

PINN-LOCK — 基于物理约束的密度流高效智能仿真

宋予泽

摘要

当两种密度不同的流体相遇时，密度更大的流体会在重力驱动下潜入较轻流体的下方，自发形成一股向前推进的流动，这种流动被称为密度流。它无需外界驱动，仅凭自身的密度差异就能持续运动，并在演进中呈现丰富的流体动力学结构，例如清晰的前锋界面、不稳定的波动、不同尺度的涡旋等现象。密度流不仅是流体力学中的重要研究对象，更在水利工程、环境治理和气候变化等领域具有重要的研究价值与工程应用前景。目前密度流研究面临显著瓶颈：传统理论模型过度简化，难以准确捕捉三维涡动结构和湍流混合过程；而高精度数值模拟计算成本极高，难以支持大尺度、多场景的实际应用。为解决上述问题，本研究采用多方法融合的研究路径。我们首先通过水槽实验初步认识密度流现象；在此基础上，进行理论推导得出初始密度差与流速的函数关系，构建关键假设与控制方程。随后，采用计算流体力学方法对密度流的密度场与速度场演变进行高分辨率数值模拟，以获取详尽的流场数据。进而，引入物理信息神经网络（PINNs），将 Navier-Stokes 方程及连续性方程作为物理约束嵌入神经网络架构，构建出兼具数据驱动与物理一致性的 PINN-LOCK 混合模型。结果表明，在仅使用 1% 的采样点的情况下，PINN-LOCK 依然能够准确捕捉非稳态密度驱动流动中的界面演化与涡旋结构，预测精度不逊于传统数值方法。这不仅意味着计算资源消耗可大幅度降低，更显示出 PINN-LOCK 在稀疏数据、高维复杂边界以及非稳态流动研究中的独特优势。本项目不仅为密度流研究提供了一种高效可靠的模拟工具，也为自然环境、工程应用中多种密度驱动流体的研究提供了新思路。

关键词：密度流，Lock-exchange，模拟，PINNs，损失函数

目录

1	引言	2
2	密度流现象与理论	3
2.1	密度流水槽实验	3
2.2	密度流理论分析与求解	4
2.2.1	Lock-exchange 密度流控制方程推导	4
2.2.2	控制体积法求解 Lock-exchange 密度流理论解	5
3	密度流数值模拟	7
3.1	模型设置	7
3.2	模拟结果	8
3.3	敏感性实验	10
4	物理信息神经网络 (PINNs)	11
5	基于 PINNs 解决 Lock-exchange 非稳态问题	12
5.1	非稳态动力学与密度流	12
5.2	控制方程	12
5.2.1	动量方程	13
5.2.2	连续性方程	13
5.2.3	温盐方程	13
5.2.4	核心任务	13
5.3	网络结构	13
5.3.1	网络配置与训练策略	13
5.3.2	自动微分	14
5.3.3	优化策略	15
5.4	PINN-LOCK 损失函数	15
5.4.1	物理约束损失	15
5.4.2	数据损失	15
5.4.3	初始条件损失	16
5.4.4	边界条件损失	16
5.4.5	总损失	16
5.5	结果分析	16
5.5.1	时间演化	16
5.5.2	空间分布	18
5.5.3	定量评估	18
5.5.4	PINN-LOCK 与 ANN 模型的对比	19
6	结论与展望	20
6.1	结论	20
6.2	展望	21
7	致谢	23
8	数据来源	24

1 引言

密度流，又称重力流或异重流，是自然界和工程领域中一类由流体密度差异驱动的重要流动现象（图 1）。其典型实例广泛存在于多种尺度与环境中：小至室内空调冷气沉降、火灾烟气蔓延，大至山体滑坡、雪崩及火山碎屑流；在水体环境中，则表现为富含泥沙的浊流或高盐度咸水沿坡面向下的侵入 (Rottman et al. 1983; Farmer et al. 1986)。特别地，以咸重流为代表的跨跃极地和赤道海洋热盐环流 (Buckley et al. 2016)，是密度流在地球系统中的典型体现。密度流不仅是地质、海洋、气象等学科的基础研究对象，也在环境治理、能源利用和气候变化中具有重要的应用价值。



图 1. 大自然中的密度流现象

Lock-exchange 实验是研究密度流的经典物理模型实验之一。Simpson 等学者 (Simpson 1987) 通过设计 Lock-exchange 水槽实验研究其流动结构与传播规律。它是指在一个封闭水箱中，由隔板分隔的不同密度的静止流体在隔板移除后发生的流体运动现象（图 2）。在这个过程中，两种初始隔离的不同密度的流体会交换位置并混合。由于密度差异产生的剪切力会导致液体表面和底部层形成两个速度相等但方向相反的重力流。这个过程还会出现一些独特的物理现象，例如高密度水和低密度水在交界面处的混合以及由不稳定性引起的涡流和湍流 (Woods 1968)。

要想准确模拟密度流的运动特征，一直是流体力学里的难题。研究这类流动时，人们常常依靠一个最基础的方程——纳维-斯托克斯方程 (Navier-Stokes 方程)。它源自牛顿第二定律，用来描述流体是怎样运动的，具体包括速度、压力和密度在空间和时间上的变化，以及它们和外界作用力之间的关系 (Knauss 1997)。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 u + f \quad (1)$$

其中， u 表示流体速度场（向量）， t 为时间， ρ 为流体密度， p 为压力场， ν 为运动粘性系数， f 为外力项（如重力、科氏力等）， ∇ 为平流项， ∇^2 为扩散项。

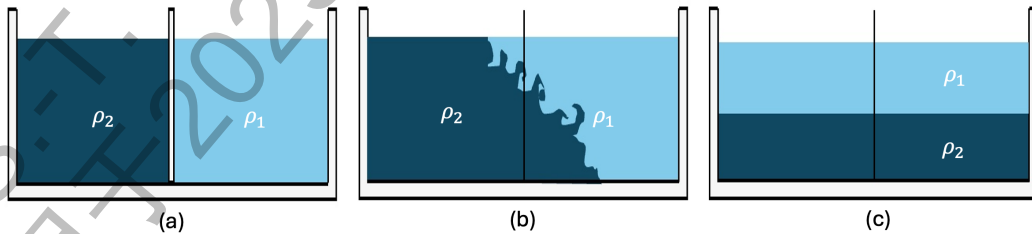


图 2. Lock exchange 实验示意图：在一个封闭水箱中，中间隔板将密度不同的两种液体 ($\rho_2 > \rho_1$) 分隔开，取出隔板后，两种液体发生分层运动现象

由于 Navier-Stokes 方程本身具有高度非线性和复杂性，在大多数情况下很难得到解析解，因此研究人员通常依赖数值方法来求解 (Pedlosky 1987)。通过合适的离散化、时间推进和边界条件处理，确实能够模拟各种复杂的海洋流动现象。不过，这些方法虽然宝贵，但想要做到高保真往往需要庞大的计算资源 (Cantero et al. 2007)；与此同时，实验数据的获取也十分困难。因此，传统的数值手段在成本和效率上都存在局限。这也引出了一个关键问题：我们缺少一种既能更快求解，

又能保持较高精度的偏微分方程求解方法。尤其在实验流体力学中，如何利用有限或不完美的流场数据，提取出更高分辨率的流动信息或关键特征，仍然是一个亟需解决的难题。

近年来，物理信息神经网络 (PINNs) 的提出为研究复杂流体系统提供了新的思路 (Raissi et al. 2019; Cuomo et al. 2022)。Raissi 等创新性利用 PINNs 框架，通过将物理定律作为先验知识嵌入神经网络架构，通过圆柱绕流经典案例，重建了流速场与压力场，从而实现了数据驱动与物理约束的结合。Cai 等 (Cai et al. 2021) 利用 PINNs，通过少量观测数据推断了移动界面、全域速度与温度场。与传统数值方法相比，PINNs 在无网格特性、数据驱动能力和灵活性方面具有明显优势。将 Navier-Stokes 方程直接嵌入神经网络的损失函数中，使其能够从稀疏或嘈杂的测量数据中学习，同时严格遵守底层物理规律。如果将 PINNs 推理应用于密度流模拟，不仅有助于提高预测精度和优化数据同化，还可能揭示尚未完全认识的物理机制。

本研究通过搭建 Lock-exchange 水槽实验，结合理论分析、数值模拟与深度学习方法，探究由密度变化驱动的上层水下沉与下层水上涌的动力学过程与机制。研究目标是为复杂自然系统的建模与预测提供新的路径，同时展示人工智能在流体力学研究中的应用潜力。具体研究方案如下：

1. 设计并开展密度流水槽物理模型实验，调控初始密度差并观察其对流动结构的影响；
2. 推导并求解密度流的控制方程，为实验现象解释与模型构建提供理论依据；
3. 开展数值模拟研究：基于 Lock-exchange 配置高分辨率数值模拟，系统研究密度流的流场特征及影响因子；
4. 构建基于 PINNs 的智能预测模型，融合物理约束与模拟数据，实现对密度流的高效预测与重构。

通过这些研究，本工作旨在验证 PINNs 在实际流体系统中的应用可行性，并为发展更高效、经济可靠的密度流模拟与预测方法提供理论参考与实践依据。

2 密度流现象与理论

2.1 密度流水槽实验

本实验在一个平底玻璃水槽中进行，水槽尺寸为长 1m × 高 0.5m × 宽 0.2m。水槽中部设有一可抽移隔板，将其均分为两个 0.5m 长的区域。两侧注入相同深度的液体：一侧为染色盐水（密度高），另一侧为透明淡水（密度低）。实验 1 中（图 3a, b），我们在左侧水箱中收集了约 0.015 立方米的淡水，并向其中加入了大约 0.5 公斤的盐。为了测量该盐水溶液的密度，我们准备了一个烧杯、一个量筒和一台天平。我们首先将一定量的盐水溶液倒入烧杯中，测量其质量，记为 m_1 ，然后将 200 毫升的盐水溶液转移到量筒中，再次将烧杯放在天平上，确定其质量，记为 m_2 。通过使用密度公式 $\rho = \frac{m}{V}$ ，利用测量值可以计算出盐水溶液的密度为 $\rho = \frac{m_1 - m_2}{V}$ 。计算得出的密度 1033.32 kg/m³。

为观察温度和盐度共同作用对水体密度的影响，我们在盐水中加入冰块。在第二个实验（图 3c, d）中，我们准备了相同体积的冰水（温度约为 7 摄氏度），并向其中加入了相同数量的盐。我们使用同样的方法测量密度。测得的密度约为 1035.57 kg/m³，这比第一个实验中观察到的密度稍大。这是因为冰在融化过程中吸收熔化潜热，导致周围水温下降，从而增大局部水体的密度。该耦合效应可促使高密度水团的形成，进而影响系统内的流动结构与分层行为。

我们观察到，当中间隔板移开后，结果形成两股相反方向的流体：一股沿着底部前进，另一股沿着表面往回流。盐水因为比淡水重，会不断向前推进，它的推动力更大，所以会朝着淡水的方向流过去。不过，随着盐水前锋越走越远，它的速度会逐渐减慢。这是因为盐水和淡水之间的界面在运动中慢慢变得平滑，不再像刚开始那样有强烈的密度差驱动。在界面处，我们还能看到盐水和淡水混合的现象，并且会出现一圈圈的涡旋，这其实是剪切不稳定造成的。在第二个实验里，即使换成了又冷又咸的水，流动形态并没有出现明显的变化。这说明在这里，盐度差可能比温度差更重要，起到了主导作用。当然，要彻底搞清楚背后的原因，还需要做更多实验和分析。

