

神经网络求解Boltzmann-BGK方程及其在微流中的应用

严 玲, 张 佩*

北京计算科学研究中心力学部, 北京

收稿日期: 2025年3月28日; 录用日期: 2025年4月23日; 发布日期: 2025年4月30日

摘 要

本文提出一种基于神经网络的BGK方程求解方法, 特别关注在微流问题中的应用。首先, 通过引入灵活辅助分布函数构造BGK方程的降维模型, 从而有效降低方程维度。其次, 设计全连接神经网络架构高效逼近降维分布函数, 以避免时空离散化。接着针对微流问题中复杂的Maxwell边界条件, 提出特殊设计的损失函数进行处理。此外, 利用多尺度输入策略和Maxwellian分裂技术以提升逼近效率。最后, 通过对一维Couette流和二维矩形风管流两个经典问题进行数值实验, 验证了该方法的有效性。

关键词

BGK方程, 降维, Maxwell边界条件, 神经网络

A Neural Network Method for the Boltzmann-BGK Equation with Applications in Microflows

Ling Yan, Pei Zhang*

Mechanics Division, Beijing Computational Science Research Center, Beijing

Received: Mar. 28th, 2025; accepted: Apr. 23rd, 2025; published: Apr. 30th, 2025

Abstract

We consider the neural representation to solve the BGK equation, especially focusing on the application in microscopic flow problems. Firstly, a new dimension reduction model of the BGK equation with the flexible auxiliary distribution functions is deduced to reduce the problem dimension. Then, a fully connected neural network is utilized to approximate the dimension-reduced distribution

*通讯作者。

文章引用: 严玲, 张佩. 神经网络求解 Boltzmann-BGK 方程及其在微流中的应用[J]. 应用数学进展, 2025, 14(4): 995-1006. DOI: 10.12677/aam.2025.144222

with extremely high efficiency and to avoid discretization in space and time. A specially designed loss function is employed to deal with the Maxwell boundary conditions in microflow problems. Moreover, strategies such as multi-scale input and Maxwellian splitting are applied to further enhance the approximation efficiency. Finally, two classical numerical experiments, including one-dimensional Couette flow and two-dimensional duct flow, are studied to demonstrate the effectiveness of this neural representation method.

Keywords

BGK Equation, Dimension Reduction, Maxwell Boundary Condition, Neural Network

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在航空航天和微电子机械系统领域, 动理学理论的模拟已经引起广泛关注, 特别是稀薄气体动理学[1]的应用。在稀薄情况下, 传统的连续流体模型, 如 Euler 方程和 Navier-Stokes 方程, 已不再适用。此时, Boltzmann 方程为研究稀薄气体动理学提供了一个基本思路。然而, Boltzmann 方程的高维特征, 以及复杂的二次碰撞项, 为高效且准确的数值模拟带来了巨大的挑战。

对于求解 Boltzmann 方程的传统数值方法, 通常可以划分为确定性方法和随机方法。随机方法主要包括直接模拟蒙特卡洛法[2] (DSMC), 而确定性方法则涵盖了离散速度方法[3] (DVM)、谱方法[4] [5]和矩方法[6]。近年来, 随着计算能力的提升, 利用神经网络求解 Boltzmann 方程的数值方法得到了快速发展, 大致可以分为三类。第一类是基于神经网络构建代理模型, 以近似碰撞算子[7]。第二类则是通过神经网络学习闭包模型, 以简化 Boltzmann 方程的求解[8]。第三类是在物理信息神经网络[9] (PINNs) 框架下, 将偏微分方程及其初始和边界条件直接纳入神经网络的损失函数中, 以实现 Boltzmann 方程的数值求解。

本文提出了一种降维神经网络表示方法(简称为 DRNR)求解 Boltzmann-BGK 方程。首先, 基于已有研究[10] [11], 通过引入与微观速度相关的灵活辅助分布函数, 构建了一种新的降维模型。当分布函数在微观速度空间的某些方向上呈现平面对称性时, 该模型能够使 BGK 方程的微观速度空间维度与物理空间维度保持一致。在此框架下, 进一步推导出了适用于微流问题的简化 Maxwell 边界条件[12]。尽管该降维模型增加了未知分布函数的数量, 但显著减少了自变量的维数, 从而大幅降低了总体计算量。

接下来, 在离散速度法的框架下推导出 BGK 方程的半离散降维模型, 并利用神经网络对降维分布函数进行建模。此外, 该方法采用多尺度输入和 Maxwellian 分裂法[13], 利用全连接神经网络对降维后的分布函数进行参数化, 并且针对微流问题, 特别设计了针对简化 Maxwell 边界条件的损失函数, 并在训练过程中引入了自适应加权策略。最后, 通过一维 Couette 流和二维矩形风管流的数值实验, 验证了该方法的有效性。

本文其余部分的结构如下: 第 2 章主要介绍 Boltzmann-BGK 方程的基本性质、Maxwell 边界条件, 以及基于灵活辅助分布函数的降维方法。第 3 章详细阐述了 DRNR 方法, 包括半离散 DVM 模型、网络结构和损失函数。第 4 章展示了相关的数值实验结果。最后, 第 5 章给出了本文结论。

2. Boltzmann-BGK 方程

2.1. 预备知识

Boltzmann-BGK 方程以统计学原理为基础, 用于描述粒子的运动, 具体形式[14]如下

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \frac{1}{\text{Kn}} (\mathcal{M}[f] - f), \quad t \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad (1)$$

其中 $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 表示粒子的密度函数, 随时间 t 、空间 $\mathbf{x}$ 以及微观速度 $\mathbf{v}$ 变化, Kn 是 Knudsen 数, 描述气体的稀薄程度, $\mathcal{M}[f]$ 是局部 Maxwellian 分布函数, 取决于局部气体密度 ρ 、宏观速度 $\mathbf{u}$ 和温度 T , 具体形式为

$$\mathcal{M}[f] = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi T}^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2}{2T}\right). \quad (2)$$

