

# 矩形通道内棒状纳米颗粒各向异性扩散的 PINNs 模拟

宋志德, 王雨梦, 刘春燕\*

北京建筑大学理学院, 北京

收稿日期: 2026年3月27日; 录用日期: 2026年5月13日; 发布日期: 2026年5月22日

## 摘要

本文旨在通过使用物理信息神经网络(PINNs)分析二维矩形通道内棒状纳米颗粒的各向异性取向行为。首先研究了含有棒状纳米颗粒的纳米流体在二维矩形通道中的瞬态流动, 并表征浓度和颗粒取向的耦合演化。通过使用无数据的PINNs, 将控制方程作为残差嵌入损失函数中, 并通过在流动区域随机采样配点在整个区域中实施物理约束。PINNs模拟准确地预测了速度、取向分布和浓度的耦合场。结果分析表明, 在近壁高剪切区域, 纳米颗粒由于剪切而与流动对齐, 而在通道核心, 布朗旋转增强了更随机的取向分布。同时, 较大的旋转Péclet数削弱了布朗旋转, 增强了Jeffery取向排列, 使颗粒更倾向于沿流动排列; 平移Péclet数控制各向异性的平移扩散, 决定了跨流线迁移的强度和方向。

## 关键词

各向异性扩散, 物理信息神经网络(PINNs), 机器学习, 棒状纳米颗粒

# PINNs Simulation of Anisotropic Diffusion of Rod-Shaped Nanoparticles in Rectangular Channels

Zhide Song, Yumeng Wang, Chunyan Liu\*

School of Science, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing

Received: March 27, 2026; accepted: May 13, 2026; published: May 22, 2026

## Abstract

This article aims to investigate the anisotropic orientation behavior of rod-shaped nanoparticles

\*通讯作者。

文章引用: 宋志德, 王雨梦, 刘春燕. 矩形通道内棒状纳米颗粒各向异性扩散的 PINNs 模拟[J]. 应用物理, 2026, 16(5): 489-502. DOI: 10.12677/app.2026.165045

within a two-dimensional rectangular channel by employing Physical Information Neural Networks (PINNs). Initially, the transient flow characteristics of nanofluids containing rod-shaped nanoparticles in such channels were examined, and the coupled evolution of concentration and particle orientation was delineated. By utilizing data-free PINNs, the governing equations are incorporated as residuals into the loss function, and physical constraints are enforced across the entire domain through random sampling and collocation within the flow region. The PINNs simulations accurately forecast the coupled fields of velocity, orientation distribution, and concentration. The analysis of results reveals that, in the high-shear regions adjacent to the walls, nanoparticles align with the flow direction due to shear forces, whereas in the channel core, Brownian rotation promotes a more random orientation distribution. Concurrently, a higher rotational Péclet number diminishes the effect of Brownian rotation, enhances Jeffery orientation alignment, and predisposes particles to align along the flow direction; the translational Péclet number governs anisotropic translational diffusion, dictating the magnitude and orientation of cross-streamline migration.

## Keywords

Anisotropic Diffusion, Physics-Informed Neural Networks (PINNs), Machine Learning, Rod-Shaped Nanoparticles

Copyright © 2026 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

纳米流体是通过将纳米颗粒分散到基液中形成的一类复杂两相悬浮体系。由于纳米颗粒能够改变流体的微观结构和宏观输运行为，纳米流体在复杂流场调控、多尺度悬浮液建模以及多物理耦合过程分析中展现出重要的研究价值[1]。早期研究多以球形纳米颗粒为对象，这类颗粒构成的悬浮体系在几何形态上具有各向同性，因而其运动、扩散与统计分布相对容易描述。Hamilton 等人[2]基于颗粒球形度和形状因子的关系提出了有效性质模型，为后续纳米流体研究奠定了基础。然而，球形颗粒的各向同性特征决定了其难以表征颗粒形状、定向排列以及流场诱导重构所带来的方向依赖行为，因此在描述复杂流动中的微观结构演化时存在明显局限。

与球形颗粒相比，棒状、椭球状等非球形纳米颗粒由于具有较高长径比，其在流动作用下会发生显著的取向演化，并进一步表现出与方向相关的扩散、迁移和应力响应行为。围绕非球形颗粒的取向与扩散行为，已有大量理论和数值研究开展。Jeffery [3]首先推导了粘性流体中椭球颗粒的运动方程，揭示了剪切流中非球形颗粒的基本转动规律。Folgar 和 Tucker [4]在此基础上引入旋转扩散项，以表征颗粒间相互作用对取向演化的影响。随后，Advani 和 Tucker [5]采用二阶和四阶取向张量对颗粒取向分布进行统计表征，为连续介质框架下的取向模拟提供了有效工具。针对高浓度体系中取向演化的非线性滞后与方向选择性，Phelps 和 Tucker [6]提出了各向异性旋转扩散(ARD)模型；Tseng 等人[7]进一步发展了改进的 ARD (iARD)模型，使扩散张量与取向主方向保持协调，从而提高了非球形颗粒取向预测的精度。与此同时，Subia 等人[8]提出了剪切诱导迁移的连续本构模型，用于描述由取向不均匀和浓度梯度共同驱动的悬浮液输运现象；Chiba 等人[9]研究了后向阶梯流动中高长径比纤维的取向演化，指出不同流动区域内颗粒取向存在显著差异；Karahan 等人[10]则基于 Fokker-Planck (F-P)方程建立了有限体积求解框架，使从稀疏到半浓缩纤维悬浮液的取向动力学模拟得到统一描述。然而，基于 F-P 方程的高维数值方法虽然能够

更完整地描述取向分布函数的演化，但在数值求解过程中仍面临稳定性要求高、计算成本大等问题。随着机器学习方法的发展，物理信息神经网络(PINNs)逐渐走进研究者的视野。

PINNs 方法由 Raissi 等人[11]首先提出，因其在物理问题建模中的多尺度物理集成能力而受到广泛关注。PINNs 通过强制满足守恒定律和整合实验数据来实现多尺度物理的统一建模。与此同时，Raissi 等人[12]开发的隐藏流体动力学框架将 Navier-Stokes 方程嵌入到神经网络中，直接从图像中提取速度场和压力场，具有独立于几何或边界条件的普适性。Liu 等人[13]探索了流体流动和热传递耦合问题的 PINNs 模型，该模型无需额外的模拟或实验数据即可解决，其效率和准确性通过方腔自然对流的经典案例得到了验证。这些研究也为使用 PINNs 求解多物理耦合问题打下了坚实的基础。

本文对含有棒状纳米颗粒的纳米流体在矩形通道的瞬态流动进行了数学建模，研究中涉及的 Fokker-Planck 方程具有多维参数空间和复杂的边界条件，由于方程组的高度耦合，对传统网格方法的计算成本构成了巨大挑战。为此，我们采用无网格物理约束的 PINNs 框架，并通过二阶取向张量闭合原始方程。研究表明，纳米粒子取向各向异性的空间分布存在显著差异：在近壁高剪切区，剪切力主导纳米粒子沿流动方向的排列；在流动通道的核心区域，布朗旋转效应增强了取向的随机分布。