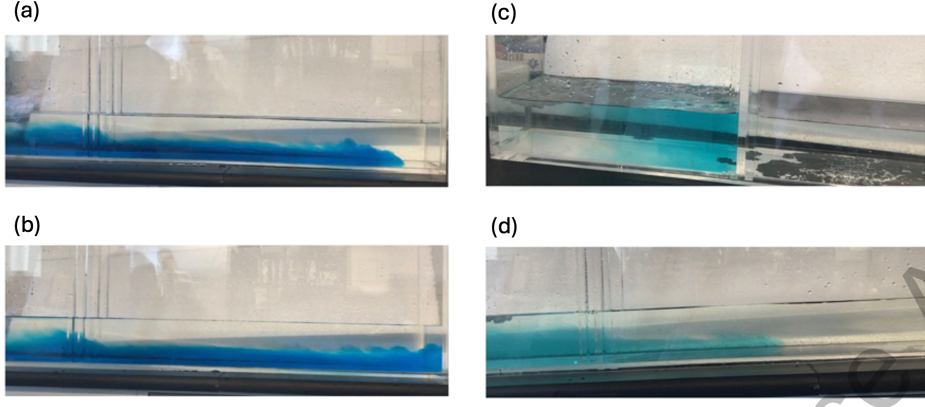


图 3. Lock-exchange 水槽实验结果。(a) 和 (b) 为实验 1 的结果，(c) 和 (d) 为实验 2 的结果

2.2 密度流理论分析与求解

上述水槽实验展示了由 Lock-exchange 效应产生的密度驱动流运动。可观测到头部抬升、卷吸混合、锋面不稳定性引起的涡结构。除实验观测外，该流动行为还可通过理论求解与数值模拟方法进行解析 (Huppert 2006)。从 Navier-Stokes 方程 (1) 出发，通过方程进行假设及化简，如经典的 Boussinesq 近似，对 Lock-exchange 密度流的解析特性进行推导。

2.2.1 Lock-exchange 密度流控制方程推导

类比于水槽模型，我们在 $x-z$ 平面上考虑二维流体运动，考虑压力梯度、重力和流体粘性等因素，设： $\rho(x, z, t)$ 为流体密度， $p(x, z, t)$ 为压力场， $\vec{u} = (u, w)$ 为水平 x 方向和垂向 z 速度分量， ν 为运动粘性系数（常数）， κ 为扩散系数（常数）。控制方程（二维不可压缩 Navier-Stokes + 质量守恒）可表示为：动量方程：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - \rho g_0 + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (3)$$

为了保证不可压缩流体的质量守恒，速度场的散度必须为零，即连续方程：

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

密度方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = \kappa \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right) \quad (5)$$

Boussinesq 近似假设下，密度变化只存在于重力项中，而在动量方程的其他项（如惯性项和粘性项）中可以忽略， g_0 为重力加速度，这时， $\rho = \rho_0 + \rho'$ 且 $\rho' \ll \rho_0$ ，定义约化重力 $g' = g_0 \frac{\rho'}{\rho_0} = g_0 \frac{\Delta \rho}{\rho_0}$ ，除重力项外， $\rho \approx \rho_0$ 。在此假设下，动量方程化简为：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (6)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\rho'}{\rho_0} g_0 + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (7)$$

Navier-Stokes 方程的简化可作为接下来数值求解的控制方程。

2.2.2 控制体积法求解 Lock-exchange 密度流理论解

为了更好地理解密度流的运动规律,我们希望先找到它的一个理论解。参考 Benjamin (Benjamin 1968) 的思路,我们采用“控制体积法”来推导锁交换密度流的前进速度。假设一个水槽被隔板分为左右两边,左边为重流体(密度为 ρ_2),右边为轻流体(密度为 ρ_1)。我们选择一个随密度流头部一起移动的控制体积(图 4 蓝色虚线框),把它想象成一个“虚拟盒子”。在这个盒子里,某个量(比如水的多少、运动的力量、能量)会增加或减少,而这种变化正好等于这些量通过盒子边界流进来和流出去的差值,并且与它受到的合外力有关。

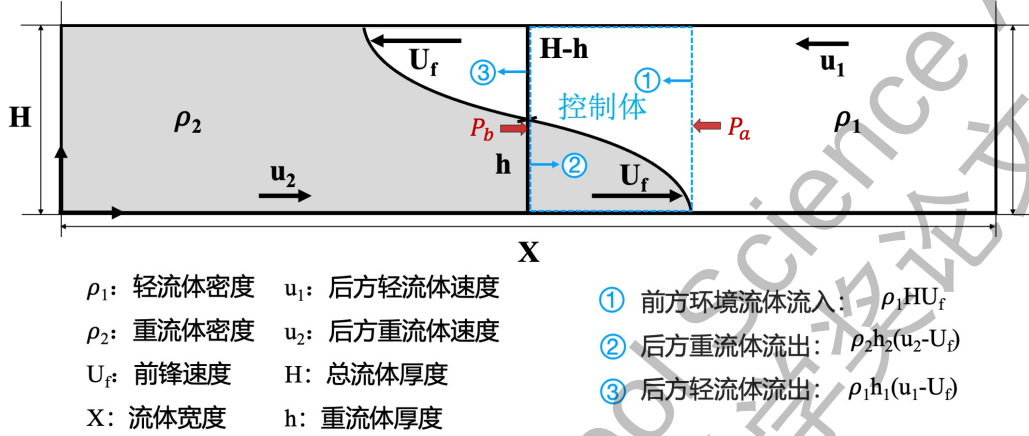


图 4. 求解 Lock-exchange 密度流速度场解析解关键变量及过程

在随动参考系中,左侧重流体向右下方推进,形成厚度为 h 的向右流前锋;假设前锋静止,则前锋后方重流体以相对前锋的速度 $u_2 - U_f$ 流入控制体,一部份轻流体厚度为 $H - h$,以相对速度 $u_1 - U_f$ 流出控制体积,右侧环境流体则以相对速度 $-U_f$ 向左上方从右侧回流,补偿推进控制体积;根据质量守恒,流入控制体积的质量流量必须等于流出的质量流量:

$$\rho_2 h (u_2 - U_f) + \rho_1 (H - h) (u_1 - U_f) + \rho_1 H U_f = 0 \quad (8)$$

将 Boussinesq 近似假设下 $\rho_1 \approx \rho_2$, (8) 式可化简为:

$$u_1 = \frac{h}{H - h} u_2 \quad (9)$$

根据动量守恒,前锋前方与后方的动量通量差等于控制体两侧静水压的合力差,

$$\rho_2 h (u_2 - U_f)^2 + \rho_1 (H - h) (u_1 - U_f)^2 - \rho_1 H U_f^2 = P_b - P_a \quad (10)$$

将 (9) 式代入,消去 u_1 可得:

$$\frac{\rho_1 H h}{H - h} u_2^2 = P_b - P_a \quad (11)$$

其中 $P_b - P_a$ 是单位宽度控制体在后方和前方静水压的合力差。取大气压 P_{atm} 为参考,静水压力由上向下累积,在任意高度 z 处,压力等于顶端大气压加上上方流体的重力积分。在前锋前方,全水柱为密度 ρ_1 ,任意高度 $z (0 \leq z \leq H)$ 处:

$$P_a(z) = P_{atm} + \int_z^H \rho_1 g_0 dz = P_{atm} + \rho_1 g_0 (H - z) \quad (12)$$

在后方,存在两层密度分段。当 z 在上层 ($h \leq z \leq H$) 时,后方上方到水面全为轻流体:

$$P_b(z) = P_{atm} + \int_z^H \rho_1 g_0 dz = P_{atm} + \rho_1 g_0 (H - z) \quad (13)$$

当 z 在下层 ($0 \leq z \leq h$) 时, 后方上方到水面全为轻流体, 后方上方包含两段: 从 z 到 h 是重流体 ρ_2 , 从 h 到 H 是轻流体 ρ_1 。因此:

$$P_b(z) = P_{\text{atm}} + \int_z^h \rho_2 g_0 dz + \int_h^H \rho_1 g_0 dz = P_{\text{atm}} + \rho_2 g_0 (h - z) + \rho_1 g_0 (H - h) \quad (14)$$

对于 $0 \leq z \leq H$ (上层), 式 (12) 等于式 (13), 两侧压力差相同, $P_b - P_a = 0$ 。

对于 $0 \leq z \leq h$ (下层),

$$\begin{aligned} P_b(z) - P_a(z) &= [P_{\text{atm}} + \rho_2 g_0 (h - z) + \rho_1 g_0 (H - h)] - [P_{\text{atm}} + \rho_1 g_0 (H - z)] \\ &= (\rho_2 - \rho_1) g_0 (h - z) \end{aligned}$$

控制体的水平方向压力合力等于在垂向上的压力差积分:

$$\begin{aligned} P_b - P_a &= \int_0^H [P_b(z) - P_a(z)] dz \\ &= \int_0^h [P_b(z) - P_a(z)] dz + \int_h^H [P_b(z) - P_a(z)] dz \\ &= \int_0^h (\rho_2 - \rho_1) g_0 (h - z) dz + 0 \\ &= (\rho_2 - \rho_1) g_0 \left[hz - \frac{z^2}{2} \right]_0^h \\ &= (\rho_2 - \rho_1) g_0 \left(h^2 - \frac{h^2}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \Delta \rho g_0 h^2 \end{aligned} \quad (15)$$

将 (15) 代入 (11), 化解可得:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_1 H h}{H - h} u_2^2 &= \frac{1}{2} \Delta \rho g_0 h^2, \\ u_2^2 &= \frac{1}{2} g_0' h \left(1 - \frac{h}{H} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

由于能量通量 (无耗散, 头部稳态) 可得到 $U_f^2 = 2u_2^2$, 代入 (16) 即得:

$$U_f^2 = g' h \left(1 - \frac{h}{H} \right) \quad (17)$$

基于控制体积法的理论推导与解析解表明, 密度流的前锋传播速度与约化重力加速度的平方根成正比。为验证该理论关系, 我们利用 Matlab 进行了数值求解演示 (代码见附件) 对比重流体厚度 h 与 U_f 的关系, 对于给定总水深 H 的系统, 密度流前锋速度在其厚度为总水深一半时 ($h = H/2$) 达到理论上的最大值 (图5a, $H = 1\text{m}$, 当 $h = 0.5\text{m}$ 时, U_f 最大), 即:

$$U_f = \frac{1}{2} \sqrt{g' h} \quad (18)$$

当 h 较小时, 驱动力 (正比于 $g' h$) 较小, 速度较低。当 h 较大时, 密度流需要排开更多环境流体, 克服更大的惯性阻力, 速度也会下降。只有在 $h = \frac{H}{2}$ 时, 驱动力和阻力达到最优平衡, 因此速度最大。需要指出的是, 该理论结果基于无粘性、无掺混、无底部摩擦及稳态流动等理想假设, 未考虑实际流动中的湍流混合与非定常效应, 因此与真实观测之间存在一定偏差。

我们还对比了不同初始密度差条件下前锋位置随时间的演化过程 (图5b-c)。结果表明, 初始密度差越大 (即约化重力加速度 g' 越大), 则前锋传播速度越快, 其在相同时刻所到达的位置也越远。数值模拟的结果清晰显示两者间的平方根函数关系 (图5d)。