而密度 ρ 、宏观速度 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$ 和温度 T 等宏观变量可以由分布函数得到

$$\begin{aligned} \text{密度:} \quad \rho(t, \mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \\ \text{动量:} \quad \mathbf{m}(t, \mathbf{x}) &\triangleq \rho(t, \mathbf{x}) \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{v} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, \\ \text{能量:} \quad E(t, \mathbf{x}) &\triangleq \frac{3}{2} \rho T + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{v}|^2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (3)$$

Boltzmann 方程的应用涉及气体与实心壁之间的相互作用, 通常采用 Maxwell 边界条件[12]来描述相关过程。在时间 t 和边界点 $\mathbf{x}$ 处, 如果壁面处于静止状态, 对于满足 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} > 0$ 的速度 $\mathbf{v}$, 边界分布函数 $f^b(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 可由固壁边界条件确定, 其中 $\mathbf{n}$ 是指向气体内部的壁面法向量。当速度不满足条件时, 边界分布函数则受内部分布函数的影响。假设固壁速度和温度分别是 $\mathbf{u}^w = (u_1^w, u_2^w, u_3^w)^T$ 和 T^w , 则边界条件为

$$f^b(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \begin{cases} f^w, & \mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n} > 0, \\ f_N(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}), & \mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n} < 0, \end{cases} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{c}^w = \mathbf{v} - \mathbf{u}^w$, $f_N(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 是内部分布函数, f^w 是由固壁速度 $\mathbf{u}^w$ 和温度 T^w 确定的 Maxwellian 分布函数

$$f^w(\rho^w, \mathbf{u}^w, T^w) = \frac{\rho^w}{\sqrt{2\pi T^w}^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{v} - \mathbf{u}^w|^2}{2T^w}\right). \quad (5)$$

其中,

$$\rho^w = -\frac{\int_{\mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n} < 0} (\mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n}) f_N(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}}{\int_{\mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n} > 0} (\mathbf{c}^w \cdot \mathbf{n}) f^w(1, \mathbf{u}^w, T^w) d\mathbf{v}}. \quad (6)$$

数值模拟中, Maxwell 边界条件(4)和(6)被应用于微流问题中, 且 3.3 节中将详细介绍对该边界条件设计的损失函数。

2.2. 降维方法

在某些数值实验中, 我们会遇到物理空间的维数 D_x 低于微观速度维数 D_v 的情况, 这时通常采用降维模型以降低计算成本。文献[10] [11]提出引入辅助分布函数对 BGK 型碰撞模型的分布函数进行降维, 但是, 在计算 Couette 流问题时, 如果在物理空间中存在不同方向的宏观速度, 那么微观速度中的辅助分布函数的维数要大于物理空间的 D_x 。为解决该问题, 我们对降维方法进行改进, 采用了灵活的辅助分布函数, 在此框架下, 微观速度空间中的辅助分布函数的维数可降低至与空间维数相同。

准确地说, 考虑 $D_x < D_v$ 时的情形, 假设分布函数 $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 在物理空间 $D_x + 1$ 维到 D_v 维中是均匀一致的

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(t, \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{v}), \quad \tilde{\mathbf{x}} = (x_1, \dots, x_{D_x})^T \in \mathbb{R}^{D_x}, \quad \frac{\partial f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial x_d} = 0, \quad d \in \mathcal{D}, \quad (7)$$

在微观速度空间 D_{v^*} 维到 D_v 维是平面对称的。可以推断出宏观速度 $\mathbf{u}$ 满足

$$u_k = 0, \quad k \in \hat{\mathcal{D}}, \quad (8)$$

其中,

$$\mathcal{D} = \{D_x + 1, \dots, D_v\}, \quad \hat{\mathcal{D}} = \{D_{v^*} + 1, \dots, D_v\}, \quad D_x \leq D_{v^*} \leq D_v = 3. \quad (9)$$

接下来, 定义严格降维分布函数为

$$g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \int_{\mathbb{R}^{D_v - D_x}} f(t, \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{v}) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad h(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \int_{\mathbb{R}^{D_v - D_x}} \frac{|\tilde{\mathbf{v}}|^2}{2} f(t, \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{v}) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad (10)$$

灵活降维分布函数为

$$s_j(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \int_{\mathbb{R}^{D_v - D_x}} v_j f(t, \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{v}) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad j = D_x + 1, \dots, D_{v^*}, \quad (11)$$

其中,

$$\tilde{\mathbf{v}} = (v_1, \dots, v_{D_x})^T \in \mathbb{R}^{D_x}, \quad \hat{\mathbf{v}} = (v_{D_x+1}, \dots, v_{D_v})^T \in \mathbb{R}^{D_v - D_x}, \quad (12)$$

灵活降维分布函数(11)的数量是 $D_{v^*} - D_x$ 。简单起见, 除非另有说明, 本文后续在使用 s_j 时均暗指 $j = D_x + 1, \dots, D_{v^*}$ 。

在改进的降维方法中, 宏观变量与降维分布函数之间的关系为

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{\mathbb{R}^{D_x}} g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}}, \\ \rho u_i &= \int_{\mathbb{R}^{D_x}} v_i g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad i = 1, \dots, D_x, \\ \rho u_j &= \int_{\mathbb{R}^{D_x}} s_j(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}}, \quad j = D_x + 1, \dots, D_{v^*}, \\ E &= \frac{3}{2} \rho T + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 = \int_{\mathbb{R}^{D_x}} \left(\frac{|\tilde{\mathbf{v}}|^2}{2} g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) + h(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) \right) d\tilde{\mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (13)$$

由于维数降低, 无法得到部分高阶矩, 因此, 我们仅计算部分应力张量 σ_{ij} 和热通量 q_i

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \begin{cases} \int_{\mathbb{R}^{D_x}} v_i v_j g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}} - \rho u_i u_j - \delta_{ij} \rho T, & i, j \leq D_x, \\ \int_{\mathbb{R}^{D_x}} v_i s_j(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}} - \rho u_i u_j, & i \leq D_x < j \leq D_{v^*}, \end{cases} \\ q_i &= \int_{\mathbb{R}^{D_x}} (v_i - u_i) \left(\frac{1}{2} |\tilde{\mathbf{c}}|^2 g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) + h(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) \right) d\tilde{\mathbf{v}} \\ &\quad + \sum_{j=D_x+1}^{D_{v^*}} \left(u_j^2 \int_{\mathbb{R}^{D_x}} (v_i - u_i) g(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}} - 2u_j \int_{\mathbb{R}^{D_x}} (v_i - u_i) s_j(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}} \right), \quad i \leq D_x, \end{aligned} \quad (14)$$

