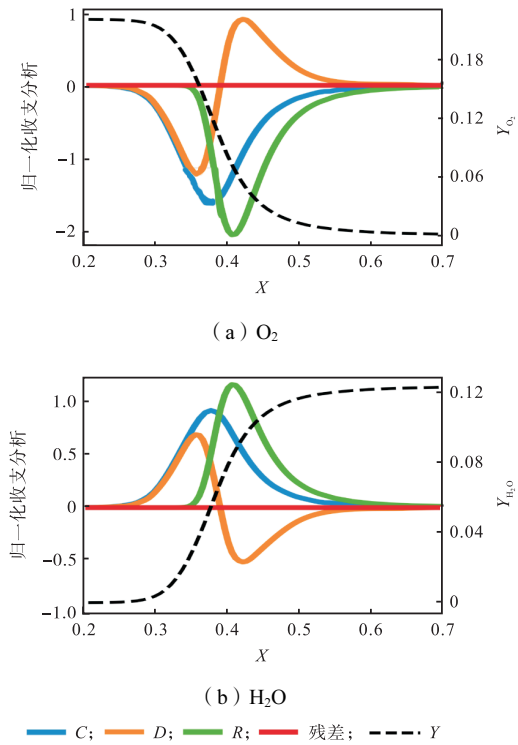


图 8 1D 组分输运方程收支分析

Fig.8 The species mass fraction budget analysis for the 1D combustion equations

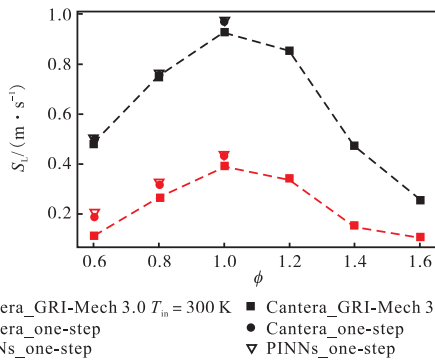


图 9 1D 问题不同入口边界条件下的层流火焰速度

Fig.9 Laminar flame speed for 1D problems under different boundary conditions

图 10 给出了 3 组不同 1D 燃烧算例(参数设置见表 5)下组分质量分数、温度和氧气反应速率的 PINNs 和 Cantera 模拟结果. 从图中同样可以看出, PINNs 能够实现不同燃烧工况下 1D 自由传播火焰的求解, 准确预测得到层流火焰结构.