## 2. 数学建模

### 2.1. 控制方程组

本研究假定棒状纳米颗粒是细长的。同时，这些颗粒是单分散的、中性浮力的、刚性的。假设纳米流体处于稀释浓度。每个颗粒有质心的位置矢量  $\mathbf{r}_c$  和方向矢量  $\mathbf{p}$ 。不考虑流动和颗粒耦合引起的附加应力，这在稀释浓度假设下是可以接受的。纳米流体的连续性方程和动量方程可以表示为：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\rho_{nf} \frac{\mathbf{D}\mathbf{u}}{\mathbf{D}t} = -\nabla p + \mu_{nf} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2)$$

其中， $\rho_{nf}$  表示纳米流体的密度， $\mu_{nf}$  表示纳米流体的动力粘度， $\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}$  表示物质导数， $\nabla$  表示流体空间的梯度算子， $p$  表示流体压力， $\mathbf{u} = (u, v)$  为速度矢量。其中纳米流体的密度和粘度定义为[14]：

$$\rho_{nf} = (1 - \phi) \rho_f + \phi \rho_p, \quad \mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \phi)^{2.5}}. \quad (3)$$

棒状纳米颗粒的各向异性扩散和取向的 F-P 方程[15]源自单粒子 Smoluchowski 方程和纳米颗粒取向，其中纳米颗粒取向的概率密度函数方程表示为：

$$\frac{\mathbf{D}\Psi}{\mathbf{D}t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_t \cdot \nabla \Psi) - \nabla_p \cdot (\dot{\mathbf{p}}_j \Psi) + D_r \nabla_p^2 \Psi, \quad (4)$$

其中， $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_c, \mathbf{p}, t)$  是纳米粒子取向的概率密度函数， $\mathbf{D}_t$  是平移扩散张量， $\dot{\mathbf{p}}_j$  遵循 Jeffery 方程， $\nabla_p$  是颗粒所在的构型空间中的梯度算子， $D_r$  是旋转扩散系数[16]。

平移扩散张量定义为：

$$\mathbf{D}_t = D_{\parallel} \mathbf{p}\mathbf{p} + D_{\perp} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{p}\mathbf{p}). \quad (5)$$

Jeffery 方程定义为：

$$\dot{\mathbf{p}}_j = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{p} + \frac{\lambda}{2} (\dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \mathbf{p} - \dot{\boldsymbol{\gamma}} : \mathbf{p}\mathbf{p}), \quad (6)$$

其中,  $D_{\parallel}$ 、 $D_{\perp}$ 是平行和垂直于粒子轴的扩散系数;  $\omega$ 是涡度张量;  $\dot{\gamma}$ 是应变速率张量,  $\lambda$ 是一个常数, 定义为  $\lambda = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 1}$ , 其中  $n$ 代表纳米颗粒的长径比。由于纳米粒子取向方程涉及流体空间和颗粒构型空间两个不同的空间, 是一个多维方程, 很难直接求解, 因此我们引入二阶矩张量  $A_2$ 对高维 F-P 方程进行简化。通过将等式(4)预乘  $\frac{pp}{V}$ , 并将其在空间和构型空间上积分, 我们可以得到:

$$\begin{aligned} \frac{DA_2}{Dt} = & -\frac{1}{2}(\omega \cdot A_2 - A_2 \cdot \omega) + \lambda(\dot{\gamma} \cdot A_2 - \dot{\gamma} : A_4) \\ & + 2D_r(C\delta - 2A_2) + D_{\perp}\nabla^2 A_2 + (D_{\parallel} - D_{\perp})\nabla\nabla : A_4, \end{aligned} \tag{7}$$

其中,  $A_4$ 为四阶矩张量, 我们使用二次闭合近似来使方程(7)闭合, 具体是通过 Cintra 等人[17]给出的纳米颗粒取向的二阶和四阶张量之间的关系, 如下:

$$A_4 = \frac{1}{C_0} A_2 \otimes A_2. \tag{8}$$

纳米流体的浓度场  $C$ 由  $A_2$ 迹给出, 其代表纳米流体中的颗粒平均数密度; 它是  $\Psi$ 的零阶矩:

$$C = \frac{1}{V} \int_p \int_{r_c} \Psi dr_c dp. \tag{9}$$

接着我们根据浓度场的定义对方程(7)等号两边同时取迹, 得到如下形式的浓度方程:

$$\frac{DC}{Dt} = D_{\perp}\nabla^2 C + (D_{\parallel} - D_{\perp})\nabla\nabla : A_2. \tag{10}$$

无量纲变量定义为:

$$\begin{aligned} x^* = \frac{x}{L}, y^* = \frac{y}{L}, u^* = \frac{u}{u_0}, v^* = \frac{v}{u_0}, t^* = \frac{tu_0}{L}, p^* = \frac{p}{\rho_{nf}u_0^2}, Pe_r = \frac{u_0}{D_r L}, \\ Pe_{\perp} = \frac{u_0 L}{D_{\perp}}, A_2^* = \frac{A_2}{C_0}, C^* = \frac{C}{C_0}, Re = \frac{\rho_{nf}u_0 L}{\mu_{nf}}, Pe_{\parallel} = \frac{u_0 L}{D_{\parallel}}, \end{aligned} \tag{11}$$

其中,  $Re$ 是雷诺数;  $Pe_{\parallel}$ 和  $Pe_{\perp}$ 分别是平行和垂直粒子轴方向的 Péclet 数;  $Pe_r$ 代表旋转 Péclet 数。忽略星标, 无量纲控制方程变成:

连续性方程:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \tag{12}$$

动量方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \tag{13}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \tag{14}$$