理论分析表明, 初始密度差是控制密度流前锋速度的关键参数。更大的密度差直接转化为更强

的驱动浮力与水平压力梯度，意味着系统初始可用的势能更多，从而使得流体能够获得更高的动能与运动速度。该理论预测与物理实验结果吻合并符合直观的物理认知。

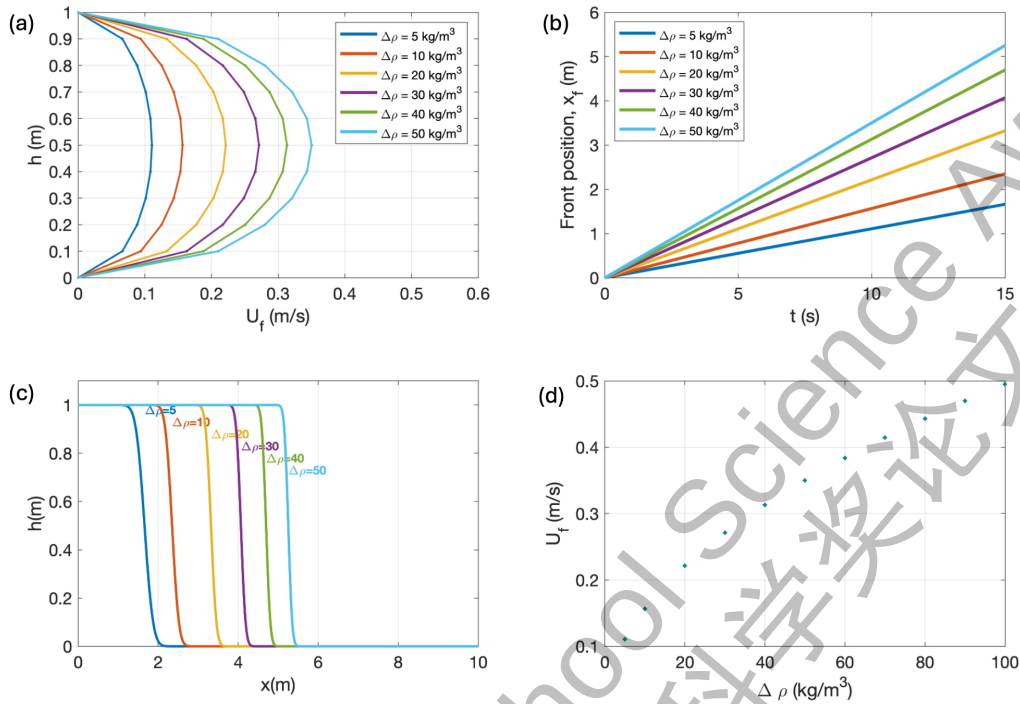


图 5. 密度流理论分析求解: (a) 不同初始密度差情况下重密度层厚度与前锋速度的关系, (b) 不同初始密度差影响下密度流前锋封面位置随时间的变化, (c) 不同初始密度差下密流界面最后达到位置, (d) U_f 与密度差的平方根函数关系。

3 密度流数值模拟

理论解析解虽然能成功揭示最核心的密度流物理规律 ($U_f \propto \Delta\rho$)，但它过滤掉了所有由粘性、混合、和不稳定性引起的复杂现象。解析解给出的是最终的平均速度或平衡状态，无法描述初始的加速过程、头部涡旋的生成与破碎。解析解中的界面是一条清晰的线，而真实界面是模糊的、充满涡旋和褶皱的湍流掺混区。数值模拟是解决复杂流体动力学问题的强大工具。对于 Lock-exchange 流，我们通常使用计算流体动力学 (CFD) 方法 (Shin et al. 2004)，通过数值求解完整的 Navier-Stokes 方程来模拟流动。相比于解析解依赖于强烈假设，无法捕捉真实流动的细节，数值模拟基于离散化的基本守恒定律可提供全流场的所有信息：速度 (u, w)、压力 (p)，和密度 (ρ) 随时间的变化。

3.1 模型设置

我们选取 SUNTANS 模型 (斯坦福非结构网格模型, Fringer et al. 2006, 下载于: <https://github.com/ofringer/suntans>)，模拟 Lock-exchange 密度流。在 Boussinesq 近似下，将 Navier-Stokes 方程简化为两层浅水方程。在模型运行之前，定义初始场和边界条件。图 6a 展示了我们案例中的网格设计，图 6b 和 6c 展示了实验配置方案和模型初始条件设置。

在 SUNTANS 模型中，水平网格基于 Delaunay 三角剖分，垂直网格使用 z 层结构化。依照 2.1.1 方程假设及化简，我们忽略水槽的宽度 (y 方向) 并假设沿 y 方向的速度可以忽略不计以此来简化模型。最后构建了一个二维网格， x 方向设计为 100 米 (L)，含有 500 个网格单元，垂向 (z) 深度为 20 米，有 100 个网格单元 (图6a)。这种网格分辨率的设计可以满足水平分辨率相对于深度 D 较小的要求，从而可以解析非静力效应。垂直方向使用拉伸网格进行离散化，网格间距比为 1.025，使得顶部网格较粗，底部网格较细。这种设置有利于研究重力流传播等现象。

对于边界条件，除了自由水面外，所有其他边界都是封闭边界，这意味着它们是固体壁面，速度为零 ($u, w = 0$)。时间步长设置为 $\Delta t = 0.2\text{s}$ ，总共运行 24000 步。水平网格尺度为 $\Delta x = \frac{L}{500}$ 。

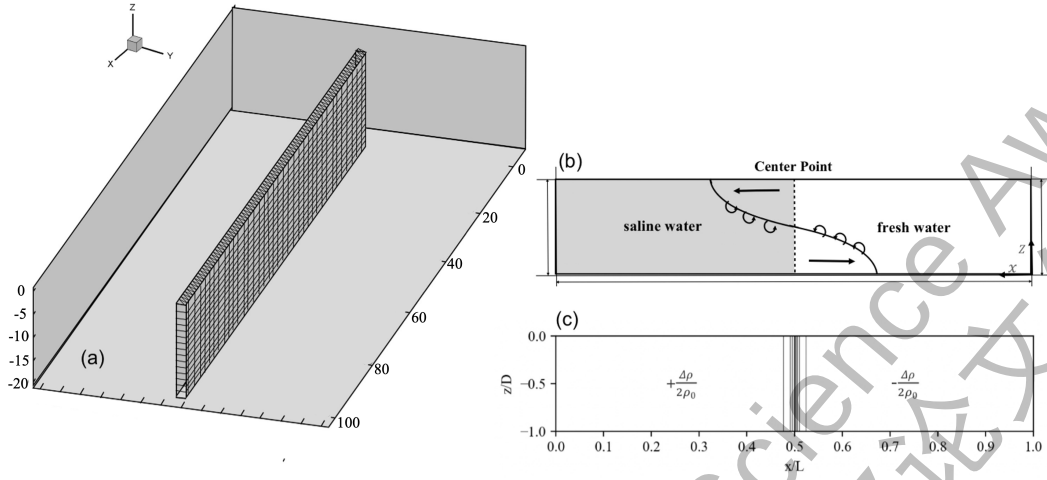


图 6. (a) Lock-exchange 模型网格设置。(b) Lock-exchange 示意图。(c) 模型初始条件设置。

速度场和表面高度设置为 0，初始密度场由下式给出：

$$\frac{\rho}{\rho_0} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \tanh \left[\frac{2 \tanh^{-1}(\alpha)}{\delta} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right] \quad (19)$$

其中， $\frac{\rho}{\rho_0} = 2 \times 10^{-3}$ 是初始时刻水箱左右两侧的密度差，是一个无量纲数。 $\alpha = 0.99$ 是定义界面范围的参数， $\delta = 5\text{m}$ 为高密度和低密度过渡界面厚度， x 是水平坐标； $L = 100\text{m}$ 是水箱长度。模型运行所需的初始条件是水深 ($z = 20$ 米) 和初始盐度。在我们的案例中，我们忽略了温度对密度的贡献，密度异常 ρ 仅作为盐度 s 的函数计算，即 $\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \beta \Delta s$ ，其中， β 为膨胀系数，这里我们取 $\beta = 1$ 。我们在 Linux 服务器上运行了 SUNTANS 模型。

3.2 模拟结果

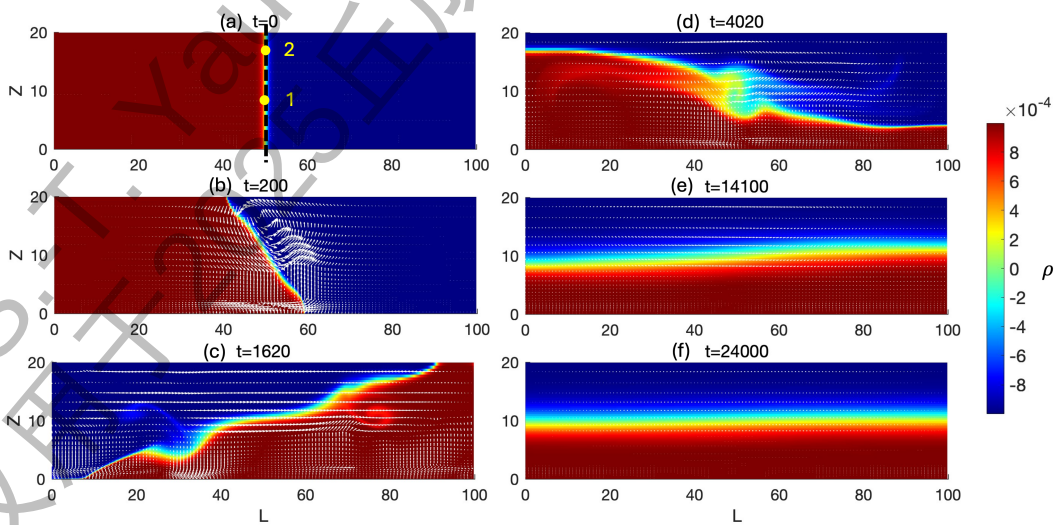


图 7. 初始条件为 $\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = 0.002$ 时不同时间步长的瞬时归一化密度场及流场。其中颜色代表密度场变化，白色箭头代表流场。

图 7 展示了不同时间的密度场和流场的变化。视频 2 展示了二维 Lock-exchange 密度场和流场的演变。模型初始条件如图 7a 所示，左侧表示高密度流体，右侧表示低密度流体。随着模型运行，

密度大的重力流向右沿着下边界移动，而一个浮力流向左沿着上边界移动。尽管这些流动方向相反，但从视觉上看，它们几乎是对称的。当到达右侧，面时，密度流开始反转，产生显著的非线性现象，如在流体交界处的混合和涡流结构。

为深入探究流场演化特性，本研究在水槽中布置了两个关键位置的监测点，用于记录水平流速分量 (u) 随时间 (t) 的演化过程。测点布置如图 7a 所示：监测点 1 位于重流体主体区域内，用于捕捉重流体核心区的运动特性；监测点 2 则布置于轻流体环境区域，用于监测环境流体的响应与补偿流动。测点 1 流体在压力梯度驱动下被加速，速度从零迅速攀升至一个正向峰值（图 8a，红色曲线），达到峰值后，速度会逐渐衰减并越过零线变为负值，形成第一次震荡。这是因为重流体头部在惯性作用下向前“冲过头”后，受到来自前方未受扰动的轻流体的压力和边界阻挡的反向分量作用，导致流体被短暂“拉回”。随后，速度曲线会呈现出振幅不断衰减的正弦式振荡，最终趋于一个稳定的正值。过程，反映了流动动能、势能（由密度差提供）和耗散能（由粘性和湍流提供）之间复杂的动态平衡与调整过程。同样道理，测点 2 具有类似运用，其相位与测点 1 的震荡大致相反（图 8b，红色曲线）。通过对比这两个反相位的信号，我们可以清晰地“看到”速度在系统中如何来回摆动，能量如何在不同区域之间交换，直至最终被耗散殆尽而达到稳定（图 8a，黑色曲线）。