表 5 1D 问题 3 组不同边界条件燃烧算例设置

Tab.5 Cases setups for the 1D combustion problems

算例	p/MPa	ϕ	T_{in}/K
A1	0.1	0.6	300
B1	0.1	0.8	500
C1	1.0	1.0	300

3.3 二维层流非预混三叉火焰

本小节探讨了 PINNs 在已知边界条件和燃烧控

制方程残差约束下求解二维燃烧问题的可能性. 图 11 对比展示了 PINNs 和直接数值模拟结果中流向速

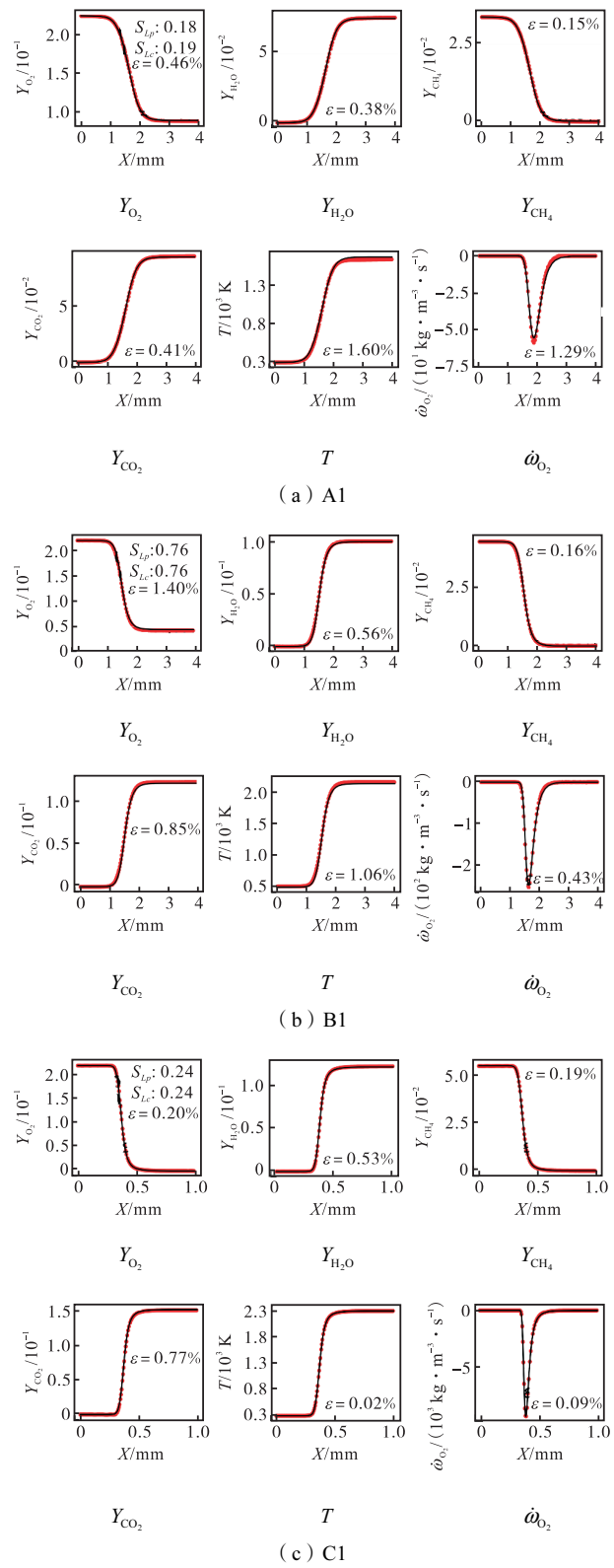


图 10 1D 问题不同边界条件下组分质量分数、温度和氧气反应速率曲线

Fig.10 The Y_k , T and $\dot{\omega}_{O_2}$ profiles of PINNs and Cantera under different boundary conditions of 1D