由于  $A_2$ 是一个对角矩阵, 在  $A_2$ 只有三个未知数。我们将矢量形式的二阶矩张量方程(7)展开成直角坐标系中的分量方程, 对于非常长和细的棒状粒子,  $Pe_{\perp} = 2Pe_{\parallel}$ 的关系是适用的:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial A_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial A_{11}}{\partial y} = & -\frac{A_{12}}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( 2A_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right. \\
& \left. - 2 \left( A_{11}^2 \frac{\partial u}{\partial x} + A_{11}A_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + A_{11}A_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) + \frac{2}{Pe_r} (C - 2A_{11}) \\
& + \frac{1}{Pe_{\perp}} \left( \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial y^2} + \left( \frac{\partial A_{11}}{\partial x} \right)^2 + A_{11} \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x} \frac{\partial A_{12}}{\partial y} + 2A_{11} \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x \partial y} \right. \\
& \left. + 2 \frac{\partial A_{11}}{\partial y} \frac{\partial A_{12}}{\partial x} + 2A_{12} \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial A_{11}}{\partial y} \frac{\partial A_{22}}{\partial y} + A_{11} \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial y^2} + A_{22} \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial y^2} \right),
\end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial A_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial A_{12}}{\partial y} = & -\frac{1}{2} \left( \frac{A_{22}}{2} - \frac{A_{11}}{2} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( A_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \left( \frac{A_{11}}{2} + \frac{A_{22}}{2} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right. \\
& \left. - 2 \left( A_{11}A_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{12}A_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + A_{12}A_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) \\
& - \frac{4}{Pe_r} A_{12} + \frac{1}{Pe_{\perp}} \left( \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x} \frac{\partial A_{12}}{\partial x} + A_{12} \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x^2} + A_{11} \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x^2} \right. \\
& \left. + 4 \frac{\partial A_{12}}{\partial x} \frac{\partial A_{12}}{\partial y} + 4A_{12} \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial A_{12}}{\partial y} \frac{\partial A_{22}}{\partial y} + A_{12} \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial y^2} + A_{22} \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial y^2} \right),
\end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial A_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial A_{22}}{\partial y} = & -\frac{A_{12}}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\lambda}{2} \left( A_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2A_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right. \\
& \left. - 2 \left( A_{11}A_{22} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{12}A_{22} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + A_{22}A_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) + \frac{2}{Pe_r} (C - 2A_{22}) \\
& + \frac{1}{Pe_{\perp}} \left( \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial y^2} + \left( \frac{\partial A_{22}}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial A_{11}}{\partial x} \frac{\partial A_{22}}{\partial y} + A_{22} \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x^2} + A_{11} \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial x^2} \right. \\
& \left. + 2 \frac{\partial A_{12}}{\partial y} \frac{\partial A_{22}}{\partial x} + 2A_{22} \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial A_{12}}{\partial x} \frac{\partial A_{22}}{\partial y} + 2A_{12} \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial x \partial y} + A_{22} \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial y^2} \right).
\end{aligned} \tag{17}$$

浓度方程的分量形式为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{Pe_{\perp}} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A_{11}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 A_{12}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 A_{22}}{\partial y^2} \right). \tag{18}$$

相应的无量纲初始和边界条件定义为:

$$\begin{aligned}
t = 0: & u = v = 0, A_{11} = A_{22} = \frac{1}{2}, A_{12} = 0, C = 1, \\
t > 0: & \\
\text{入口: } & u = (1 - e^{-t})(1 - (y)^2), v = 0, A_{11} = A_{22} = \frac{1}{2}, A_{12} = 0, C = 1, \\
\text{出口: } & \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \frac{\partial A_{11}}{\partial x} = 0, \frac{\partial A_{12}}{\partial x} = 0, \frac{\partial A_{22}}{\partial x} = 0, \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \\
\text{壁面: } & u = 0, v = 0, \frac{\partial A_{11}}{\partial y} = 0, \frac{\partial A_{12}}{\partial y} = 0, \frac{\partial A_{22}}{\partial y} = 0, \frac{\partial C}{\partial y} = 0.
\end{aligned} \tag{19}$$

## 2.2. 物理信息神经网络(PINNs)

在 PINNs 的训练过程中, 我们选择使用均方误差的形式来构造损失函数( $L_{res}^k$ )。当  $k=1$  时,  $L_{res}^k$  代表连续性方程和动量方程的损失, 当  $k=2$  时, 它代表矩张量方程和浓度方程的损失。通过引入附加损失函数来应用边界条件( $L_{bc}^k$ )和初始条件( $L_{ic}^k$ )。类似地, 当  $k=1$  时,  $L_{bc}^k$  和  $L_{ic}^k$  代表连续性方程和动量方程的初始条件和边界条件, 当  $k=2$  时, 它代表矩张量方程、浓度和温度方程的初始条件和边界条件。

随后, 将这些组合损失函数相加, 以获得如下所示的总损失函数:

$$L_k = L_{res}^k + \beta L_{bc}^k + L_{ic}^k. \quad (20)$$

在方程(20)中,  $\beta$  是用户定义的边界条件损失的加权系数, 设置值为 2,  $L_k$  代表第一个( $k=1$ )和第二个( $k=2$ )神经网络训练过程的损失函数。各部分的损失函数由以下方程定义:

$$f_{con} = \nabla \cdot \mathbf{u}, f_{mom} = \rho_{nf} \frac{\mathbf{D}\mathbf{u}}{\mathbf{D}t} + \nabla p - \mu_{nf} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (21)$$

$$f_A = \frac{\mathbf{D}\mathbf{A}_2}{\mathbf{D}t} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{A}_2 - \mathbf{A}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}) - \lambda(\dot{\gamma} \cdot \mathbf{A}_2 - \dot{\gamma} : \mathbf{A}_4) - 2D_r(C\delta - 2\mathbf{A}_2) - D_{\perp} \nabla^2 \mathbf{A}_2 - (D_{\parallel} - D_{\perp}) \nabla \nabla : \mathbf{A}_4, \quad (22)$$

$$f_C = \frac{\mathbf{D}C}{\mathbf{D}t} - D_{\perp} \nabla^2 C + (D_{\parallel} - D_{\perp}) \nabla \nabla : \mathbf{A}_2,$$

其中,  $f_{con}$ 、 $f_{mom}$ 、 $f_A$  和  $f_C$  分别代表连续性方程、动量方程、二阶矩张量方程和浓度方程的损失函数。在瞬态模拟中, 初始条件应用于压力、速度、浓度等解变量, 边界条件损失函数确保边界处计算的解变量等于用户定义的值。组合剩余损失  $L_{res}^k$ 、边界条件损失  $L_{bc}^k$  和初始条件损失  $L_{ic}^k$  由下式给出:

$$L_{res_k} = \begin{cases} \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} (f_{con}^2 + f_{mom}^2), k=1 \\ \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} (f_A^2 + f_C^2), k=2 \end{cases}$$

$$L_{bc_k} = \begin{cases} \frac{1}{N_{bc}} \sum_{j=1}^{N_{bc}} \left( (u(x_j, y_j) - u)^2 + (v(x_j, y_j) - v)^2 + (p(x_j, y_j) - p)^2 \right), k=1 \\ \frac{1}{N_{bc}} \sum_{j=1}^{N_{bc}} \left( (\mathbf{A}(x_j, y_j) - \mathbf{A})^2 + (C(x_j, y_j) - C)^2 \right), k=2 \end{cases} \quad (23)$$

$$L_{ic_k} = \begin{cases} \frac{1}{N_{ic}} \sum_{j=1}^{N_{ic}} \left( (u(x_j, y_j, 0) - u)^2 + (v(x_j, y_j, 0) - v)^2 + (p(x_j, y_j, 0) - p)^2 \right), k=1 \\ \frac{1}{N_{ic}} \sum_{j=1}^{N_{ic}} \left( (\mathbf{A}(x_j, y_j, 0) - \mathbf{A})^2 + (C(x_j, y_j, 0) - C)^2 \right), k=2 \end{cases}$$

其中,  $N_f$ 、 $N_{bc}$  和  $N_{ic}$  分别为训练方程、边界条件和初始条件采样的训练点, 采样点数分别为 4000、4000、3000 个训练点。 $u(x_j, y_j)$  代表神经网络获得的结果,  $\mathbf{u}$  代表用户设定的目标结果, 其他变量的定义也类似。在本文中, 使用了两个神经网络。第一个神经网络由 4 个隐藏层组成, 每个包含 32 个神经元, 利用 Swish 激活函数。输入由时空坐标组成, 而输出代表所需的场变量, 包括速度和压力。通过 Sobol 采样在计算域内产生训练点, 并采用 Adam 优化器最小化基于物理的损失函数。选择 Swish 函数在自动微分和稳定梯度下实现平滑的高阶导数, 而 Sobol 采样用于减少点选择引起的误差。详细的参数设置如表 1 所示。