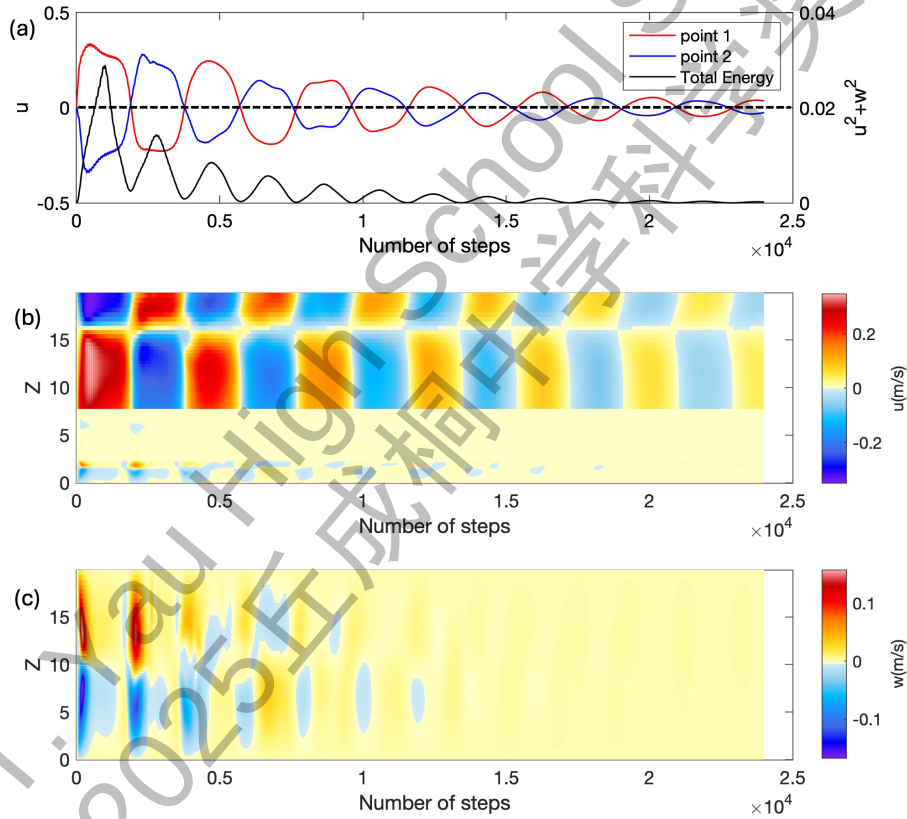


图 8. (a) 监测点 1 和 2 水平速度随时间的变化，以及能量随时间的耗散。(b) $x = \frac{L}{2}$ 处剖面（图 7a 虚线所示），水平速度 $u(z)$ 剖面随时间的变化，红色表示正向（向右）流动，蓝色表示反向（向左）流动。(c) $x = \frac{L}{2}$ 处剖面垂向速度 $w(z)$ 随时间的变化。红色表示上升运动，蓝色表示下沉运动。

我们还选取了一个沿水深方向 (z 方向)，位于模型区域 $x = \frac{L}{2}$ 处的固定断面（图 7a 虚线位置）进行深入分析流场的二维时空图像（图 8b,c）。随着模拟的进行，模拟区域的中上部出现一个倾斜的、高速的“楔形”舌状结构（高 u 值，红色）。这是密度流头部冲击该断面的瞬间，其倾斜度反映了头部的前倾形状。头部过后，一个深厚的正向流动层持续出现。在正向流出现的同时，上层立即出现一个持续的、强度相当的反向流动层（蓝色）。这是补偿流，是质量守恒定律最直观的体现。两个反向流动层之间的边界就是密度界面。主体通过后，正向流层厚度逐渐减小，速度减

弱，最终消失。整个流场由于内部波的震荡而缓慢趋于静止。

垂向速度剖面随时间的变化捕捉了流体的“升降”运动。当密度流头部经过断面时，呈现强烈的垂向速度信号。在头部前端，出现了一个强烈的上升流区 ($w > 0$)。这是因为向前推进的头部像“推土机”一样，将其前方和下方的环境流体向上推挤和抬升。在头部后方，为了填补头部前进后留下的空间，会产生一个补偿性的下沉流区 ($w < 0$)。这组一上一下的垂向速度对，构成了一个逆时针涡旋 (如图 7b, $t = 200$ 时)。

我们还发现，水体下层区域的水平速度梯度远小于上层界面剪切区域，速度分布相对均匀 (图 8b)。在上部界面区，流动由浮力驱动的剪切不稳定性主导。强烈的速度差和密度差激发了间歇性的湍流涡旋，导致了极高的局部剪切和剧烈的掺混活动，表现为极大的速度梯度。相比之下，下层流体主要受底床湍流边界层物理的控制，形成了一个相对均匀、以稳定输运的层结。

综上所述，本模拟成功再现了并捕捉到了驱动流与补偿流反向共存的结构，以及界面失稳和湍流掺混等关键细节。基于对密度流数值结果的时空序列分析显示，密度流并非一个均质的整体，其在垂向上存在明显的动力学分区。

3.3 敏感性实验

在第二章节，我们通过对 Lock-exchange 密度流的理论求解，证明了前锋速度 U_f 大小正比于约化重力 g' ($U_f \propto \sqrt{g'h}$)。为了系统评估初始密度差对密度流动力学行为的影响，我们开展了一系列数值敏感性试验，通过设定不同的初始密度差比值 $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ (例如 0.002、0.001、0.0005...)，在保持总水深、初始界面形态等其他参数一致的条件下，研究 Lock-exchange 流动中前锋速度的响应规律。

我们通过计算密度流前锋第一次打到右边界经过的时间来确定前锋的速度。在具有不同初始条件的多次运行中，速度通常随着初始设置中的 $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ 比值减小而减小。模拟结果验证了我们对密度减小会减缓的流动这一猜想 (图 9)。

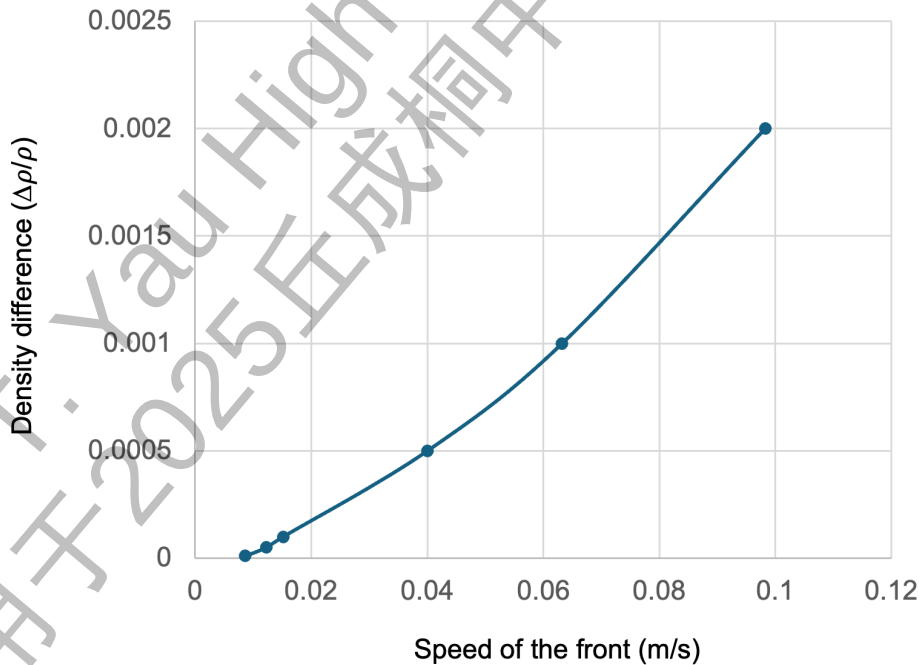


图 9. 不同初始条件下模型计算得到的流体前锋移动速度。

4 物理信息神经网络 (PINNs)

通过对 Navier-Stokes 方程进行数值求虽然能够高精度地捕捉界面的失稳、涡旋结构和混合过程，但其计算成本高昂且严重依赖网格划分。传统的机器学习方法，主要是通过学习输入和输出数据之间的规律来建模。其中一个典型的做法就是用人工神经网络 (ANN) (表 1)。简单来说，神经网络可以看作是一种“万能曲线拟合器”，理论上只要给它足够的数据，它就能学会逼近任何连续的函数关系。训练的过程就是不断调整网络的参数，让模型输出和真实数据尽量接近，这个差距就是所谓的“损失函数”。通过不断优化损失函数，神经网络就能捕捉到各种复杂的非线性关系 (Ellenson et al. 2020)。人工神经网络通过 N 层进行前向传播的过程可表示为：

$$a^{[1]} = x \in R^{n_1} \quad (20)$$

$$a^{[k]} = \sigma(W^{[k]}a^{[k-1]} + b^{[k]}), \quad 2 \leq k < N \quad (21)$$

$$a^{[N]} = W^{[N]}a^{[N-1]} + b^{[N]} \quad (22)$$

其中， $W^{[k]} \in M_{n_k \times n_{k-1}}(R)$ 和 $b^{[k]} \in R^{n_k}$ 为权重和偏置， σ 是激活函数。网络参数 $\theta = (W^k, b^k)_{k=2 \dots N}$ 使用梯度下降法进行优化：

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} L(\theta) = \arg \min_{\theta} \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} \|a^{[N]}(x_i) - y_i\|^2 \quad (23)$$

然而，单纯依赖数据的做法有一个根本问题：即便模型的输出在数学上和训练数据完全匹配，它也可能违背基本的物理规律。传统的人工神经网络训练时只是尽量减少预测结果与数据的误差，并没有考虑质量、动量或能量守恒等物理约束。因此，当遇到训练数据之外的情况时，它们可能给出不合理的预测。相比之下，PINNs 在训练时会把控制方程（偏微分方程）直接融入损失函数中，通过自动微分来保证输出遵循物理规律。这一过程可以借助 TensorFlow 或 PyTorch 等深度学习框架实现 (Raissi et al. 2019)。因此，PINNs 不仅能拟合已有数据，还能在数据稀缺或超出训练范围的情况下给出物理合理的预测，从而提高模型的可靠性和泛化能力。

对于一个一般形式的偏微分方程 $\partial_t v + D_x[v] = 0$ ，其中 $D_x[v]$ 表示在空间变量 x 上作用于 v 的某个微分算子，PINNs 将最小化由多个部分组成的损失函数：

$$L = \lambda_1 L_{PDE} + \lambda_2 L_{bc} + \lambda_3 L_{ic} + \lambda_4 L_{data} \quad (24)$$

其中， $L_{PDE} = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \|f(x_i^f, t_i^f)\|^2$ 为计算偏微分方程残差的损失项，该残差衡量神经网络预测结果与控制微分方程的符合程度。残差越小，表示对偏微分方程的满足程度越高，能更好拟合物理规律。理想情况下，残差 $\partial_t v + D_x[v]$ 为零，意味着完全符合偏微分方程，即完全遵守物理定律。通过在每一次前向传播之后引入这一损失，网络能够被引导至物理层面上正确的解。

此外， L_{ic} ， L_{bc} ，与 L_{data} 分别是用于约束初始条件、边界条件以及数据一致性的损失项，其计算方式如下：

$$L_{bc} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} \|v_{\mathcal{N}}(x_i^b, t_i^b) - g(x_i^b, t_i^b)\|^2, \quad (25)$$

$$L_{ic} = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} \|v_{\mathcal{N}}(x_i^0, 0) - h(x_i^0)\|^2, \quad (26)$$

$$L_{data} = \frac{1}{N_{data}} \sum_{i=1}^{N_{data}} \|v_{\mathcal{N}}(x_i^{data}, t_i^{data}) - v(x_i^{data}, t_i^{data})\|^2. \quad (27)$$

其中， (x_i^b, t_i^b) 表示边界上有边界值 $g(x_i^b, t_i^b)$ 的预设边界点， $(x_i^0, 0)$ 表示具有初始值 $h(x_i^0)$ 的初始条件点，而 (x_i^{data}, t_i^{data}) 表示从观测中采样得到的数据点，其对应的测量值为 $v(x_i^{data}, t_i^{data})$ (此处称为“真实值”或“ground truth”)。通过这种物理约束的优化方式，网络在学习数据的同时，