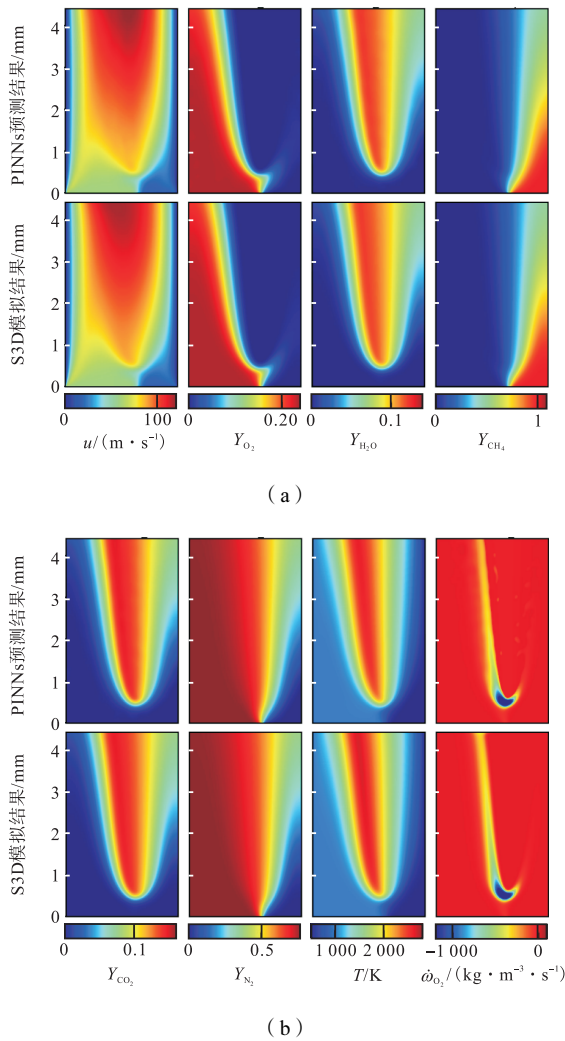


图 11 2D 问题速度、组分质量分数、温度和氧气反应速率分布

Fig.11 Distributions of the velocity, species mass fraction, temperature and reaction rate in the x - y plane for PINNs and S3D results

度 u 、组分质量分数 Y_k 、温度 T 和氧气反应速率 $\dot{\omega}_{O_2}$ 的物理场分布. 可以看到, PINNs 的预测结果与直接数值模拟结果基本一致, 模型能够很好地捕捉反应区中剧烈的组分和温度变化, 以及由于燃烧反应引起的加速现象.

为定量分析模型的性能, 图 12 给出了 3 组不同轴向位置处 (y 为 0.5 mm、1.5 mm 和 2.5 mm) 的速度 u 、氧气质量分数 Y_{O_2} 、水质量分数 Y_{H_2O} 、温度 T 和氧气反应速率 $\dot{\omega}_{O_2}$ 的变化曲线. 结合图 11, 不难发现, 三叉火焰的主要反应区集中在 $y=0.5$ mm 附近, 此时化学反应最为剧烈. 随着 y 增加, 燃烧生成物积累, 反应速率逐渐减小. 虽然在靠近下游位置 (y 为 1.5 mm 和 2.5 mm) 反应速率的预测存在一定偏差, 但整体而言, PINNs 可以较好地学习得到三叉火焰物理场, 预测其燃烧现象.