其中 $\tilde{\mathbf{c}} = \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{\mathbf{u}} = (u_1, \dots, u_{D_x})^T$ 。

最后, 通过对(1)式积分计算, 可得到降维 Boltzmann 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} g &= \frac{1}{\text{Kn}} (g^M - g), \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} h &= \frac{1}{\text{Kn}} (h^M - h), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial s_j}{\partial t} + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\tilde{\mathbf{x}}} s_j = \frac{1}{\text{Kn}} (s_j^M - s_j), \quad (15)$$

其中 g^M, h^M 和 s_j^M 与 Maxwellian 分布函数有关, 即

$$g^M = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} \mathcal{M}[f] d\tilde{\mathbf{v}}, \quad h^M = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} \frac{|\tilde{\mathbf{v}}|^2}{2} \mathcal{M}[f] d\tilde{\mathbf{v}}, \quad s_j^M = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} v_j \mathcal{M}[f] d\tilde{\mathbf{v}}. \quad (16)$$

对于该降维方程, 可以应用 2.1 节中引入的 Maxwell 边界条件, 则由降维分布函数(10)和(11)以及边界条件(4), 可得新的边界条件为

$$F^b(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \begin{cases} F^W, & \tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}} > 0, \\ F_N(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}), & \tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}} < 0, \end{cases} \quad (17)$$

其中 $F = g, h, s_j$, $\tilde{\mathbf{c}}^W = \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\mathbf{u}}^W$, $\tilde{\mathbf{u}}^W = (u_1^W, \dots, u_{D_x}^W)^T$, $\tilde{\mathbf{n}}$ 是降维后指向气体内部的壁面法向量, $F_N(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}})$ 是内部分布函数, 由(5)式可得 $F^W = g^W, h^W, s_j^W$ 的表达式为

$$g^W = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} f^W d\tilde{\mathbf{v}}, \quad h^W = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} \frac{|\tilde{\mathbf{v}}|^2}{2} f^W d\tilde{\mathbf{v}}, \quad s_j^W = \int_{\mathbb{R}^{D_v-D_x}} v_j f^W d\tilde{\mathbf{v}}. \quad (18)$$

分布函数 f^W 可由 $\rho^W, \mathbf{u}^W, T^W$ 显式表示, ρ^W 可由下式计算得到

$$\rho^W = - \frac{\int_{\tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}} < 0} (\tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}}) g_N(t, \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) d\tilde{\mathbf{v}}}{\int_{\tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}} > 0} (\tilde{\mathbf{c}}^W \cdot \tilde{\mathbf{n}}) g^W(1, \mathbf{u}^W, T^W) d\tilde{\mathbf{v}}}. \quad (19)$$

在接下来章节中, 将使用降维方程(15)~(17)作为控制方程, 用以设计神经网络表示方法。

3. 降维神经网络表示方法

3.1. 基于 DVM 的空间离散

根据已有研究[13], 首先对降维方程(15)在微观速度空间中进行离散, 将得到的半离散系统作为控制方程, 以设计神经网络结构。在此框架下, 输入维度显著降低, 从而简化神经网络的规模和复杂性。

首先, 为了在接下来的章节中清晰呈现, 将(7)和(12)中的 $\tilde{\mathbf{x}}$ 和 $\tilde{\mathbf{v}}$ 缩写为 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{v}$ 。假设微观速度空间中的全离散点集为

$$\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{N_v}] \in \mathbb{R}^{D_x \times N_v}, \quad (20)$$

其中 N_v 是离散点总数, $\mathbf{v}_k = (v_{1k}, \dots, v_{D_x k})^T, 1 \leq k \leq N_v$, 因此降维 BGK 方程(15)的半离散形式如下

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{g} &= \frac{1}{\text{Kn}} (\mathbf{g}^M - \mathbf{g}), \\ \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{h} &= \frac{1}{\text{Kn}} (\mathbf{h}^M - \mathbf{h}), \\ \frac{\partial \mathbf{s}_j}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{s}_j &= \frac{1}{\text{Kn}} (s_j^M - s_j), \end{aligned} \quad (21)$$

其中, $\mathbf{F} = \mathbf{g}, \mathbf{g}^M, \mathbf{h}, \mathbf{h}^M, \mathbf{s}_j, \mathbf{s}_j^M$ 是离散的降维分布函数

$$\mathbf{F} = [F_1, F_2, \dots, F_{N_v}] \in \mathbb{R}^{1 \times N_v}, \quad F_k = g_k, g_k^M, h_k, h_k^M, s_{jk}, s_{jk}^M, \quad k=1, \dots, N_v. \quad (22)$$

在接下来章节中, 将使用降维方程的半离散形式(21)作为控制方程, 用以设计 DRNR 中的神经网络结构和损失函数。

3.2. 网络结构

本节将详细介绍用于表示降维分布函数的全连接神经网络结构。通常来说, 一个全连接神经网络或前馈网络包括一个输入层、若干隐藏层和一个输出层。我们使用深度神经网络求解降维 Boltzmann 方程, 并结合多尺度输入和 Maxwellian 分裂技术以提高近似效率。由于正弦函数是周期函数, 具有全局性质, 适合处理周期性或高频信息, 能够对输入的不同区域学习相同的函数, 从而更好地处理全局特征[15], 本文选择 $\sigma(x) = \sin(x)$ 作为激活函数。

具体地, 所有神经网络的输入变量为

$$\hat{\mathbf{x}}^{\text{multi}} = (c_1 \hat{\mathbf{x}}, c_2 \hat{\mathbf{x}}, \dots, c_K \hat{\mathbf{x}}) \in \mathbb{R}^{K(D_x+1)}, \quad (23)$$

其中, $c_i, i=1, \dots, K$ 是与问题相关的常数, $\hat{\mathbf{x}} = (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{D_x+1}$ 。为了进一步提高近似效率, 我们引入了 Maxwellian 分裂法, 通过使用该方法, 可将离散的降维分布函数(22)分解为