**Table 1.** Specific parameter settings of flow and transport models**表 1.** 流动和输运模型的具体参数设置

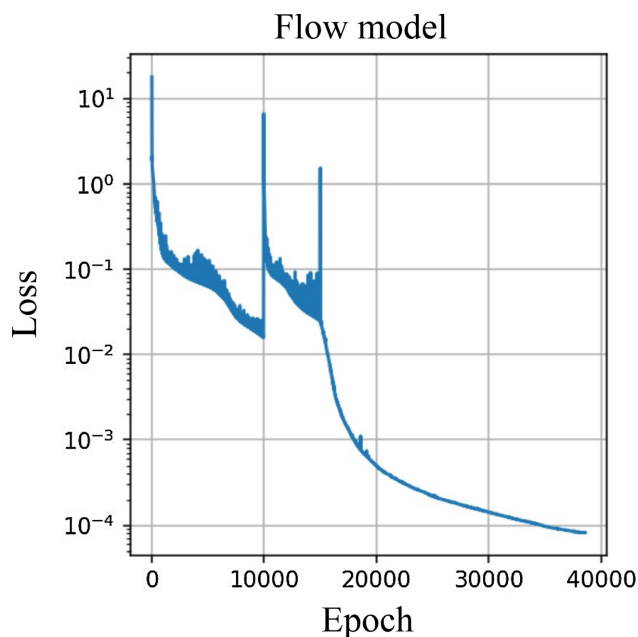
参数	流动模型	输运模型
隐藏层数	4	8
每层神经元数	32	40
激活函数	Swish	Swish
学习率	1.00E-04	1.00E-04
训练轮次	40,000	40,000
优化器	Adam	Adam

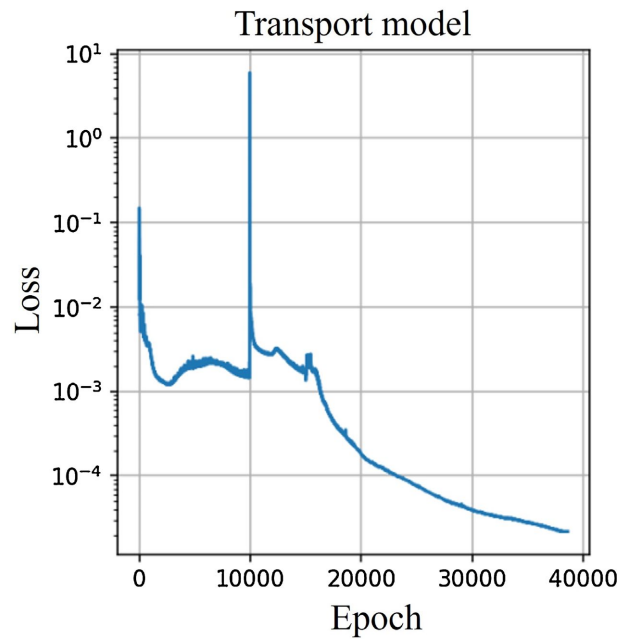
### 3. 结果与讨论

本文通过运用 PINNs 对棒状纳米颗粒不可压缩流体在非稳态下的层流流动与取向分布进行模拟，深入探究流场及取向分布的变化特征，得到的流场以及颗粒取向分布结果如下。

#### 3.1. 损失函数变化图像

图 1 和图 2 给出了流动模型与输运模型在训练过程中的损失函数演化规律。可以看出，两类模型的损失值总体上都随训练轮次增加而持续下降，并且在半对数坐标下跨越了多个数量级，说明 PINNs 在训练过程中逐步满足了控制方程、初始条件和边界条件所构成的物理约束。尽管在训练过程中出现了局部尖峰和波动，但曲线在波动后均能迅速回落并继续下降，最终稳定在较低量级。整体而言，这说明所构建的流动模型和输运模型均具有较好的训练收敛性，能够在当前问题设定下较稳定地逼近耦合物理场的解。

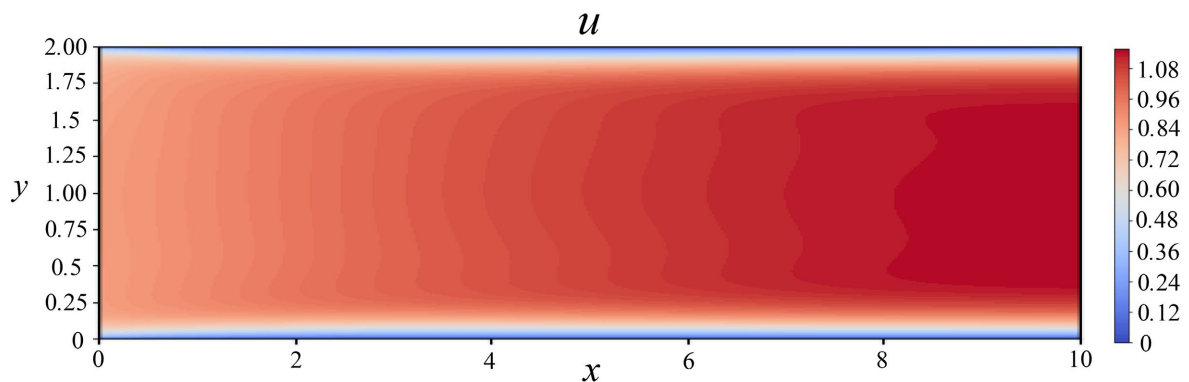
**Figure 1.** Picture of loss function variations during the training process of the flow model**图 1.** 流动模型训练过程损失函数变化图像



**Figure 2.** Picture of loss function variations during the training process of the transport model  
**图 2.** 输运模型训练过程损失函数变化图像

### 3.2. 二维矩形通道速度压强分布

图 3 展示了基于 PINNs 求解得到的二维矩形通道内沿流向速度场分布，在流向速度分布中，可以观察到速度在通道中心区域达到较高值，而在上下壁面附近迅速减小并趋近于零，体现了无滑移边界条件的约束作用。同时，随着流体沿  $x$  方向推进，速度分布逐渐由入口处的不均匀状态向下游平滑过渡，表现出典型的入口发展流动特征。



**Figure 3.** Flow velocity distribution  
**图 3.** 流向速度分布

图 4 展示了基于 PINNs 求解得到的二维矩形通道内横向速度场  $v$  分布， $v$  的整体量级显著小于流向速度  $u$ ，表明流动以主流方向为主。在入口附近， $v$  呈现出上下对称的正负分布，反映出流体在发展过程中通过横向调整以满足质量守恒。随着流动时间的增加，横向速度逐渐衰减并趋近于零，说明流动逐步达到充分发展状态，此时横向扰动基本消失。整体结果表明，PINNs 能够有效捕捉通道流动从入口发展到稳定阶段的关键物理特征。