也会遵守物理规律，从而避免产生违反基本物理原理解。

表 1. 人工神经网络 (ANN) 与物理约束神经网络 (PINN) 的比较

特性	ANN (人工神经网络)	PINNs (物理信息神经网络)
核心目标	从纯数据中学习输入-输出的映射关系，实现预测	结合数据和物理定律，求解物理方程或模拟物理过程
训练目标	最小化数据误差	最小化数据误差 + 物理残差 (PDE residual) 的综合损失
数据需求	依赖大量标注数据 (监督学习)	可在数据稀缺时利用物理方程补充约束
先验知识	不引入领域知识，是“黑箱”模型	融入物理定律 (如 Navier-Stokes 方程、质量守恒方程)，增强可解释性
泛化能力	在数据分布外可能表现差，容易过拟合	由于物理约束，在数据稀缺区域也能保持合理性，泛化能力更强
计算复杂度	相对较低，主要优化网络参数	较高，需计算物理方程的梯度 (常使用自动微分)

5 基于 PINNs 解决 Lock-exchange 非稳态问题

5.1 非稳态动力学与密度流

在流体力学里，非稳态问题指的是速度、压力或其他物理量会随时间不断变化的流动，而不是保持恒定或周期性的稳态状态。Lock-exchange 就是一个典型的非稳态例子：当两种不同密度的流体最初被竖直隔板分开，隔板突然移开时，流体会开始运动，产生重力驱动的流动、湍流混合，以及密度界面的不断演化。这种瞬时变化的过程让密度流成为测试 PINNs 能否在较长时间内准确捕捉非稳态行为的理想案例 (Sundar et al. 2025)。

针对密度流，我们构建了一种物理约束神经网络 (PINNs)，称为 *PINN-LOCK*，用于学习密度流速度分量 (u, w)、压力 p 、以及盐度 s 的分布。该模型通过一个显式的复合损失函数来同时约束 Navier-Stokes 动量方程、连续性方程、标量输运方程，以及数据、初始条件，和边界条件。然而，以往的 PINNs 方法在处理非稳态问题时表现不佳。有研究指出，在长时间积分中，标准 PINN 容易出现误差累积和预测漂移，尤其当时间信息稀疏、初始条件约束不足时，其生成的结果可能退化为稳态特征，而无法捕捉复杂的瞬态演化模式 (Sundar et al. 2025)。针对这一点，本研究通过显式将时间作为网络输入、采用高权重初始条件损失及时间归一化手段，强化时间动态的建模与稳定传播，从而提升长期预测的准确性和物理一致性。

5.2 控制方程

我们采用，第三章节中的 Navier-Stokes 方程以及 Boussinesq 近似。模型旨在预测水平速度 u 垂直速度 w 、压力 p ，以及盐度 s 。它们均为空间 (x, z) 与时间 t 的函数。其中，流体密度 ρ 与盐度 s 通过状态方程线性相关：

$$\rho = \rho_0 \beta S \quad (28)$$

这里， ρ_0 表示淡水的参考密度， $\beta = 1$ 为盐度膨胀系数。借此方程，Navier-Stokes 方程能够被重新表述为 PINNs 训练所需的函数。在引入 Boussinesq 近似和状态方程的基础上，并考虑水平与垂直方向可能存在不同的黏性与扩散率，我们将控制方程转化为残差形式 (下文中的 f, g, c, h)。在网络训练过程中，这些残差通过神经网络参数调整，被逐渐驱至零，从而构成基于物理约束的损失项 L_{PDE} 。

5.2.1 动量方程

我们将 Navier-Stokes 动量方程所有项移到左边，构建偏微分方程的残差项，分别记为 f 和 g ：

$$f := \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} - \nu_h \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + \nu_v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (29)$$

$$g := \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + g_0 \beta S - \nu_h \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) - \nu_v \left(\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (30)$$

其中， ν_v 和 ν_h 分别表示水平与垂直方向的运动黏性系数。 p 为压强梯度力， g_0 为重力加速度。在动量方程中，我们不直接使用 $g_0 \rho$ 而是基于方程(28)，采用 $g_0 \beta S$ 来将流体运动与盐度变化耦合。

5.2.2 连续性方程

$$h := \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (31)$$

5.2.3 温盐方程

将前文状态方程(28)的假设代入 Navier-Stokes 方程，可以得到盐度场的演化方程。盐度的变化由以下方程描述：

$$c := \frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} + w \frac{\partial s}{\partial z} - \kappa_h \left(\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right) - \kappa_v \left(\frac{\partial^2 s}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (32)$$

5.2.4 核心任务

PINN-LOCK 模型的核心目标是通过深度神经网络来逼近一个函数：

$$(u, w, s, p) = N_\theta(x, z, t) \quad (33)$$

其中参数为 θ 。该函数不仅需要对观测数据进行良好的拟合，同时还要满足前述动量方程、连续方程以及盐度方程等物理约束。为此，模型构造了一个复合损失函数，其中包含四个残差项 (f, g, h, c)，通过最小化该损失函数，实现对数据拟合与物理规律的联合优化。

5.3 网络结构

PINN-LOCK 模型采用深度神经网络架构，专门设计用于求解由 Navier-Stokes 方程控制的密度流动力学问题

5.3.1 网络配置与训练策略

早期的 PINNs 方法在处理非稳态问题时存在局限。其主要原因在于时间维度往往被等同看作空间坐标来处理，从而导致网络难以有效捕捉随时间演化的动力学特征；同时，若对初始条件的约束不够严格，模型在长时间演化时会积累误差并偏离真实解。因此，针对非稳态问题的改进重点在于显式引入时间维度并强化初始条件约束，使得网络能够在动态过程中保持物理一致性并提升预测精度。该神经网络实现了全连接前馈（fully connected feed-forward）结构，其深度与宽度参数可配置。网络的输入为三维向量，包括水平位置 x 、垂向位置 z 以及时间坐标 t 。训练数据来自 SUNTANS 的数值解的前 3000 时间步，每隔 20 步输出一次数据，共 151 个时间步，每个时间步长包含 10,000 个空间点，总计约 1.51 百万数据点。

为了提高计算效率，系统对数据进行了抽样，选择约 1 % 的可用点（由图10所示），可通过随机抽样或针对边界的重点选择实现。训练过程中，对所有场变量进行 Z-score 标准化处理，以保证在优化过程中梯度传播的平衡性。

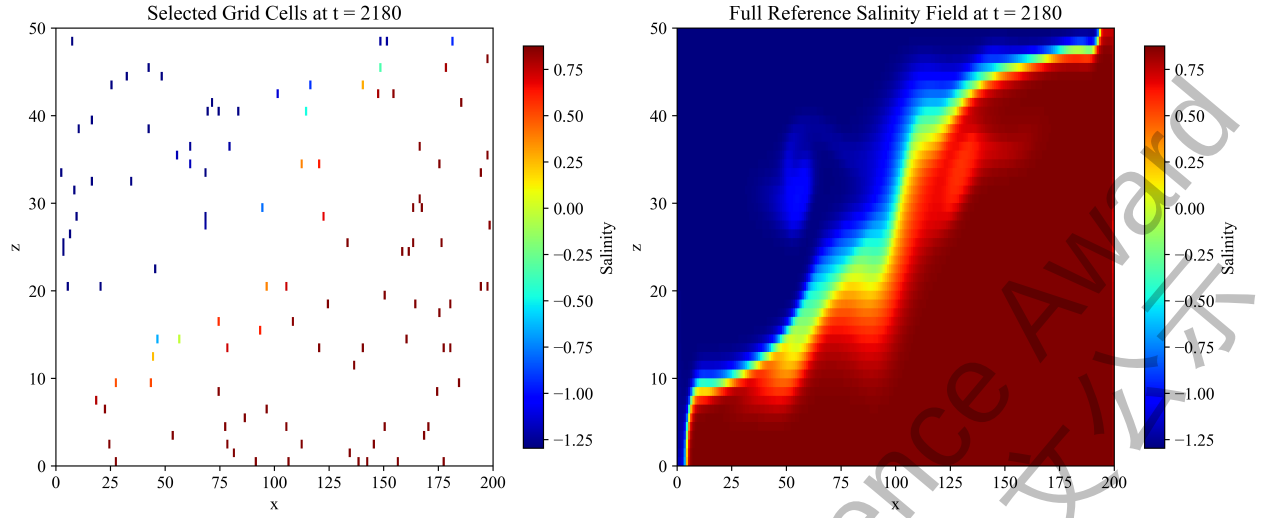


图 10. 左侧显示用于训练的选定数据点，右侧显示时间为 2180 时的参考完整数据集。

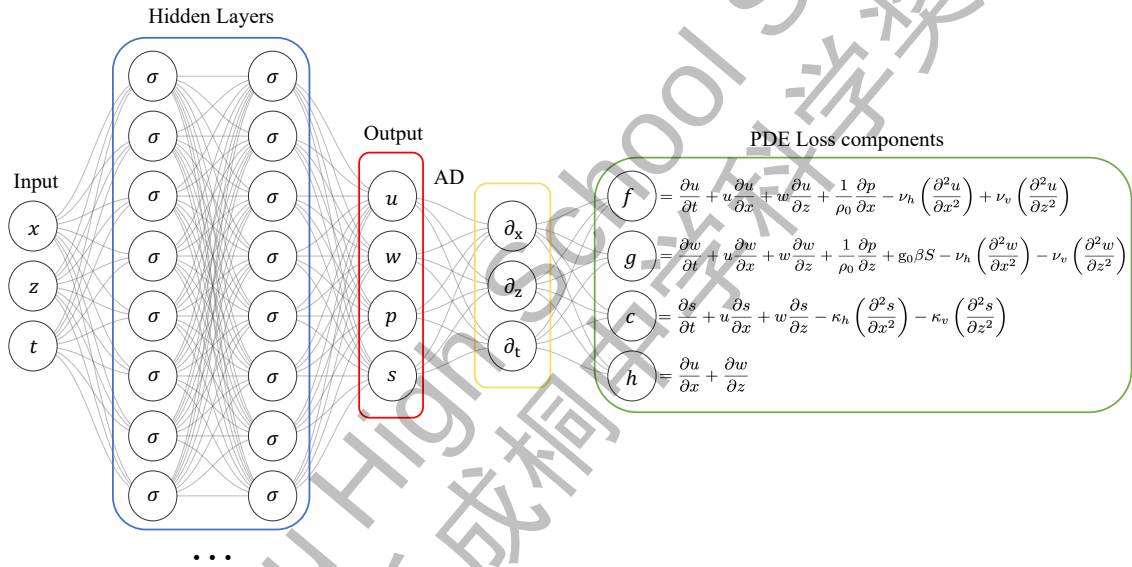


图 11. *PINN-LOCK* 的部分架构：包括前馈神经网络（feed-forward NN）的输入、隐藏层及其激活函数、输出层，以及用于计算偏导数的自动微分和用于物理约束的 PDE 残差计算。

该网络架构 (图 11) 从输入层开始，将三维坐标空间的输入线性映射到可配置的隐藏维度 (128 个神经元)。初始层采用高斯误差线性单元 (GELU) 激活函数，以保证梯度计算的平滑可微性，这是精确计算残差的关键。六个隐藏层均使用双曲正切 (tanh) 激活函数。最终输出层包含四个神经元，分别对应水平速度 u 、垂向速度 w 、压力 p 以及盐度 s 。

输入坐标经过系统归一化处理，范围映射至 $[-1, 1]$ ，依据实验区域边界进行标准化。水平域为 $[0, 99.5]$ ，对应实验装置的宽度；垂直域为 $[0, 19.57]$ ，覆盖实验装置的完整高度。时间域为 $[0, 3000]$ ，涵盖完整的密度流演化过程。人工定义的物理参数包括 $\nu_h = 0.025 \text{ m}^2/\text{s}$ 、 $\nu_v = 0.016 \text{ m}^2/\text{s}$ ，以及 $\rho = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$ 。