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{F}^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) + C\mathbf{F}^{\text{neq}}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{F} = \mathbf{g}, \mathbf{h}, \mathbf{s}_j, \quad (24)$$

其中 C 是可调节的参数, 根据宏微观分解理论, 一般选取与 Kn 相同的数值, $\mathbf{F}^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{1 \times N_v}$ 是 Maxwellian 分布函数

$$\mathbf{F}^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) = (F_1^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}), F_2^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}), \dots, F_{N_v}^{\text{eq}}(t, \mathbf{x})), \quad (25)$$

其中

$$F_k^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) = \frac{\rho_F^*(t, \mathbf{x})}{\sqrt{2\pi T_F^*(t, \mathbf{x})}^{D_x}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{v}_k - \mathbf{u}_F^*(t, \mathbf{x})|^2}{2T_F^*(t, \mathbf{x})}\right), \quad k=1, \dots, N_v. \quad (26)$$

$\mathbf{F}^{\text{neq}}(t, \mathbf{x})$ 是非平衡态分布函数, 假设具有以下形式

$$\mathbf{F}^{\text{neq}}(t, \mathbf{x}) = (F_1^{\text{neq}}(t, \mathbf{x}), \dots, F_{N_v}^{\text{neq}}(t, \mathbf{x})), \quad F_k^{\text{neq}}(t, \mathbf{x}) = F_k^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) F_k^*(t, \mathbf{x}), \quad (27)$$

其中,

$$\mathbf{F}^*(t, \mathbf{x}) = (F_1^*(t, \mathbf{x}), \dots, F_{N_v}^*(t, \mathbf{x})) \in \mathbb{R}^{1 \times N_v}. \quad (28)$$

实验表明, 该假设可以确保 $\mathbf{F}^{\text{eq}}(t, \mathbf{x})$ 和 $\mathbf{F}^*(t, \mathbf{x})$ 的数量级相似, 从而减少训练过程中遇到的困难。因此, 我们将伪宏观变量 $(\rho_F^*, \mathbf{u}_F^*, T_F^*)$ 和非平衡态离散分布函数 $\mathbf{F}^*$ 作为输出变量, 利用两个独立的神经网络进行训练, 如(29)所示

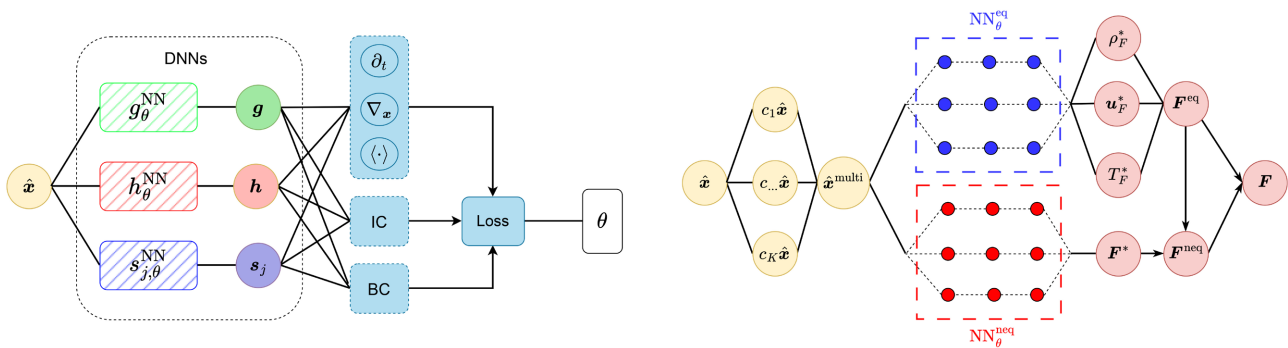


Figure 1. Schematic of DRNR

图 1. DRNR 示意图

$$\begin{aligned} (\rho_F^*, \mathbf{u}_F^*, T_F^*) &\triangleq \text{NN}_\theta^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{D_x+2}, \\ \mathbf{F}^*(t, \mathbf{x}) &\triangleq \text{NN}_\theta^{\text{neq}}(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{D_v}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{g}, \mathbf{h}, \mathbf{s}_j. \end{aligned} \quad (29)$$

需要强调的是, 对于每一个 $\mathbf{F} = \mathbf{g}, \mathbf{h}, \mathbf{s}_j$, 均对应两个独立的神经网络和相应的伪宏观变量, 因此, 网络总数为 $2(2 + D_v^* - D_x)$ 。神经网络的结构如图 1 所示, 阴影区域中的具体结构如图 1 的右图所示。

在神经网络建立之后, 需要设置合适的损失函数将神经网络与 PDE 联系起来, 具体细节将在下一节中进行介绍。

3.3. 损失函数

本节介绍了一种针对 Maxwell 边界条件特别设计的损失函数。一般来说, 损失函数包括方程的残差 L_{Eq} , 以及作为惩罚项的初始条件约束 L_{IC} 和边界条件约束 L_{BC} , 具体形式如下

$$L_{\text{loss}} = L_{\text{Eq}} + \lambda_1 L_{\text{IC}} + \lambda_2 L_{\text{BC}}, \quad (30)$$

其中, λ_1 和 λ_2 是与问题相关的惩罚项权重。

$L_{\text{Eq}}, L_{\text{IC}}, L_{\text{BC}}$ 均由以下三项构成

$$L_m = L_m^g + L_m^h + \sum_{j=D_x+1}^{D_v^*} L_m^{s_j}, \quad (31)$$

其中 $m = \text{Eq}, \text{IC}, \text{BC}$ 。本文的边界条件设置为 Maxwell 边界条件, 则(18)式中的 $F^b(t_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_k)$ 取为

$$F^b(t_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_k) = F^w(t_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_k), \quad F^w = g^w, h^w, s_j^w, \quad (32)$$