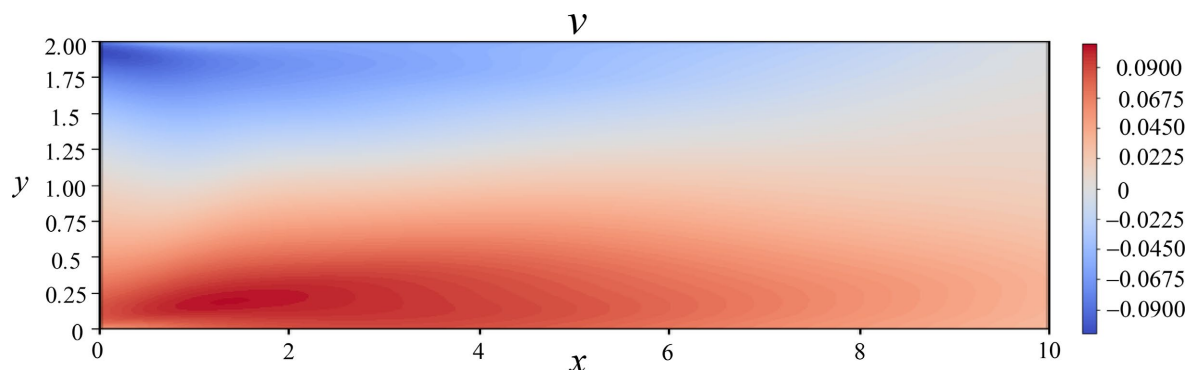


Figure 4. Lateral velocity distribution

图 4. 横向速度分布

图 5 展示了压强  $p$  整体沿流向  $x$  呈现由入口到出口逐渐减小的分布特征，表明流体在通道内流动过程中存在稳定的压降，这也是驱动通道流动的主要动力来源。从云图分布可以看出，压强在纵向方向上的变化较小，说明压力场主要受流向粘性耗散控制。该结果符合二维矩形通道内粘性流动的物理规律，即压力沿主流方向近似线性下降，并在横向上保持相对均匀。

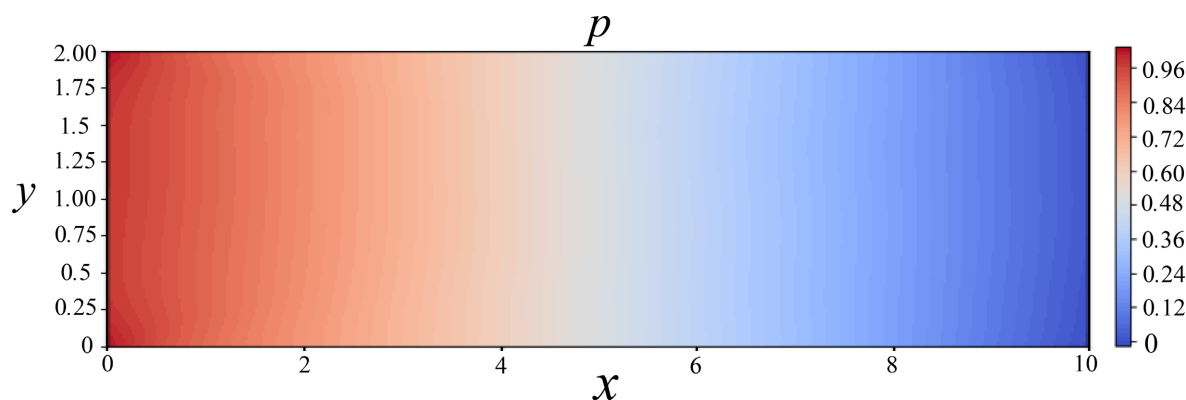


Figure 5. Pressure distribution

图 5. 压强分布

### 3.3. 纳米颗粒取向分布以及浓度分布

图 6 展示了沿流向取向分量  $A_{11}$  的分布，可以发现  $A_{11}$  在上下壁附近明显增大、在通道中心区域较小，说明颗粒在高剪切区更容易沿主流方向取向，而中心区由于局部剪切较弱，取向趋于随机。沿着  $x$  方向向下游发展，壁面附近的高值区域逐渐形成并保持，表明颗粒从入口的随机状态逐步过渡到稳定的沿流向定向状态。

图 7 展示了剪切倾斜分量  $A_{22}$  的分布，反映颗粒在  $x-y$  平面内的倾斜取向和剪切耦合强度。 $A_{22}$  在入口后和近壁区域变化最明显，并在通道内部出现正负交替分布，说明颗粒不是瞬间完成定向，而是经历了一个由随机取向向稳定取向逐步调整的过程。这张图反映的是入口发展段较强、随后逐渐平缓的取向过渡行为。

图 8 展示了横向取向分量  $A_{22}$  的分布， $A_{22}$  的分布中心区域较高。也就是说，在中心区，由于局部剪切较弱，颗粒不容易被完全拉向主流方向，因此仍保留较多横向取向成分；而靠近壁面时，强剪切促使颗粒更倾向于沿流向排列，于是  $A_{22}$  被压低。由于在二维情况下可以近似理解为  $A_{11} + A_{22} = C$ ，所以  $A_{22}$  的

空间分布实际上也反映了颗粒取向从随机取向到更偏向流向取向有序排列的重分配过程。

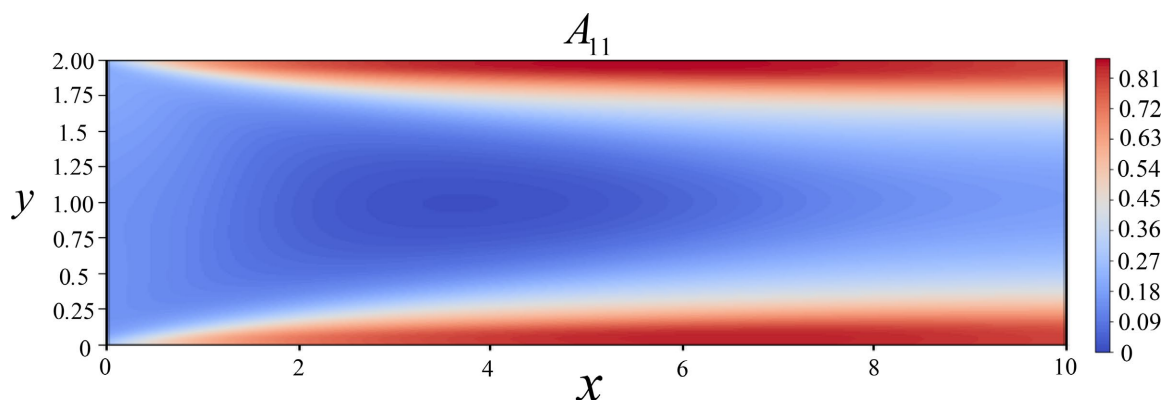


Figure 6. Distribution of orientation components  $A_{11}$  along the flow direction of  $Pe_{\perp} = 1000$ ,  $Pe_r = 1000$