5.3.2 自动微分

自动微分 (Automatic Differentiation, AD) 在传统数值方法与符号方法之间取得平衡。它通过对基本运算和函数应用链式法则，能够计算达到机器精度的导数，从而避免舍入误差或截断误差 (*Automatic Differentiation (AutoDiff): A Brief Intro with Examples* 2022)。如图11所示，我们的

PINN 架构集成了基于 PyTorch 计算图 (computational graph) 的自动微分系统, 用于计算控制方程所需的所有偏导数。这些导数被进一步用于计算 PDE 残差项的各个分量。

5.3.3 优化策略

训练过程中采用 L-BFGS 优化器, 并结合强 Wolfe 线搜索 (strong Wolfe line search) 以实现高效收敛。训练共进行 500 个迭代周期 (epochs)。

5.4 PINN-LOCK 损失函数

5.4.1 物理约束损失

PINN-LOCK 模型中的物理约束通过偏微分方程残差来实现, 其计算公式为:

$$L_{PDE} = MSE(f, 0) + MSE(g, 0) + MSE(h, 0) + MSE(c, 0) \quad (34)$$

这些残差在前向传播过程中通过自动微分计算得到。均方误差 (MSE) 操作保证残差趋于零, 从而将 Navier-Stokes 方程的物理约束直接嵌入优化过程中。经多次测试, 我们最终将该损失项的权重系数设为 1, 以在与其他损失项的权衡下无需额外的插值点即可保持物理约束。

图12可以看到模型在接近第 50 次迭代周期就接近收敛。

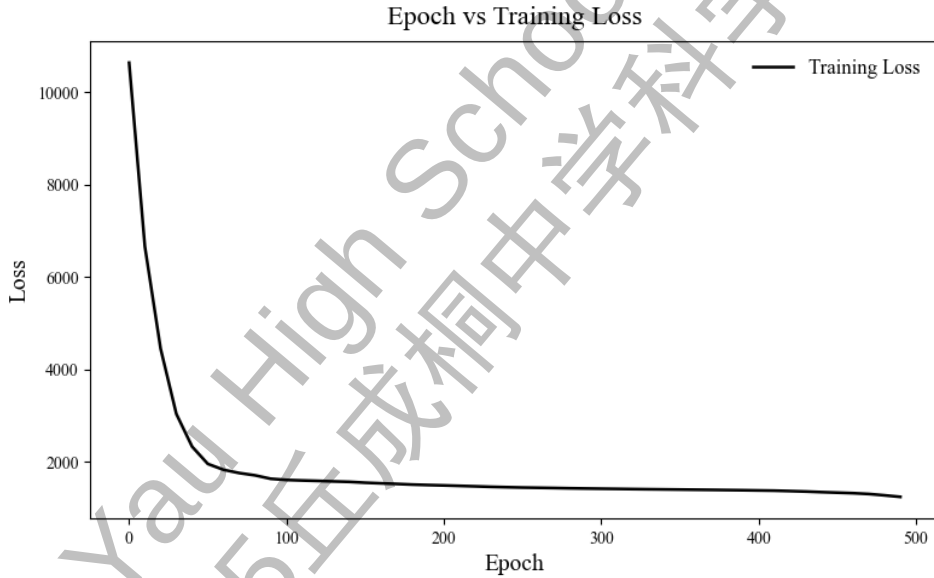


图 12. 每个迭代周期的训练损失变化情况

5.4.2 数据损失

我们利用第三部分数值模拟提供的稀疏数据作为训练基础, 涵盖水平速度 u 、垂向速度 w 、压力 p 以及盐度 s 。数据损失项 L_{data} 通过神经网络预测值与真实值 (ground truth) 之间的均方误差计算:

$$L_{data} = MSE(u, u_{pred}) + MSE(w, w_{pred}) + MSE(p, p_{pred}) + MSE(s, s_{pred}) \quad (35)$$

为了应对不同变量的量级差异, 经过多次测试, 我们对数据损失加权 2000, 从而在多目标优化中突出数据的重要性。这种方法使得即便只抽取 1% 的样本点, 也能够通过物理约束引导网络学习。

5.4.3 初始条件损失

初始条件在最早的时间步 $t = 0$ 强制施加，此时流动尚未开始，盐度分层完全分离。初始条件损失 L_{ic} 通过神经网络预测与预设初始值之间的均方误差计算：

$$L_{ic} = MSE(u, u_0) + MSE(w, w_0) + MSE(p, p_0) + MSE(s, s_0) \quad (36)$$

该数据驱动方法利用了模拟中明确的初始状态，类似于实验设置中已知的初始配置，无需额外测量。我们对其加权 10000，以保证严格遵循初始条件，从而确保模型能够捕捉浮力驱动的流动，并在整个模拟过程中保持时间稳定性。

5.4.4 边界条件损失

边界条件对应矩形域的不可穿透边界，在左右边界强制无水平流动，在上下边界强制无垂向流动。因此，边界条件损失 L_{bc} 将预测值在边界处与零的均方误差进行求和：

$$L_{bc} = MSE(u|_{x \leq 0}, 0) + MSE(u|_{x \geq 100}, 0) + MSE(w|_{z \leq 0}, 0) + MSE(w|_{z \geq 20}, 0) \quad (37)$$

该约束独立于观测数据，严格遵循 SUNTANS 模型中的无滑移条件。我们加权 500，与偏微分方程残差互补，防止出现非物理的穿透或滑移。

5.4.5 总损失

总损失整合了上述所有组成部分：

$$L = 2000L_{data} + L_{PDE} + 10000L_{ic} + 500L_{bc} \quad (38)$$

在完成损失计算后，模型将进行反向传播并更新参数，训练进行预设的迭代周期 (epochs)，如图12所示。最终模型是 500 个训练周期迭代的结果。

通过显式引入时间作为输入、对初始条件赋予高权重约束，并结合 PDE 残差的动态平衡，PINN-LOCK 在理论上能够抑制传统 PINNs 在长时间积分下的漂移问题，为非稳态演化的精确建模提供保证。

完整的 PINN-LOCK 流程参照图13。

5.5 结果分析

PINN-LOCK 模型的性能通过与 SUNTANS 数值模拟的参考解进行对比评估，主要关注速度大小、盐度和压力场。比较内容包括时间演化和空间分布，并通过定量误差指标评估预测精度。以下各图中的数值均已归一化处理。

5.5.1 时间演化

图14展示了在域内随机选取的代表点上，模型预测值与参考值随时间的变化对比，时间步总计 151 个，对应完整模拟时长 3000 步长。速度大小的预测（第一面板）显示，PINN-LOCK 预测值（红色）与参考值（蓝色）高度吻合。在浮力释放初期，速度快速上升的趋势被准确捕捉，但在约第 50 个时间步，湍流混合峰值处存在轻微低估。盐度分布（第二面板）呈现参考解中的明显阶梯界面，随时间演化逐渐扩散为平滑层。PINN 对这一过渡略作平滑处理，但整体保持高保真度，归一化偏差低于 0.1。压力场（第三面板）表现出受密度梯度驱动的振荡行为，PINN-LOCK 能够捕捉振幅和相位，但在后期时间步引入轻微负偏差，可能源于连续性约束残差的不平衡。