其中壁面速度 $\mathbf{u}^w$ 和温度 T^w 由边界条件给定, 内部分布函数可由神经网络的输出表示, 根据(6)式可计算得到 ρ^w , 如下,

$$\rho^w(t_i, \mathbf{x}_i) = - \frac{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} < 0}}^{N_v} (\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n}) g_{k,\theta}^{\text{NN}}(t_i, \mathbf{x}_i) w_k}{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} > 0}}^{N_v} (\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n}) g_k^w(1, u^w(t_i, \mathbf{x}_i), T^w(t_i, \mathbf{x}_i)) w_k}. \quad (33)$$

注 1. 稳态问题中, 神经网络的输入仅仅是物理空间 $\mathbf{x}$, 大多数稳态问题满足质量守恒, 因此, 我们将神经网络 $\mathbf{g}_\theta^{\text{NN}}$ 的输出预先调整为

$$\mathbf{g}_\theta^{\text{NN, steady}}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{g}_\theta^{\text{NN}}(\mathbf{x})}{\rho_{\text{ave}}}, \quad (34)$$

其中,

$$\rho_{\text{ave}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{Eq}}} \langle \mathbf{g}_\theta^{\text{NN}}(\mathbf{x}_i) \rangle}{N_{\text{Eq}}}, \quad \langle \mathbf{g} \rangle = \sum_{k=1}^{N_v} g_k \omega_k. \quad (35)$$

$\mathbf{x}_i, i=1, \dots, N_{\text{Eq}}$ 是 Ω 的随机点。

由(30)式可知, 损失函数是初值、边界条件以及方程残差的加权组合, 然而使用 DVM 进行空间离散时, 每个速度离散点被赋予相同的权重, 实际上对于宏观量的计算, 当相对速度较小时, 分布函数更为重要。为此, 使用下界约束不确定性加权方法[13]进行微观速度点 $\mathbf{v}_k$ 的权重计算, 可得

$$\begin{aligned}
 L_{\text{Eq}}^F &= \frac{1}{N_{\text{Eq}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Eq}}} \sum_{k=1}^{N_v} \left(\frac{1}{(w_{\text{Eq}}^F)_k + \varepsilon} R_k^F(t_i, \mathbf{x}_i) + \log(1 + (w_{\text{Eq}}^F)_k) \right)^2, \\
 L_{\text{IC}}^F &= \frac{1}{N_{\text{IC}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{IC}}} \sum_{k=1}^{N_v} \left(\frac{1}{(w_{\text{IC}}^F)_k + \varepsilon} (F_{k,\theta}^{\text{NN}}(0, \mathbf{x}_i) - F_k^0(\mathbf{x}_i)) + \log(1 + (w_{\text{IC}}^F)_k) \right)^2, \\
 L_{\text{BC}}^F &= \frac{1}{N_{\text{BC}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{BC}}} \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n} > 0}}^{N_v} \left(\frac{1}{(w_{\text{BC}}^F)_k + \varepsilon} (F_{k,\theta}^{\text{NN}}(t_i, \mathbf{x}_i) - F_k^W(t_i, \mathbf{x}_i)) + \log(1 + (w_{\text{BC}}^F)_k) \right)^2, F = g, h, s_j,
 \end{aligned} \tag{36}$$

其中 $(w_m^F)_k \geq 0, m = \text{Eq, IC, BC}, k = 1, \dots, N_v$ 是微观速度点 $\mathbf{v}_k$ 的自适应权重, 可以通过神经网络进行训练, $\varepsilon > 0$ 是一个很小的数以防止出现零除现象。

至此, 我们已经引入降维神经网络表示法。在第 4 章中将使用该方法求解 BGK 方程, 并用微流问题验证方法的有效性。

4. 数值实验

本章对经典问题进行数值实验, 从而验证 DRNR 方法的有效性和高效性, 实验涉及两个稳态问题: 一维 Couette 流和二维矩形风管流。

数值模拟中, 我们使用初始学习率为 $\eta_0 = 0.001$ 的 Adam 优化器[16], 并结合热重启技术[17], 即在第 i 步训练中, 学习率会根据余弦退火策略进行衰减

$$\eta_i = \frac{1}{2} \eta_0 \left(1 + \cos \left(\frac{i}{T_{\max}} \right) \right). \tag{37}$$

此外, 神经网络由五个隐藏层组成, 每层有 80 个神经元, 输出维数为 $N_v = \prod_{i=1}^{D_x} N_i$, $N_i = 100$, D_x 是物理空间的维数, (23)式中的多尺度常数取为 $c_i = 4^{i-1}, i = 1, 2, 3$, 微观速度空间的计算域取为 $[-10, 10]^{D_v}$ 。

4.1. 一维 Couette 流

本节对 Couette 流的变体进行研究, Couette 流是一个涉及固壁边界条件的经典问题。该装置由处在 $x = \pm \frac{1}{2}$ 的两个无线平行板组成, 左右板的速度方向不同, 左板的速度为 $\mathbf{u}_l^W = (0, u_2^W, 0)$, 右板的速度为 $\mathbf{u}_r^W = (0, 0, u_3^W)$, 左右板的温度为 $T^W = 1$, 密度 ρ^W 由(6)式确定。当使用降维 BGK 模型求解该问题时, 由(32)式可得 Couette 流的边界条件(18)为

$$\begin{aligned}
 g^W(\rho^W, \mathbf{u}^W, T^W) &= \frac{\rho^W}{\sqrt{2\pi T^W}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{v}_1|^2}{2T^W} \right), \\
 h^W(\rho^W, \mathbf{u}^W, T^W) &= \frac{|\mathbf{u}^W|^2 + 2T^W}{2} g^W, \\
 s_2^W(\rho^W, \mathbf{u}^W, T^W) &= (\mathbf{u}^W \cdot \mathbf{e}_2) g^W, \\
 s_3^W(\rho^W, \mathbf{u}^W, T^W) &= (\mathbf{u}^W \cdot \mathbf{e}_3) g^W.
 \end{aligned} \tag{38}$$

其中, $\mathbf{e}_i, i = 1, 2, 3$ 表示只有第 i 个元素非零的单位列向量。

数值模拟中, 取 $u_2^W = u_3^W = 1$, 在 $x \in (-0.5, 0.5)$ 中随机选择 $N_{\text{PDE}} = 500$ 个空间点, 选择 $x = \pm 0.5$ 处的固定点作为边界, 那么 $N_{\text{BC}} = 2$ 。使用 $\sigma(x) = \sin(x)$ 作为激活函数, 总训练步数为 10,000。Kn 分别取 0.1, 1, 2.5,