图 6.  $Pe_{\perp} = 1000$ 、 $Pe_r = 1000$  下沿流向取向分量  $A_{11}$  的分布

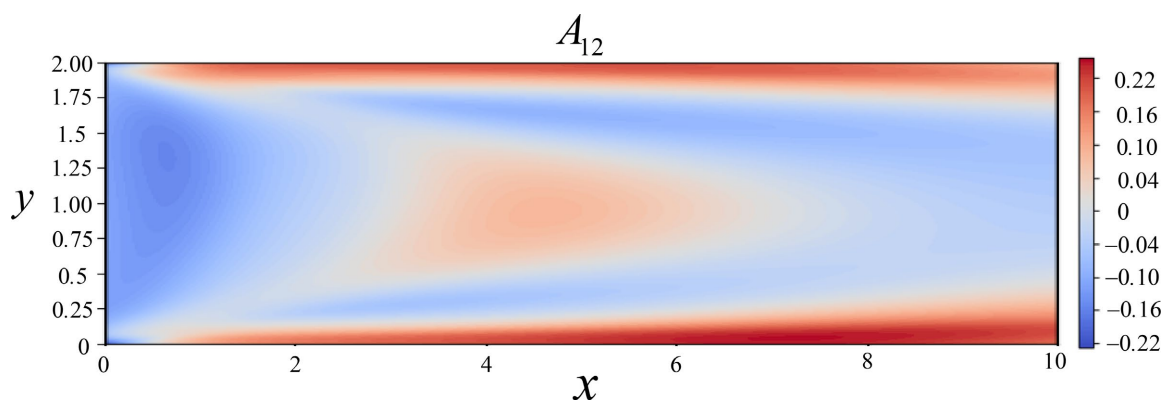


Figure 7. Distribution of shear tilt component  $A_{12}$  at  $Pe_{\perp} = 1000$ ,  $Pe_r = 1000$

图 7.  $Pe_{\perp} = 1000$ 、 $Pe_r = 1000$  下剪切倾斜分量  $A_{12}$  的分布

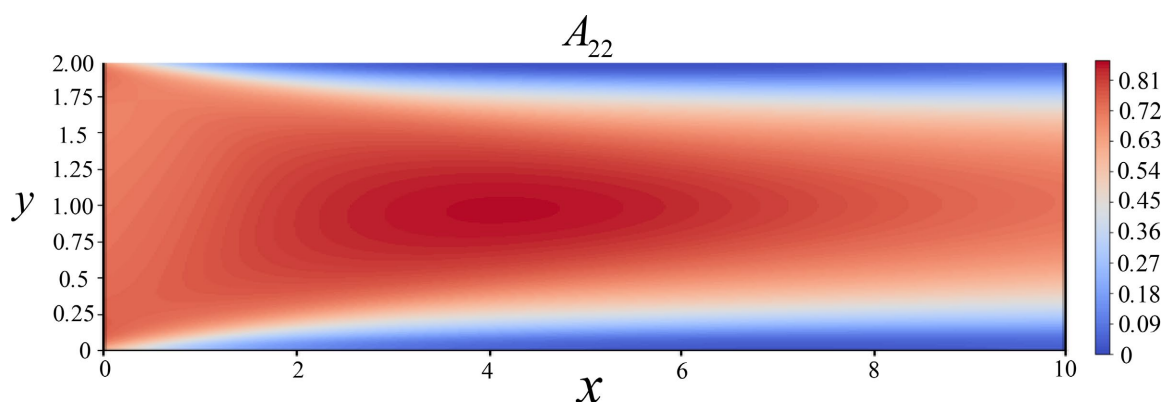


Figure 8. Distribution of lateral orientation component  $A_{22}$  at  $Pe_{\perp} = 1000$ ,  $Pe_r = 1000$

图 8.  $Pe_{\perp} = 1000$ 、 $Pe_r = 1000$  下横向取向分量  $A_{22}$  的分布

图 9 展示了颗粒浓度  $C$  的分布，浓度  $C$  的整体分布表现为壁面附近略有富集、核心区域相对偏低，但全场仍保持较接近均匀的状态。这说明颗粒确实发生了跨流线迁移，不过迁移幅度没有发展成特别强

的浓度分层。

图 10 和图 11 比较了不同参数配置下二阶取向张量分量  $A_{11}$  和  $A_{22}$  的空间分布特征。在固定旋转 Péclet 数  $Pe_r = 1000$  的条件下，随着横向平移 Péclet 数  $Pe_\perp$  的变化，颗粒取向的空间非均匀性表现出明显差异。对于  $A_{11}$  而言，其在上下壁面附近由于近壁高剪切作用促进颗粒沿主流方向排列，导致取值较高、在通道

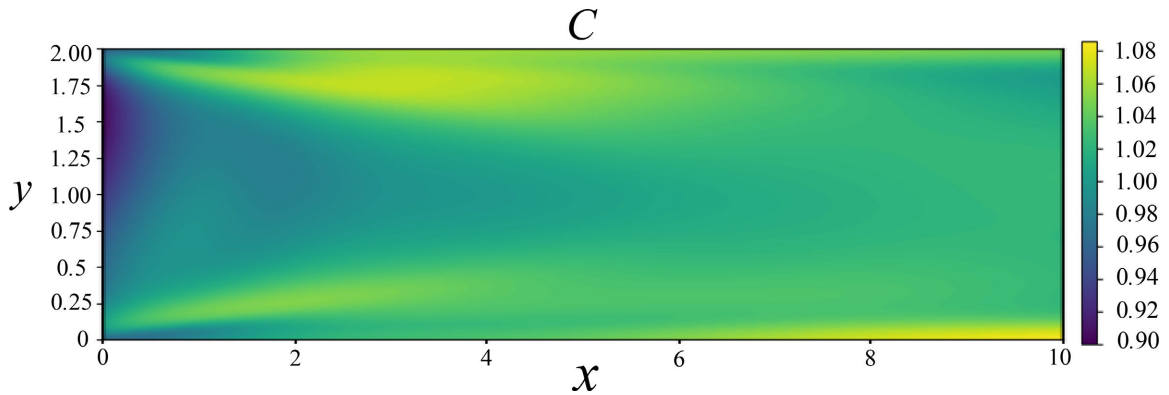


Figure 9. Distribution of particle concentration  $C$  at  $Pe_\perp = 1000$ ,  $Pe_r = 1000$