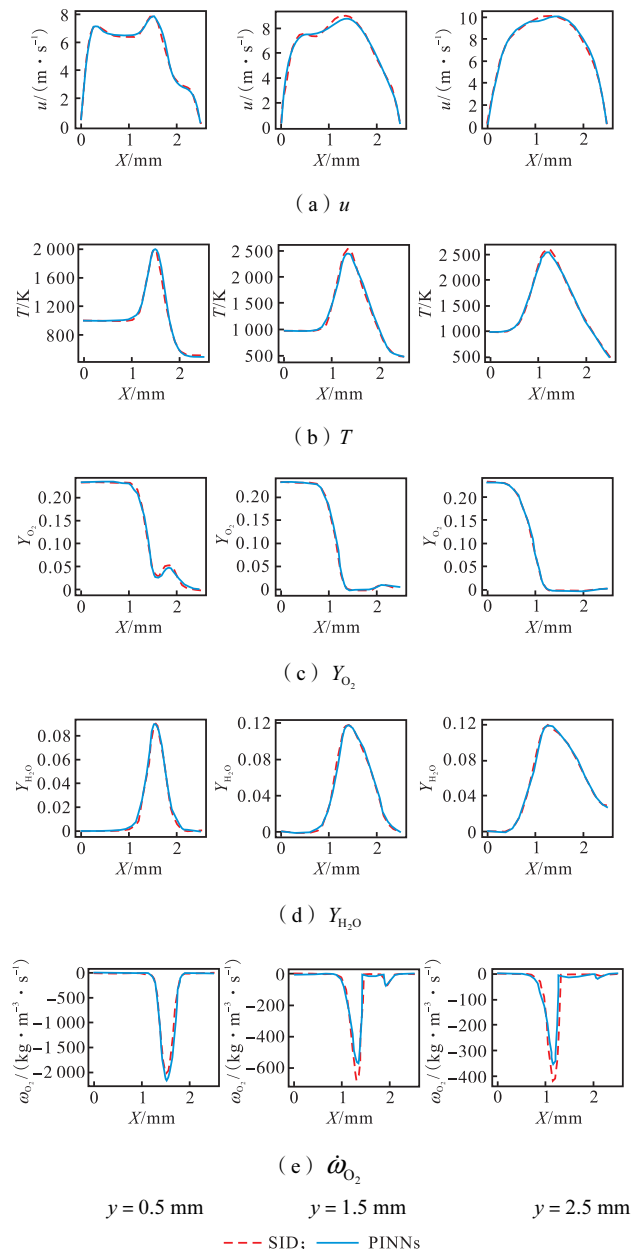


图 12 2D 问题不同轴向位置速度、组分质量分数、温度和氧气反应速率曲线

Fig.12 Profiles of the velocity, species mass fraction, temperature and reaction rate at three y -axis locations for PINNs and S3D results

4 结 论

本文搭建了基于 Pytorch 的 PINNs 框架来模拟零维绝热恒压反应器、一维层流预混自由传播火焰和二维层流非预混三叉火焰. 在 PINNs 框架中, 本文引入自适应线性层和正弦激活函数, 并在模型训练过程中采用自适应时间采样和加密采样策略来进一步提高模型性能. 基于对应的方程残差和初始/边界条件约束, 3 个独立的 PINNs 模型被分别训练以学习质量和动量方程、组分输运方程和温度方程.

通过与数值模拟结果进行对比, 本文定性和定量地评估了 PINNs 在求解不同燃烧问题时的模型性能. 结果表明, 对于 0D 和 1D 问题, PINNs 能够准确预测得到不同工况下的着火延迟时间或层流火焰速度. 在 2D 问题中, PINNs 可以较好地捕捉火焰结构, 实现燃烧模拟. 综上所述, PINNs 在燃烧问题的求解中展现出了巨大的潜力, 为后续结合物理信息约束的机器学习模型开发提供了新的思路和手段. 下一步工作计划发展嵌入相关燃烧物理信息的湍流燃烧模型, 进一步提高机器学习方法在燃烧问题应用中的适用性及可解释性.

参考文献:

- [1] Ithem M, Chung W T, Mishra A A. Combustion machine learning: Principles, progress and prospects[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2022, 91: 101010.
- [2] Barwey S, Raman V. A neural network-inspired matrix formulation of chemical kinetics for acceleration on gpus[J]. *Energies*, 2021, 14(9): 2710.
- [3] Yellapantula S, Perry B A, Grout R W. Deep learning-based model for progress variable dissipation rate in turbulent premixed flames[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38(2): 2929-2938.
- [4] Wang J, Zhou Z, Lin K, et al. Facilitating Bayesian analysis of combustion kinetic models with artificial neural network[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 213: 87-97.
- [5] Charalampopoulos A-T G, Sapsis T P. Machine-learning energy-preserving nonlocal closures for turbulent fluid flows and inertial tracers[J]. *Physical Review Fluids*, 2022, 7(2): 024305.
- [6] 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.
- [7] Cai S, Mao Z, Wang Z, et al. Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: A review[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2022, 37: 1727-1738.
- [8] Jin X, Cai S, Li H, et al. NSFnets (Navier-Stokes flow nets): Physics-informed neural networks for the incompressible Navier-Stokes equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 426: 109951.
- [9] Mao Z, 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.
- [10] Wang H, Liu Y, Wang S. Dense velocity reconstruction from particle image velocimetry/particle tracking velocimetry using a physics-informed neural network[J]. *Physics of Fluids*, 2022, 34(1): 017116.
- [11] 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.
- [12] Cai S, Wang Z, 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, DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2021.135>.
- [13] Lucor D, Agrawal A, Sergent A. Simple computational strategies for more effective physics-informed neural networks modeling of turbulent natural convection[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 456: 111022.
- [14] Laubscher R. Simulation of multi-species flow and heat transfer using physics-informed neural networks[J]. *Physics of Fluids*, 2021, 33(8): 087101.
- [15] Ji W, Qiu W, Shi Z, et al. Stiff-pinn: Physics-informed neural network for stiff chemical kinetics[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2021, 125(36): 8098-8106.
- [16] Lu L, Meng X, Mao Z, et al. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations[J]. *SIAM Review*, 2021, 63(1): 208-228.
- [17] Hennigh O, Narasimhan S, Nabian M A, et al. NVIDIA SimNetTM: An AI-accelerated multi-physics simulation framework[C]// *International Conference on Computational Science*. Springer, 2021: 447-461.
- [18] Rackauckas C, Nie Q. Differentialequations. jl—a performant and feature-rich ecosystem for solving differential equations in julia[J]. *Journal of Open Research Software*, 2017, 5(1): 64912314.
- [19] Poinot T, Veynante D. *Theoretical and Numerical Combustion*[M]. US: RT Edwards, Inc., 2005.
- [20] Smooke D M, Miller J A, Kee R J. Determination of adiabatic flame speeds by boundary value methods[J]. *Combustion Science and Technology*, 1983, 34(1-6): 79-90.