参考解为 DVM 的数值解, 则稳态时密度 ρ , 宏观速度 u_2, u_3 , 温度 T , 应力张量 σ_{13} 和热通量 q_1 的数值结果如图 2 所示。结果表明, 对于所有变量, 三个不同 Kn 对应的数值解和参考解都非常匹配。

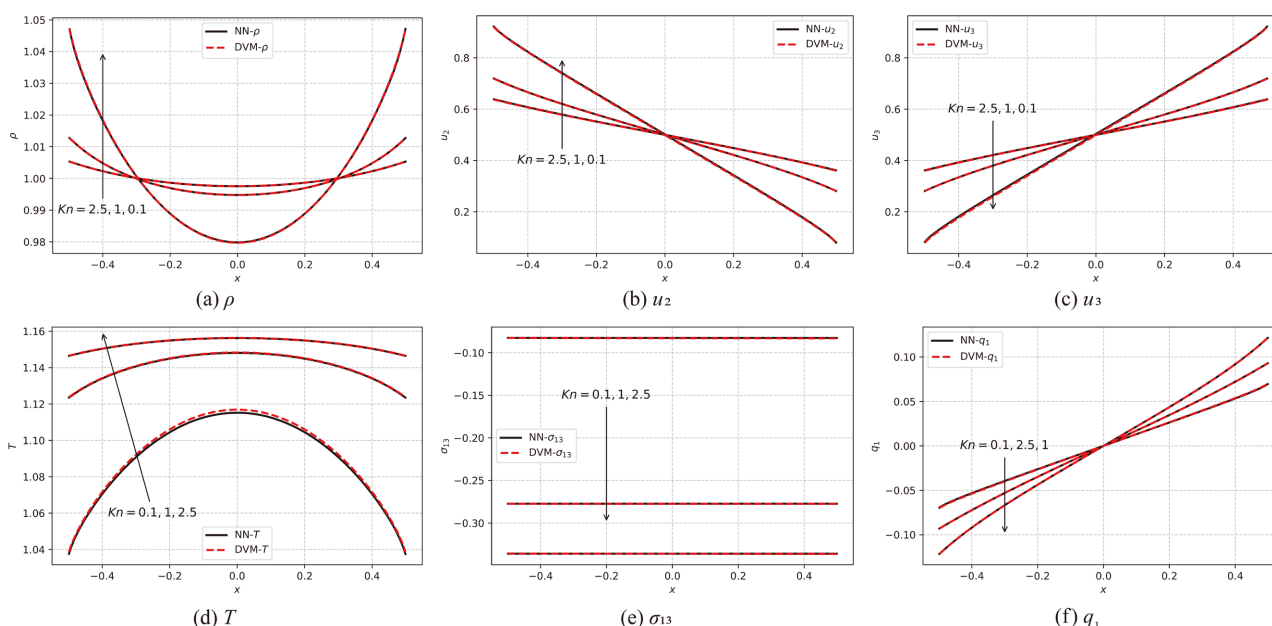


Figure 2. Numerical solution of ρ , u_2 , u_3 , T , σ_{13} and q_1 of the variant of Couette flow at steady state for $\text{Kn} = 0.1, 1, 2.5$

图 2. $\text{Kn} = 0.1, 1, 2.5$ 时, 稳态 Couette 流变体的数值解 ρ , u_2 , u_3 , T , σ_{13} 和 q_1

接下来, 我们考虑微观速度降维至二维情况的 Couette 流, 使用 DRNR 方法和 DVM 方法分别对其进行数值模拟, 通过比较两者的误差在达到相同数量级时所需的时间, 进行效率对比。数值模拟中, 取 $N_x = 400$ 时 DVM 计算的数值解作为参考解, 对于 DVM 方法, 选择一阶迎风格式, 计算时间为 $t = 10$, 计算区域为 $x \in (-0.5, 0.5)$, 空间网格点个数分别为 $N_x = 40, 80$, 对于 DRNR 方法, 通过调整空间采样点个数和训练步数, 分别计算两种方法得到的宏观量 ρ 与参考解的 L^2 误差, 在 DRNR 方法和 DVM 方法得到的误差达到相同数量级时, 记录两种方法的计算所需时间, 相应结果如表 1 所示。结果表明, 当空间点个数较少时, DVM 的计算时间比 DRNR 的略少, 但是随着空间点个数的增加, 可以发现 DRNR 方法所需的计算时间要少于 DVM 的计算时间。在一定的精度范围内, DRNR 方法随着精度的增加, 逐渐比 DVM 方法更有优势。但是由于机器学习方法的局限性, 无法达到更高的精度。

Table 1. Computational time of DRNR and DVM to achieve similar error for $\text{Kn} = 1$ at $t = 10$

表 1. 在 $\text{Kn} = 1$ 、 $t = 10$ 的条件下, DRNR 与 DVM 方法在达到相似误差时的计算时间

实验	实验一	实验二
N_x	40	80
误差	$1.78\text{e}-03$	$8.53\text{e}-04$
计算时间(DVM)	147	623
计算时间(DRNR)	267	537

4.2. 二维矩形风管流

本节研究二维矩形风管流的动力学。管道沿 z 轴无限延伸, 计算区域为 xy 平面中的矩形横截面

$\mathbf{x} \in [0,1] \times [0,1]$, 管道的四个侧面保持相同的温度 T^w , 管道的三个侧面静止 $\mathbf{u}_2^w = \mathbf{0}$, 顶面 $y=1$ 处沿 z 轴以速度 $\mathbf{u}_1^w$ 移动, 设

$$\mathbf{u}_1^w = \mathbf{u}_{\max} (\sin(\pi x)), \quad (39)$$

其中 $\mathbf{u}_{\max} = (0, 0, 0.5)$ 。需要注意的是, 在上方两个角处速度是连续的, 这样可以减轻奇异性对计算精度的影响。随着时间趋近于无穷大, 流体在顶板运动的驱动下达到稳定状态。该装置目的是模拟管道内稀薄气体流的动力学, 强调在可控二维环境中移动边界的影响。由于 z 轴不对称, 该问题的边界条件为

$$\begin{aligned} g^w(\rho^w, \mathbf{u}^w, T^w) &= \frac{\rho^w}{2\pi T^w} \exp\left(-\frac{(v_1)^2 + (v_2)^2}{2T^w}\right), \\ h^w(\rho^w, \mathbf{u}^w, T^w) &= \frac{|\mathbf{u}^w|^2 + T^w}{2} g^w, \\ s_3^w(\rho^w, \mathbf{u}^w, T^w) &= (\mathbf{u}^w \cdot \mathbf{e}_3) g^w. \end{aligned} \quad (40)$$