图 9.  $Pe_\perp = 1000$ 、 $Pe_r = 1000$  下颗粒浓度  $C$  的分布

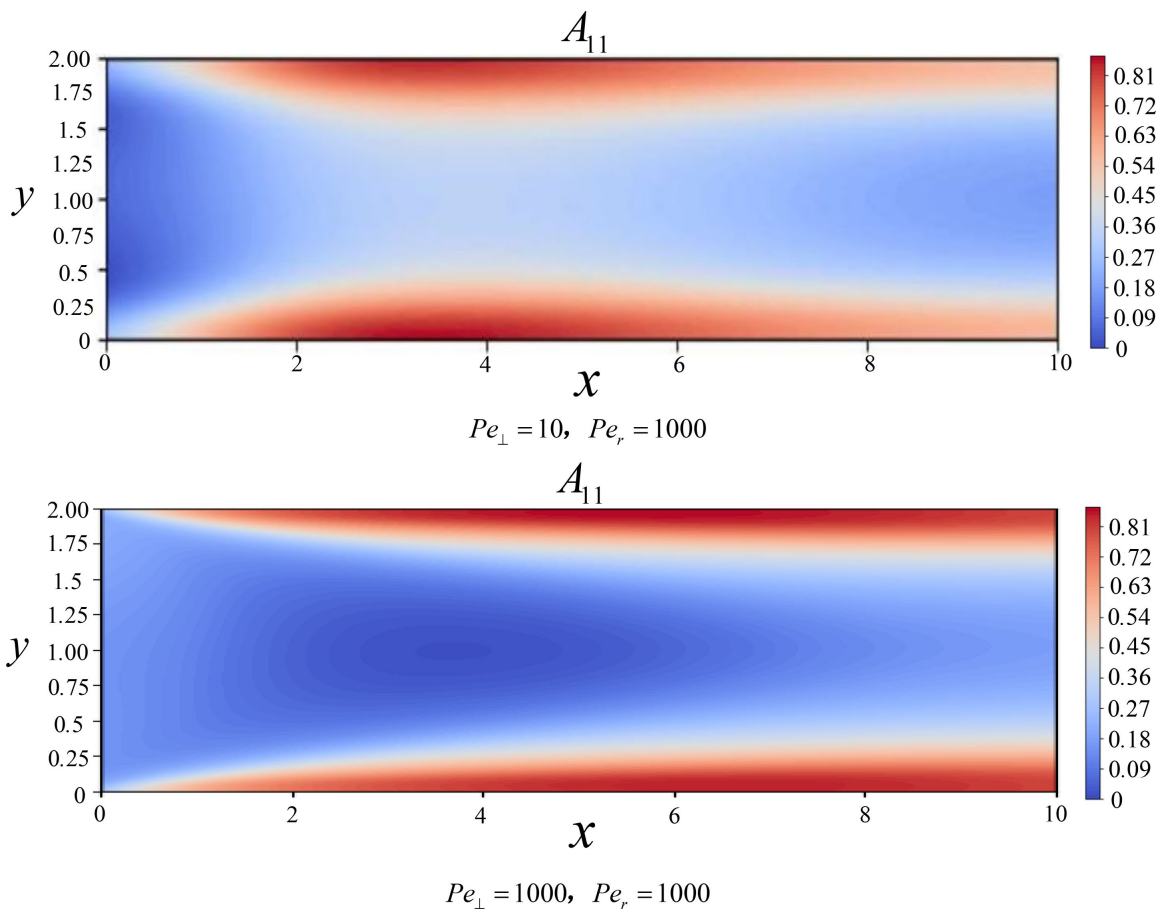
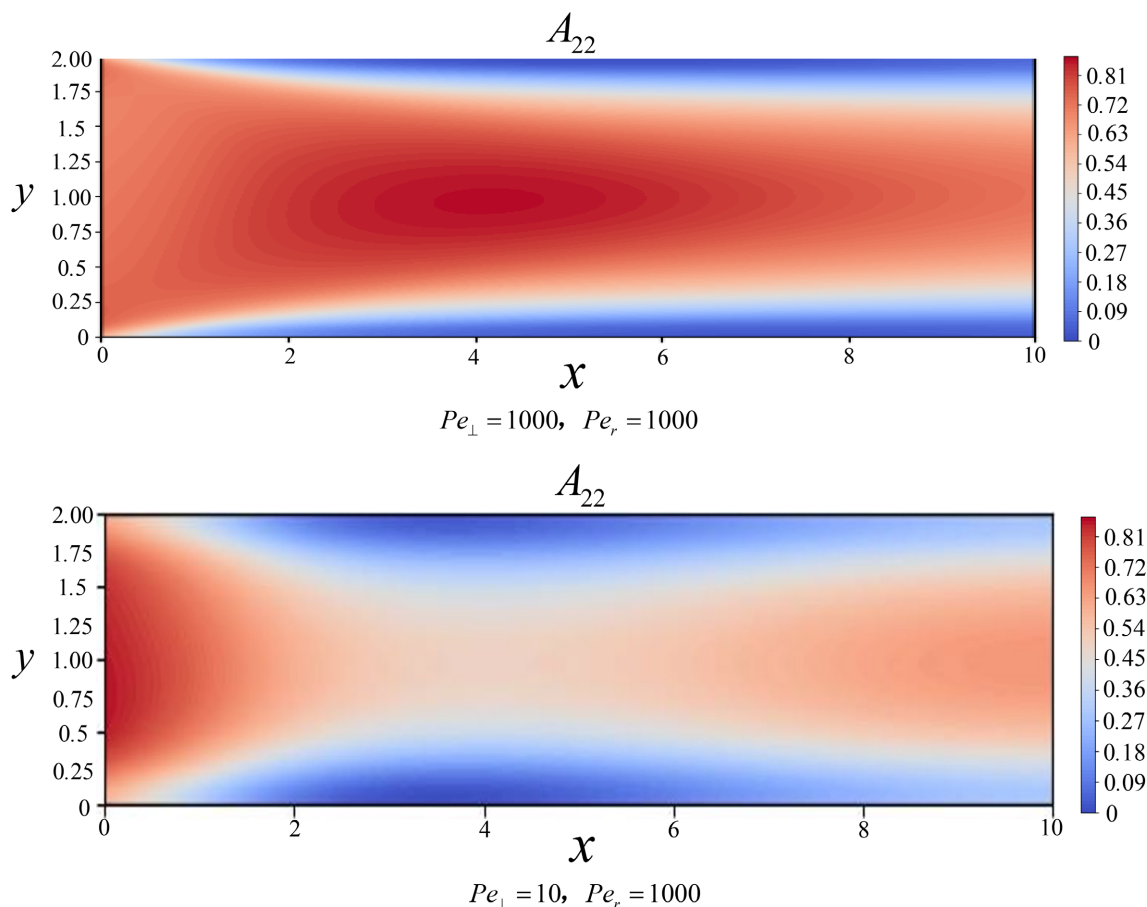


Figure 10. Distribution of  $A_{11}$  under different parameter configurations

图 10. 不同参数配置下  $A_{11}$  的分布



**Figure 11.** Distribution of  $A_{22}$  under different parameter configurations

**图 11.** 不同参数配置下  $A_{22}$  的分布

核心区域较低；当  $Pe_{\perp}$  增大时，这种壁面高值、中心低值的分区结构更加清晰，并且沿下游保持得更明显。与之对应， $A_{22}$  在通道核心区域保持较高水平，而在近壁处较低，反映出横向取向成分主要保留在低剪切的核区域；较大的  $Pe_{\perp}$  会使壁面的差异更加突出。综合来看，参数变化不仅影响取向分量的绝对大小，也会改变取向各向异性在空间上的分布强弱，从而进一步影响颗粒迁移与浓度重分布的趋势。

### 3.4. 模型局限性与结果适用范围

尽管本文结果揭示了二维矩形通道内棒状纳米颗粒取向与浓度耦合演化的基本特征，但仍需指出，当前模型建立在若干理想化假设之上，因此其结论更适合在这些假设范围内理解和使用。