- [21] Im H G, Chen J H. Structure and propagation of triple flames in partially premixed hydrogen-air mixtures[J]. *Combustion and Flame*, 1999, 119(4): 436-454.
- [22] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. The Chemkin Thermodynamic Data Base[R]. Livermore, CA(United States): Sandia National Lab(SNL-CA), 1990.
- [23] Wang C, Qian C, Liu J, et al. Influence of chemical kinetics on detonation initiating by temperature gradients in methane/air[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 197: 400-415.
- [24] McClenny L, Braga-Neto U. Self-adaptive physics-informed neural networks [J]. *Journal of Computational Physics*, 2023, 474: 111722.
- [25] Sitzmann V, Martel J, Bergman A, et al. Implicit neural representations with periodic activation functions[J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2020, 33: 7462-7473.
- [26] He K, Wang Z, Fu Y, et al. Adaptively weighted multi-task deep network for person attribute classification[C]// *Proceedings of the 25th ACM International Conference on Multimedia*. California, US, 2017: 1636-1644.
- [27] Godfrey L B, Gashler M S. A continuum among logarithmic, linear, and exponential functions, and its potential to improve generalization in neural networks[C]// *7th International Joint Conference on Knowledge Discovery, Knowledge Engineering and Knowledge Management(IC3K)*. IEEE, 2015: 481-486.
- [28] Wight C L, Zhao J. Solving Allen-Cahn and Cahn-Hilliard Equations Using the Adaptive Physics Informed Neural Networks[EB/OL]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2007.04542>, 2020.
- [29] Kingma D P, Ba J. Adam: A Method for Stochastic Optimization[EB/OL]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1412.6980>, 2014,
- [30] Paszek A, Gross S, Massa F, et al. *PyTorch: An Imperative Style, High-Performance Deep Learning Library*[M]. Estonia: Curran Associates, Inc., 2019.
- [31] Margossian C C. A review of automatic differentiation and its efficient implementation[J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery*, 2019, 9(4): e1305.
- [32] Goodwin D G, Moffat H K, Speth R L. Cantera: An Object-Oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes, Version 2. 2. 1[EB/OL]. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:86382900>, 2017.
- [33] Chen J H, Choudhary A, De Supinski B, et al. Terascale direct numerical simulations of turbulent combustion using S3D[J]. *Computational Science & Discovery*, 2009, 2(1): 015001.
- [34] Franzelli B, Rocchi J-P, Wolf P. *Cantera Tutorial-V2*[M]. France: Cerfacs, 2010.
- [35] Smich G P. *GRI-Mech 3.0*[M]. Berkeley: University of California, 1999.