该问题的具体布局如图 3 所示。

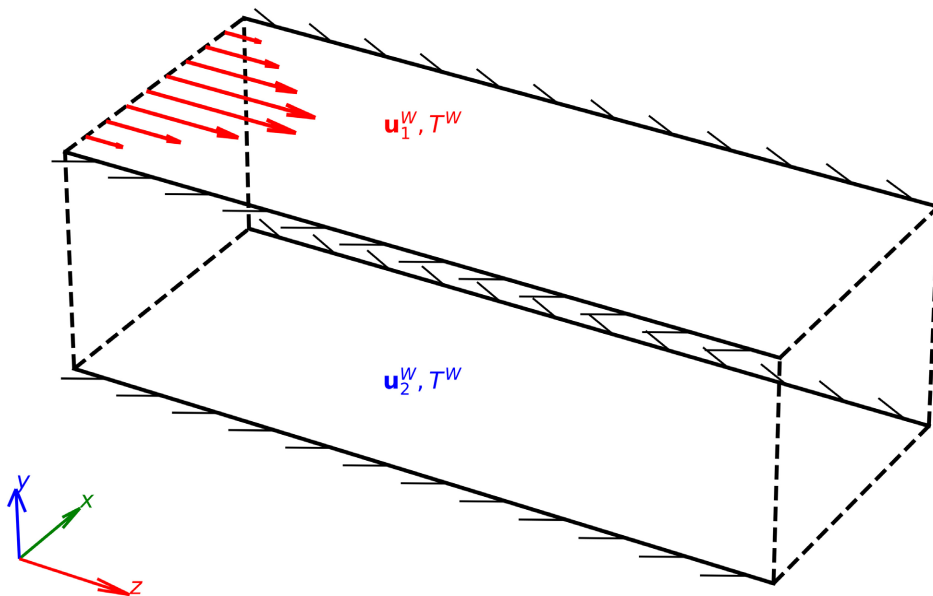


Figure 3. The layout of the 2D rectangular duct flow problem

图 3. 二维矩形风管问题示意图

在数值模拟中, 随机选取 $\mathbf{x} \in (0,1) \times (0,1)$ 中的 $N_{\text{PDE}} = 2000$ 个点, 每个边界使用 $N_{\text{BC}} = 300$ 个随机点进行离散, 总训练步数为 20,000。我们使用的激活函数为 $\sigma(x) = \sin(x)$, 可在特定的流体结构中表现出更好的性能。首先取 Knudsen 数 $\text{Kn} = 0.1$, 参考解也是 DVM 的数值解, 稳态时密度 ρ 、 z 轴的宏观速度 u_3 和温度 T 的数值结果如图 4 所示。结果表明, DRNR 得到的数值解 ρ 和 u_3 与参考解吻合较好, 然而数值解与参考解仍存在较小的差异, 不过相对误差小于 1%, 推断这是由于 Kn 较小时 BGK 方程的非线性造成的。

接下来, Knudsen 数增加到 $\text{Kn} = 1$, 我们发现数值解和参考解是重叠的。将 Knudsen 数增加到 $\text{Kn} = 2.5$, 这时数值解 u_3 和 T 与 DVM 得到的参考解具有很好的相关性, 而密度 ρ 存在一些较小的差异, 这表明 DRNR 方法具有高效性。