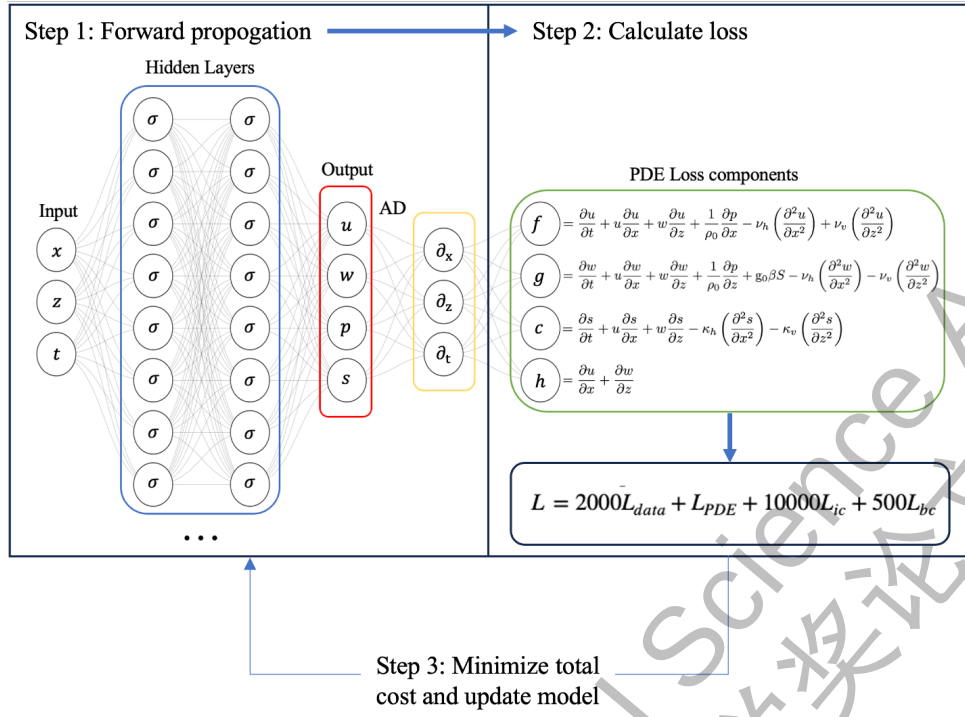


图 13. PINN-LOCK 的整体视图，包括总损失的计算过程和迭代。

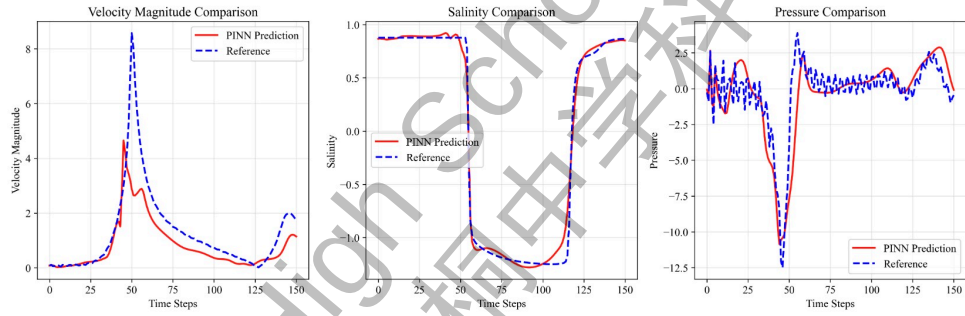


图 14. 预测值与参考值随时间的变化。

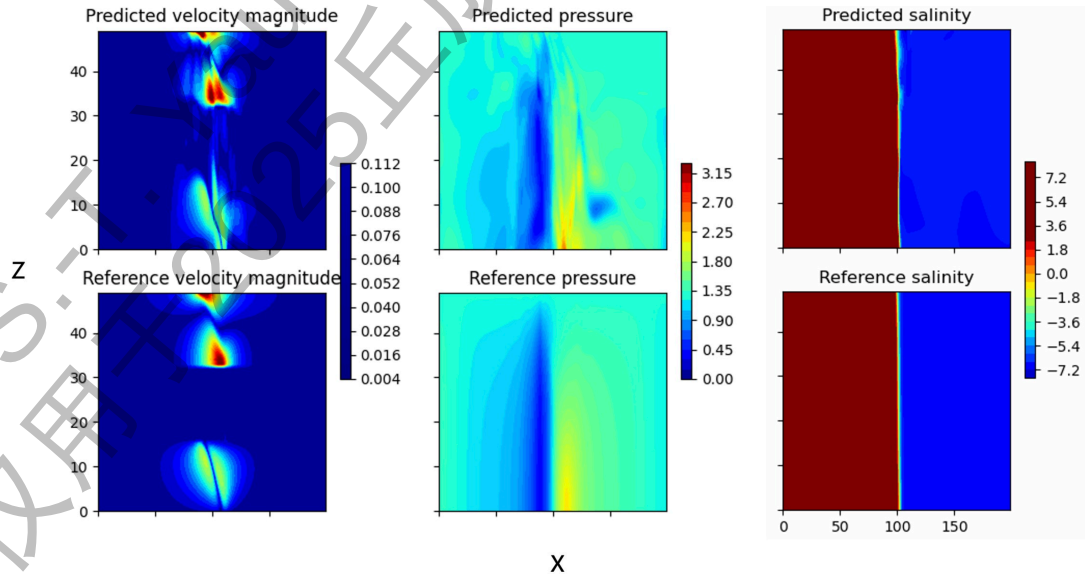


图 15. $t = 100$ 的空间可视化结果

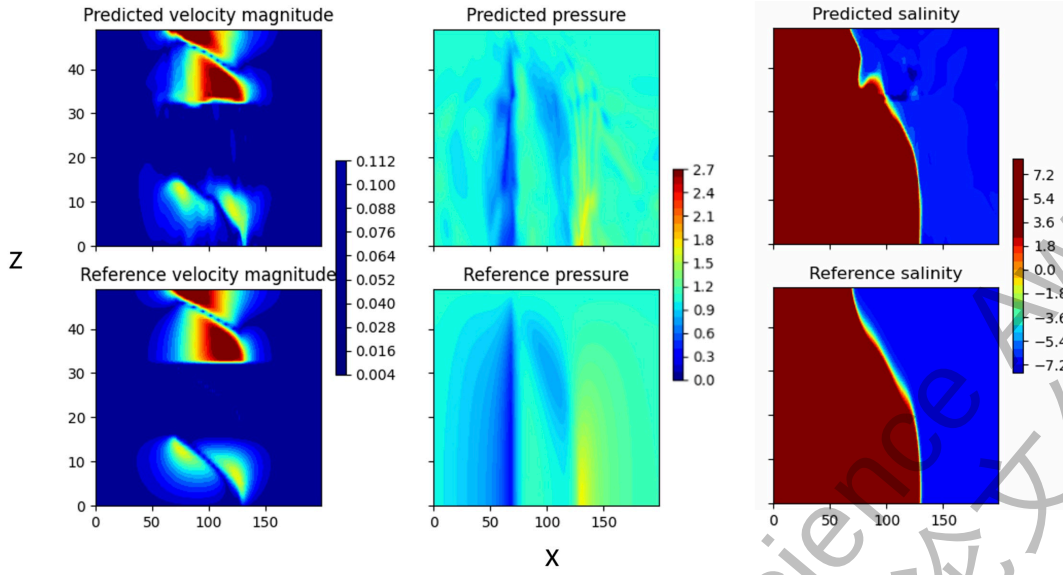


图 16. $t = 300$ 的空间可视化结果

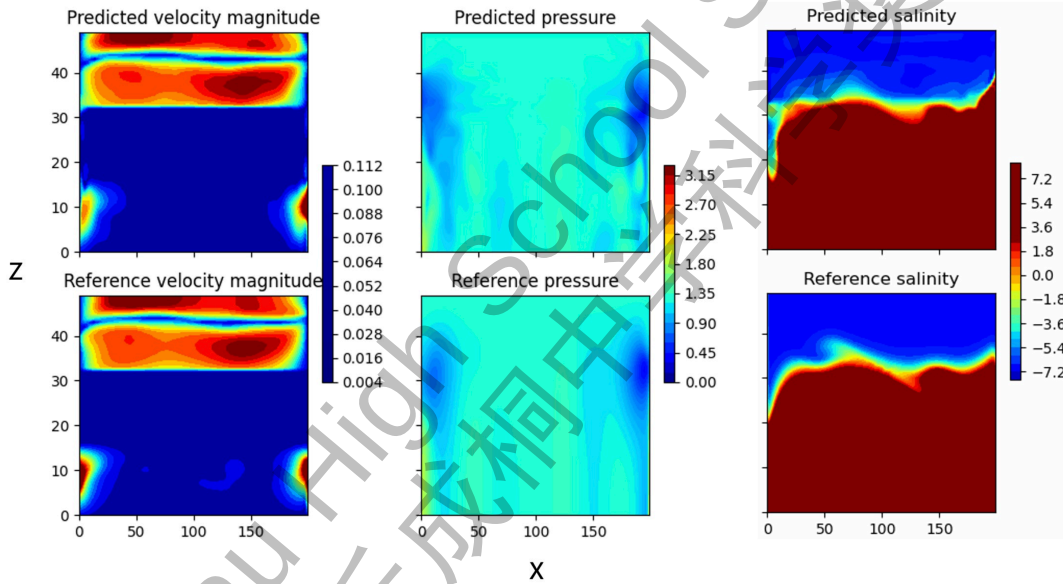


图 17. $t = 800$ 的空间可视化结果

5.5.2 空间分布

空间预测值在如图??所示的选定时间步上进行了从早期到晚期的可视化，将 *PINN-LOCK* 模型的输出（上行）与参考解（下行）进行对比，包括速度大小、压力和盐度在二维域内（水平 x 从 0 到 200，垂直 z 从 0 到 50）的归一化分布。在 $t = 100$ 的早期阶段，参考解中显示了局部流柱结构，而 *PINN-LOCK* 能够复现核心结构，可是边缘略有扩散。这可能是由于模型中嵌入的粘性效应所致。压力梯度与参考解所示的高度一致，形成中央偶极结构，而盐度保持了明显的分界面。到中期 $t = 300$ 的演化，参考场表现出更加复杂的结构，包括涡流卷曲和混合入侵，*PINN-LOCK* 能够捕捉这些特征，但速度分量的叶状结构略显拉长，表明存在轻微误差。晚期 $t = 800$ 的分布显示盐度形成分层结构且速度衰减，*PINN-LOCK* 的预测仍保持物理合理性。总体而言，空间误差主要集中在仅仅在界面附近，体现了 PINN 在物理约束插值中的优势。

5.5.3 定量评估

误差分析使用均方根误差（Root Mean Squared Error, RMSE）和决定系数（ R^2 ）在验证点上评估模型性能，如图 8 所示。在第 500 个训练周期时，模型的 R^2 分数分别为：水平速度 u 为

0.983, 垂直速度 w 为 0.925, 压力 p 为 0.724, 盐度 s 为 0.992, 表明模型能够很好地拟合大部分物理变量。对应的 RMSE 值分别为 0.130、0.274、0.525 和 0.089, 其中盐度的预测精度最高, 这归因于其扩散特性使得空间变化相对平缓。压强场的拟合相对困难 ($R^2 = 0.724$), 主要由于压强梯度对边界条件的敏感性, 以及对含有压强项的控制方程的缺失。

这些指标基于仅 1.3 % 的数据采样获得, 充分展现了模型的鲁棒性和泛化能力。而我们对隐藏层数量 (4–8 层) 和数据采样比例 (0.5–2%) 的敏感性测试表明, 物理约束损失对模型精度起主导作用。经过充分训练后, 速度分量的预测误差已稳定在较低水平。与纯数据驱动插值方法相比, PINNs 在稀疏数据条件下的预测误差显著降低, 验证了其在浮力驱动流动模拟中的有效性。

5.5.4 PINN-LOCK 与 ANN 模型的对比

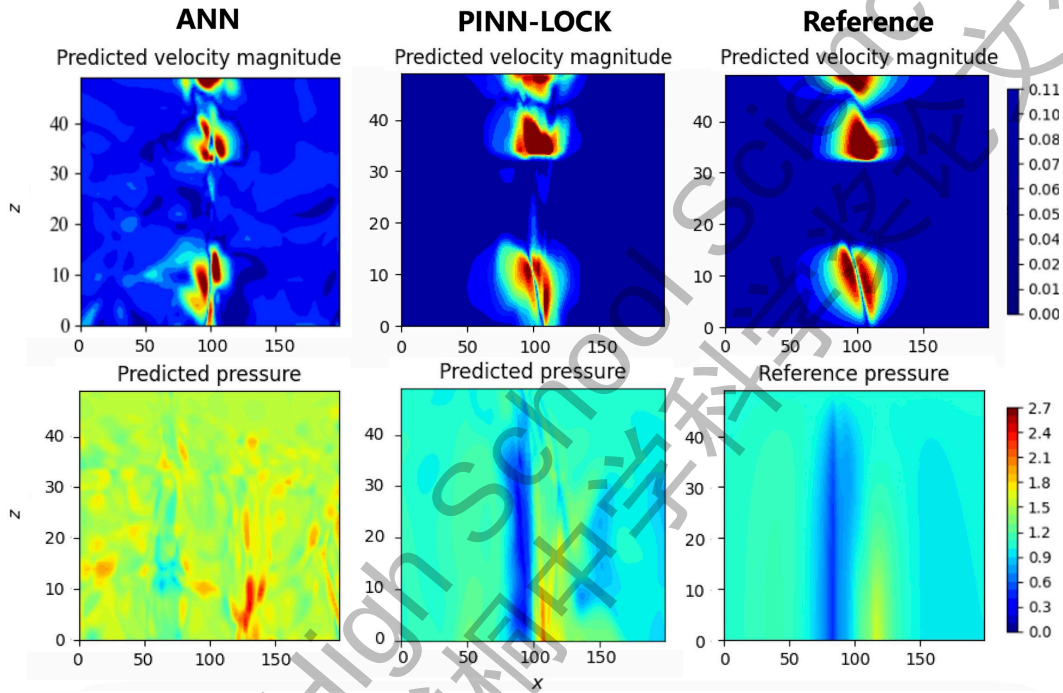


图 18. ANN 与 *PINN-LOCK* 在速度与压力预测上的对比

为验证物理约束在模型性能中的作用, 我们将 *PINN-LOCK* 与无物理约束的常规人工神经网络 (ANN) 进行对比, 如图 ?? 所示。图中分别展示了速度大小与压力场的预测结果, 并与参考解 (SUNTANS 模拟结果) 进行对照。在速度场的预测中, ANN 的结果 (左列) 表现出明显的噪声特征, 速度结构边界模糊且存在非物理震荡。尤其在上升流和下降流交界处, ANN 无法准确捕捉剪切层的位置与形态。而 *PINN-LOCK* (中列) 能够清晰地重构出两个速度高值区域, 与参考解高度一致, 仅在边缘处出现轻微的平滑扩散。由此可见, 引入连续性与动量守恒方程的约束, 有效地抑制了数据稀疏带来的高频误差。在压力场预测方面, ANN 的结果几乎无法呈现出正确的偶极分布, 存在大量高频噪声, 难以体现流体运动中的主导压力梯度。相较之下, *PINN-LOCK* 的压力场分布与参考场一致, 能够准确捕捉中央低压区和两侧对称的高压区域, 证明其在捕捉全局平衡特征方面的优势。总体来看, ANN 主要依赖数据拟合, 难以泛化到物理规律未显式覆盖的区域; 而 *PINN-LOCK* 通过物理约束实现了“数据—方程”的双重约束, 从而在有限样本下仍保持物理一致性与高精度。此结果进一步说明, 在流体动力学等受控制方程强约束的任务中, PINN 模型在稳定性与泛化性上均优于传统 ANN。

6 结论与展望

6.1 结论

本研究以密度流这一典型的“自身驱动”流体现象为研究对象，通过物理实验、理论解析、数值模拟与 PINNs 的有机结合，成功构建了 *PINN-LOCK* 一个兼顾物理机理与数据驱动优势的智能模型，为密度差驱动的非稳态运动行为提供了高效、可靠的预测解决方案（图 16）。