首先，本文采用二次闭合近似将四阶取向张量表示为二阶张量的函数，以实现原始高维 Fokker-Planck 方程的降维求解。该处理显著降低了模型复杂度，使 PINNs 能够在可接受的计算成本下求解耦合问题，但与此同时也可能损失部分高阶取向统计信息。特别是在入口发展区、近壁高剪切区以及取向高度各向异性的区域，二次闭合近似可能会对真实取向分布的尖锐性和局部细节产生平滑作用，从而影响  $A_{11}$ 、 $A_{22}$  及相关浓度分布的定量精度。因此，本文结果更适合作为取向演化趋势与空间分布特征的描述，而对局部强各向异性区域的精确定量预测仍需谨慎解释。

其次，本文基于稀释浓度假设，忽略了颗粒与颗粒之间的流体动力学相互作用、碰撞效应以及颗粒附加应力对流场的反馈。这一假设使得模型能够聚焦于单颗粒尺度上的取向扩散与迁移机制，但也意味

着当前结果主要适用于低浓度悬浮体系。当颗粒浓度升高时，颗粒间相互作用会增强，旋转扩散、有效粘度以及剪切诱导迁移行为都可能发生变化。在这种情况下，本文模型可能会低估浓度升高后对流场和迁移行为的反向影响，因此其适用范围限定在稀释或近稀释悬浮体系。此外，本文还假定颗粒为细长、刚性、单分散且中性浮力的棒状颗粒，并将问题限制在二维矩形通道内。

最后，从数值求解角度看，本文主要展示了 PINNs 在当前方程体系下的可行性及其物理一致性，但尚未结合实验数据或高精度传统数值结果进行系统对比验证。因此，现阶段更适合将本文结果理解为在既定物理模型和参数条件下得到的数值分析结果，而不宜将其直接视为对更广泛实际体系的定量预测。

#### 4. 结论

本文针对二维矩形通道内含棒状纳米颗粒纳米流体的瞬态流动与颗粒取向以及浓度耦合输运问题，建立了基于连续性方程、动量方程、二阶取向张量演化方程以及浓度方程的物理模型，并采用无数据的 PINNs 进行了数值求解。通过将控制方程残差、初始条件和边界条件共同嵌入损失函数，本文实现了对速度场、压强场、颗粒取向分布及浓度分布的统一预测。结果表明，PINNs 能够较好地处理该类涉及流动、取向和扩散耦合的多物理场问题，为复杂纳米颗粒悬浮体系的无网格建模提供了一种可行的新思路。得出以下结论：

(1) 矩形通道内棒状纳米颗粒的取向分布具有显著空间非均匀性，整体表现为壁面附近定向增强、通道中心随机性较强，并沿流向逐步完成取向重构。

(2) 颗粒浓度分布与取向演化之间存在明显耦合，旋转 Péclet 数和横向平移 Péclet 数共同决定了颗粒最终的空间分布特征。

(3) 基于取向张量与浓度方程的 PINNs 框架不仅能够揭示棒状纳米颗粒在矩形通道内的微观结构演化规律，而且可为后续通过调控流动剪切与扩散参数实现颗粒分布优化提供理论依据。

#### 参考文献

- [1] Choi, S.U.S. (1995) Enhancing Thermal Conductivity of Fluids with Nanoparticles. *Developments and Applications of Non-Newtonian Flows*, San Francisco, 12-17 November 1995, 99-105. <https://doi.org/10.1115/imece1995-0926>
- [2] Hamilton, R.L. and Crosser, O.K. (1962) Thermal Conductivity of Heterogeneous Two-Component Systems. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, **1**, 187-191. <https://doi.org/10.1021/i160003a005>
- [3] Jeffery, G.B. (1922) The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **102**, 161-179. <https://doi.org/10.1098/rspa.1922.0078>
- [4] Folgar, F. and Tucker, C.L. (1984) Orientation Behavior of Fibers in Concentrated Suspensions. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, **3**, 98-119. <https://doi.org/10.1177/073168448400300201>
- [5] Advani, S.G. and Tucker, C.L. (1987) The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites. *Journal of Rheology*, **31**, 751-784. <https://doi.org/10.1122/1.549945>
- [6] Phelps, J.H. and Tucker, C.L. (2009) An Anisotropic Rotary Diffusion Model for Fiber Orientation in Short- and Long-Fiber Thermoplastics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **156**, 165-176. <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2008.08.002>
- [7] Tseng, H. and Favaloro, A.J. (2019) The Use of Informed Isotropic Constitutive Equation to Simulate Anisotropic Rheological Behaviors in Fiber Suspensions. *Journal of Rheology*, **63**, 263-274. <https://doi.org/10.1122/1.5064727>
- [8] Subia, S.R., Ingber, M.S., Mondy, L.A., Altobelli, S.A. and Graham, A.L. (1998) Modelling of Concentrated Suspensions Using a Continuum Constitutive Equation. *Journal of Fluid Mechanics*, **373**, 193-219. <https://doi.org/10.1017/s0022112098002651>
- [9] Chiba, K. and Nakamura, K. (1998) Numerical Solution of Fiber Suspension Flow through a Complex Channel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **78**, 167-185. [https://doi.org/10.1016/s0377-0257\(98\)00067-6](https://doi.org/10.1016/s0377-0257(98)00067-6)
- [10] Karahan, D.T., Ranjan, D. and Aidun, C.K. (2024) A Finite-Volume Framework to Solve the Fokker-Planck Equation for Fiber Orientation Kinetics. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **325**, Article ID: 105199.

- 
- <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105199>
- [11] 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>
- [12] Raissi, M., Yazdani, A. and Karniadakis, G.E. (2020) Hidden Fluid Mechanics: Learning Velocity and Pressure Fields from Flow Visualizations. *Science*, **367**, 1026-1030. <https://doi.org/10.1126/science.aaw4741>
- [13] Liu, M., Hu, H., Cui, Y., Song, J., Ma, L., Yuan, Z., et al. (2025) Modeling and Analysis of Droplet Generation in Micro-channels Using Interpretable Machine Learning Methods. *Chemical Engineering Journal*, **511**, Article ID: 161972. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.161972>
- [14] Brinkman, H.C. (1952) The Viscosity of Concentrated Suspensions and Solutions. *The Journal of Chemical Physics*, **20**, 571-571. <https://doi.org/10.1063/1.1700493>
- [15] Ayoubi, N.A.A., Digonnet, H., Silva, L., Binetruy, C., Renault, T. and Comas-Cardona, S. (2024) Simulation of the Fiber Orientation through a Finite Element Approach to Solve the Fokker-Planck Equation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **331**, Article ID: 105284. <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105284>
- [16] Doi, M., Edwards, S.F. and Edwards, S.F. (1988) *The Theory of Polymer Dynamics* (Vol. 73). Oxford University Press.
- [17] Cintra, J.S. and Tucker, C.L. (1995) Orthotropic Closure Approximations for Flow-Induced Fiber Orientation. *Journal of Rheology*, **39**, 1095-1122. <https://doi.org/10.1122/1.550630>