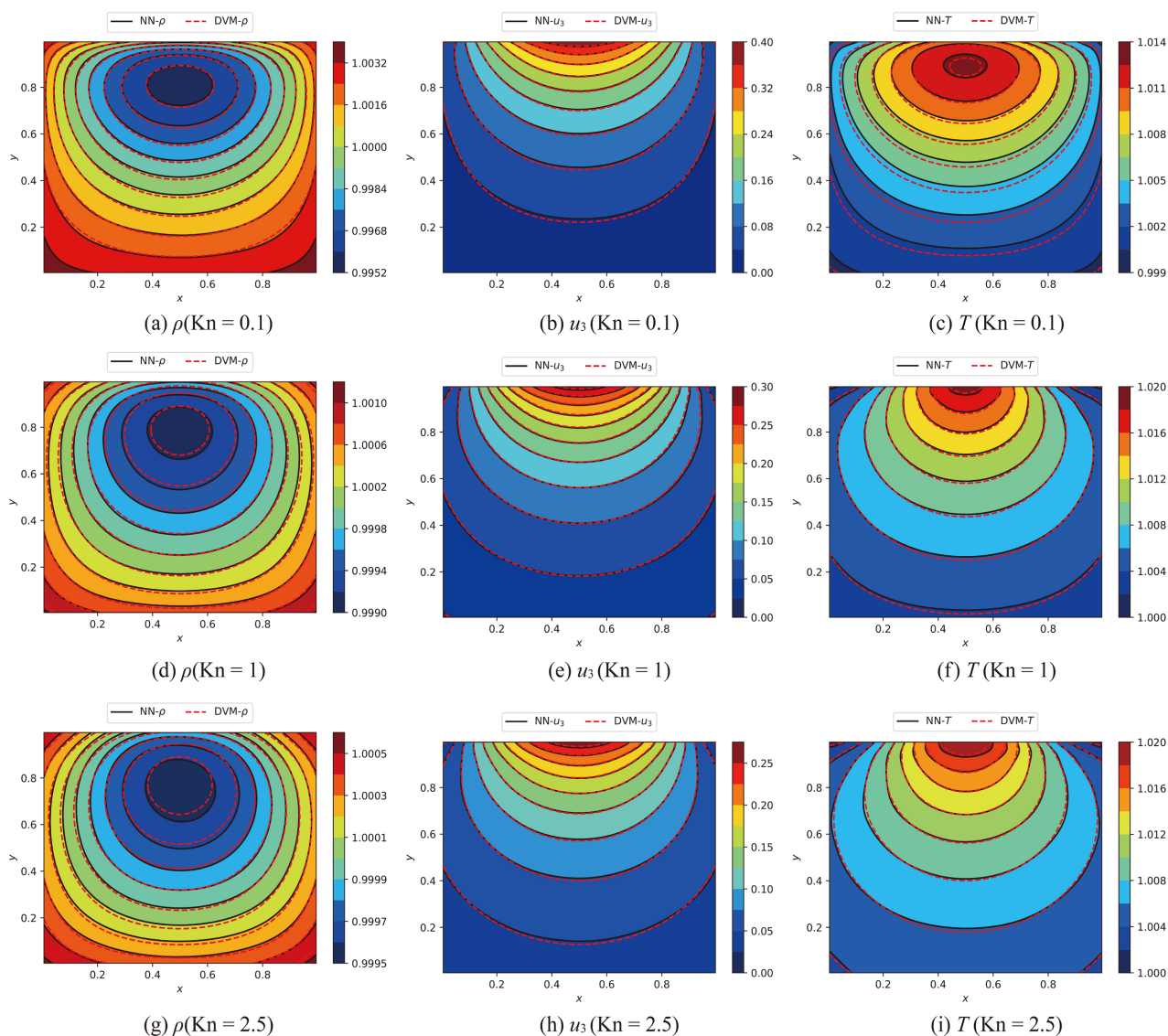


Figure 4. Numerical solution of ρ , u_3 and T at steady state for $\text{Kn} = 0.1, 1, 2.5$

图 4. $\text{Kn} = 0.1, 1, 2.5$ 对应的稳态时的数值解 ρ , u_3 和 T

5. 结论

本文采用神经网络的方法求解微流问题中的 Boltzmann-BGK 方程。首先通过分布函数的神经网络表示法构建降维模型, 实现对 BGK 方程的高效近似。为处理微流问题中的 Maxwell 边界条件, 设计了针对性的神经网络结构, 有效地降低了网络参数的复杂性。进一步提出包含初始条件、边界条件和 PDE 残差的损失函数, 极大地提高了神经网络的逼近效率。最后, 通过一维和二维的经典问题验证了该降维神经网络表示方法的准确性和有效性。

致谢

感谢北京大学的董彬教授、北京航空航天大学的张俊教授和北京计算科学研究中心的王艳莉研究员的宝贵建议。

基金项目

该工作得到了中国工程物理研究院院长基金项目(YZJJZQ2022017)、国家自然科学基金项目(编号: 12171026、U2230402、12031013)的支持。

参考文献

- [1] Shen, C. (2006) Rarefied Gas Dynamics: Fundamentals, Simulations and Micro Flows. Springer Science & Business Media.
- [2] Bird, G. (1994) Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford Engineering Science Series. Oxford University Press. <https://doi.org/10.1093/oso/9780198561958.001.0001>
- [3] Broadwell, J.E. (1964) Study of Rarefied Shear Flow by the Discrete Velocity Method. *Journal of Fluid Mechanics*, **19**, 401-414. <https://doi.org/10.1017/s0022112064000817>
- [4] Gamba, I.M., Haack, J.R., Hauck, C.D. and Hu, J. (2017) A Fast Spectral Method for the Boltzmann Collision Operator with General Collision Kernels. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **39**, B658-B674. <https://doi.org/10.1137/16m1096001>
- [5] Li, R., Lu, Y. and Wang, Y. (2023) Hermite Spectral Method for the Inelastic Boltzmann Equation. *Physics of Fluids*, **35**, Article ID: 102001. <https://doi.org/10.1063/5.0172157>
- [6] Grad, H. (1949) On the Kinetic Theory of Rarefied Gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **2**, 331-407. <https://doi.org/10.1002/cpa.3160020403>
- [7] Holloway, I., Wood, A. and Alekseenko, A. (2021) Acceleration of Boltzmann Collision Integral Calculation Using Machine Learning. *Mathematics*, **9**, Article 1384. <https://doi.org/10.3390/math9121384>
- [8] Han, J., Ma, C., Ma, Z. and E, W. (2019) Uniformly Accurate Machine Learning-Based Hydrodynamic Models for Kinetic Equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **116**, 21983-21991. <https://doi.org/10.1073/pnas.1909854116>
- [9] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E. (2019) Physics-informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [10] Chu, C.K. (1965) Kinetic-Theoretic Description of the Formation of a Shock Wave. *The Physics of Fluids*, **8**, 12-22. <https://doi.org/10.1063/1.1761077>
- [11] Yang, J.Y. and Huang, J.C. (1995) Rarefied Flow Computations Using Nonlinear Model Boltzmann Equations. *Journal of Computational Physics*, **120**, 323-339. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1168>
- [12] Maxwell, J.C. (1878) On Stresses in Rarefied Gases Arising from Inequalities of Temperature. *Proceedings of the Royal Society of London*, **27**, 304-308
- [13] Li, Z., Wang, Y., Liu, H., Wang, Z. and Dong, B. (2024) Solving the Boltzmann Equation with a Neural Sparse Representation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **46**, C186-C215. <https://doi.org/10.1137/23m1558227>
- [14] Bhatnagar, P.L., Gross, E.P. and Krook, M. (1954) A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, **94**, 511-525. <https://doi.org/10.1103/physrev.94.511>
- [15] Sitzmann, V., Martel, J., Bergman, A., Lindell, D. and Wetzstein, G. (2020) Implicit Neural Representations with Periodic Activation Functions. *Advances in Neural Information Processing Systems*, **33**, 7462-7473.
- [16] Kingma, D. and Ba, J. (2014) Adam: A Method for Stochastic Optimization. arXiv: 1412.6980.
- [17] Loshchilov, I. and Hutter, F. (2016) SGDR: Stochastic Gradient Descent with Warm Restarts. arXiv: 1608.03983.