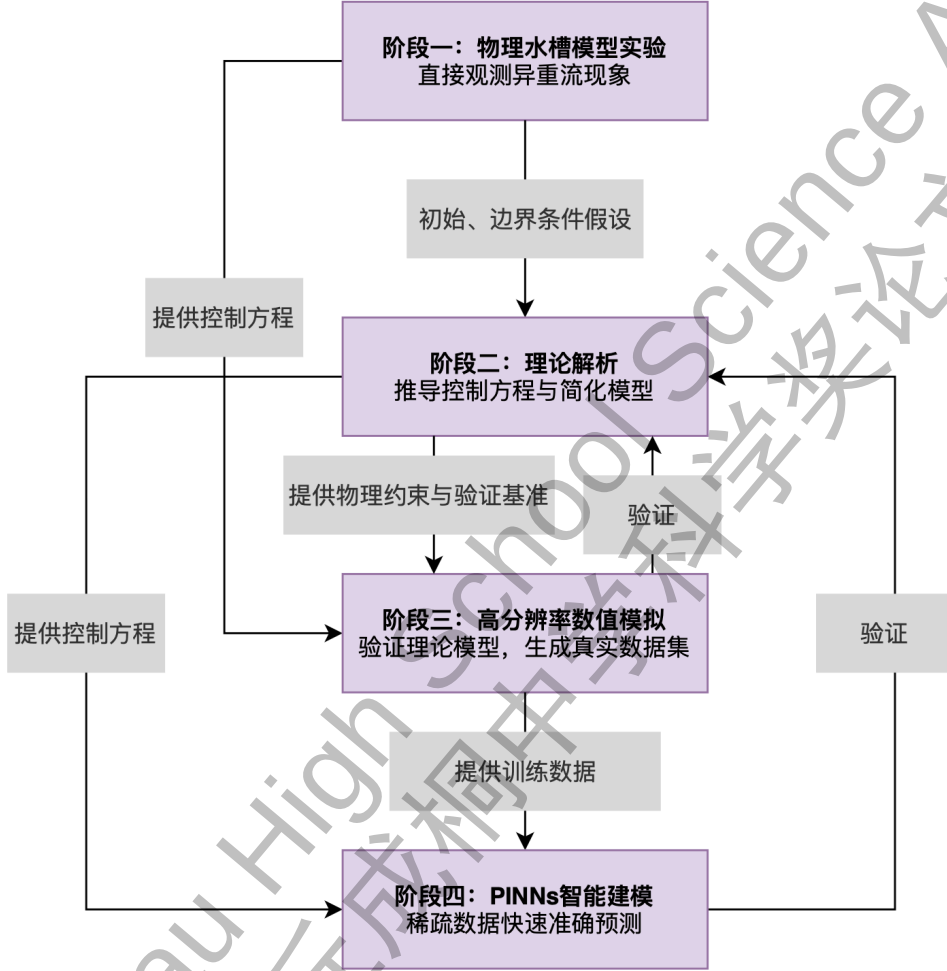


图 19. 融合多方法的 *PINN-LOCK* 密度流研究框架。

Benjamin (1968) 给出重力流前锋运动速度 $U_f \propto \sqrt{g'h}$ 这一经典的理论尺度，但受初始条件、边界效应和湍流掺混影响显著，密度流三维结构复杂，实验难以全面捕捉，高分辨率数值模拟成本高昂。本研究通过求解 Lock-exchange 密度流的理论解，确定了密度差为驱动密度流演化的关键物理因素。基于该理论分析，将完整的 Navier-Stokes 方程合理简化为两层浅水方程模型。进一步采用 SUNTANS 数值模型，成功实现了对 Lock-exchange 密度流演化过程的高精度模拟，准确捕捉到了驱动流与补偿流反向共存的空间结构，以及界面不稳定、涡旋生成和湍流混合等细节。模型敏感性试验结果表明，密度流前锋运动速度与初始密度差的平方根呈显著函数关系，该结果与理论解析解高度一致，进一步验证了理论模型的合理性与模拟结果的可靠性。

在此基础上，为进一步提升模型的计算效率与通用性，本研究引入物理信息神经网络 (PINNs) 作为智能代理建模工具。通过将 SUNTANS 产生的高分辨率流场数据作为训练数据，并将由理论推导简化的控制方程作为物理约束嵌入神经网络损失函数中，构建了针对密度流的 *PINN-LOCK* 模型，能够在保持关键物理机制的前提下，实现对密度流演化过程的快速预测。

6.2 展望

本研究仍存在若干局限性，未来工作可进一步探索以下几个方面：

- 实验部分：未来可以整合更多来源的实验数据（如借助粒子图像测速 PIV 提供的瞬态流场结构），以此训练 PINNs，提升模型的鲁棒性和泛化能力。
- 模型部分：当前的数值模型基于左右两侧流体体积相等的对称初始条件。为更全面理解 Lock-exchange 密度流的物理机制，一个重要的模型拓展是考虑初始流体体积比例的变化，将其作为一个新的控制参数，系统研究体积不对称性对前锋速度、混合情况及涡结构演化的影响。
- 本研究下一步计划将从当前的二维模型拓展至三维 (x, y, z) 数值模拟。二维假设无法解析的展向（ y 方向）流动不稳定性、涡丝拉伸与破碎等关键三维效应，将成为重点考察对象。
- 在 PINN-LOCK 框架中把密度差 $\Delta\rho$ 作为显式物理约束引入损失函数，可以预测不同密度差下的流场。
- 本研究建立的数值框架和理论分析方法具有较强的普适性，未来可应用于更多复杂流动问题。例如，在地球物理流体领域，可用于模拟海洋温盐环流的驱动机制，或研究大气逆温层的形成与演化；在环境流体力学中，也可以用于分析污染物或悬浮颗粒的输运与扩散规律。

参考文献

- Automatic Differentiation (AutoDiff): A Brief Intro with Examples* (2022). URL: <https://towardsdatascience.com/automatic-differentiation-autodiff-a-brief-intro-with-examples-3f3d257ffe3b/>.
- Benjamin, T. Brooke (1968). “Gravity currents and related phenomena”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 31.2, pp. 209–248. DOI: [10.1017/S0022112068000133](https://doi.org/10.1017/S0022112068000133).
- Buckley, M. W. et al. (2016). “Observations, inferences, and mechanisms of the Atlantic Meridional Overturning Circulation: A review”. In: *Reviews of Geophysics* 54. DOI: [10.1002/2015RG000493](https://doi.org/10.1002/2015RG000493).
- Cai, S. et al. (2021). “Physics-informed neural networks for heat transfer problems”. In: *Journal of Heat Transfer* 143.6, p. 060801. DOI: [10.1115/1.4050542](https://doi.org/10.1115/1.4050542).
- Cantero, M. I. et al. (2007). “On the front velocity of gravity currents”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 586, pp. 1–39. DOI: [10.1017/S0022112007005769](https://doi.org/10.1017/S0022112007005769).
- Cuomo, S. et al. (2022). “Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what’s next”. In: *Journal of Scientific Computing* 92.3, p. 88. DOI: [10.1007/s10915-022-01939-z](https://doi.org/10.1007/s10915-022-01939-z).
- Ellenson, A. et al. (2020). “A Study on Neural Network Applications in Fluid Dynamics”. In: *Journal of Computational Physics* 415, p. 109456.
- Farmer, D. M. et al. (1986). “Maximal two-layer exchange over a sill and through the combination of a sill and contraction with barotropic flow”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 164, pp. 53–76. DOI: [10.1017/S002211208600246X](https://doi.org/10.1017/S002211208600246X).
- Fringer, O. B. et al. (2006). “An unstructured-grid, finite-volume, nonhydrostatic, parallel coastal ocean simulator”. In: *Ocean Modelling* 14.3-4, pp. 139–173.
- Huppert, H. E. (2006). “Gravity currents: a personal perspective”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 554, pp. 299–322. DOI: [10.1017/S002211200600930X](https://doi.org/10.1017/S002211200600930X).
- Knauss, J. A. (1997). *Introduction to Physical Oceanography*. Waveland Press.
- Pedlosky, J. (1987). *Geophysical Fluid Dynamics*. Springer-Verlag.
- Raissi, M. et al. (2019). “Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations”. In: *Journal of Computational Physics* 378, pp. 686–707.
- Rottman, J. W. et al. (1983). “Gravity currents produced by instantaneous releases of a heavy fluid in a rectangular channel”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 135, pp. 95–110. DOI: [10.1017/S0022112083002979](https://doi.org/10.1017/S0022112083002979).
- Shin, J. O. et al. (2004). “Gravity currents produced by lock exchange”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 521, pp. 1–34. DOI: [10.1017/S002211200400165X](https://doi.org/10.1017/S002211200400165X).
- Simpson, J. E. (1987). *Gravity Currents in the Environment and the Laboratory*. Cambridge University Press.
- Sundar, D. et al. (2025). “Sequential learning based PINNs to overcome temporal domain complexities in unsteady flow past flapping wings”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 925, A35.
- Woods, J. D. (1968). “Wave-induced shear instability in the summer thermocline”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 32.4, pp. 791–800.

7 致谢

本研究是在华东师范大学葛建忠教授和我的物理老师姚艳婕老师的悉心指导下完成的。在选题初期，葛老师鼓励我在他的实验室中尝试不同的研究方向，这点燃了我对科学探索的热情。由于我对物理与计算机都抱有浓厚的兴趣，并在力学相关课程中表现突出，我自然而然地被计算流体力学所吸引，尤其是其与人工智能结合的前沿探索，这对我而言充满吸引力。

同时，我要感谢“英才计划”的导师华东师范大学杨彬教授。他是计算机数据科学领域的专家，由于我的研究有些物理和人工智能的交叉，因此在研究路线设计方面得到了杨老师的指导。杨老师指出 PINNs 与流体力学的结合是一个很有前景的研究领域，让我倍受鼓舞，在课题进行过程中，杨老师帮助我梳理了 PINNs 的研究意义。

在实验部分，Lock-exchange 实验操作相对基础。在此我要特别感谢父母为我提供支持，他们在淘宝上为我定制了亚克力水箱和其他实验材料；也感谢华东师范大学王艳娜老师提供实验室条件，让我顺利完成了水槽实验。在姚艳婕老师的指导下，我借鉴了中学物理课中测量盐水密度的方法，顺利完成了实验环节。

在理论研究方面，密度流的理论推导主要依靠我已有的物理知识，并在葛老师的指导下最终完成。同时，在葛老师的帮助下，我系统学习了数值方法在密度流动力学研究中的应用。为此，我自学了微积分和流体力学课程，并在暑期进入葛老师的实验室集中学习。尽管最初接触偏微分方程时颇感困难，但通过不断钻研，我逐步掌握了推导方法，这为后续熟练搭建 PINNs 模型打下了坚实基础。

我一直在学习人工智能中 Deep Learning 相关的基础知识，之前接触过 ANN 的基本应用为我快速进入 PINNs。PINNs 的构建还要感谢华东师范大学的周在杨老师，他在我构建 PINNs 模型时给予了许多具体指导，例如无量纲化方法、损失函数的设定等。最后的 PINNs 训练是在葛老师实验室的 GPU 高性能工作站完成。

最后，我衷心感谢在这段科研旅程中给予我帮助和支持的每一位老师、同学和家人。正是你们，让我的高中生活更加丰富多彩，也让我对科学探索怀揣着无限的憧憬与热情。

8 数据来源

本文研究工作中 SUNTANS 数值模型模拟的流场和密度场随时间变化的数据及 video、推导的 Benjamin 密度流理论求解 Matlab 代码, 作者开放于: <https://github.com/AidenSong0406/Lockexchange>。
PINN-LOCK 模型代码可根据合理需求向作者索取。

2025 S.-T. Yau High School Science Award
仅用于2025丘成桐中学科学奖论文公示