

基于无监督学习的变比热比气体界面预测模型^{*}

刘子岩, 方正豪, 许 亮*, 刘耀峰

(中国航空气动力技术研究院, 北京 100074)

摘 要: 可压缩多介质多组分流动是爆轰物理与冲击动力学等领域的关键科学问题, 涉及激波与物质界面相互作用、化学反应诱导的爆轰波传播等高度复杂的物理过程。利用机器学习求解多介质 Riemann 问题以精确反映界面耦合效应已成为当前爆炸力学与冲击动力学领域的研究热点。然而, 现有基于神经网络的 Riemann 求解器通常假设气体比热比为常数, 难以直接处理组分变化或高温引起的气体比热比变化问题。为此, 本研究提出一种基于物理约束的无监督神经网络模型。该模型在输入层引入了表征界面两侧介质比热比的参数, 有效解决了化学反应或高温条件下比热比随组分与温度变化的问题。并通过将物理方程信息嵌入损失函数, 构建了基于热完全气体状态方程的无监督学习框架。该模型被嵌入修正的虚拟流体锐界面方法中, 实现了与流体动力学求解程序的有效耦合。数值结果表明, 本模型兼具强泛化、高保真度与高效率: 泛化性方面, 模型构建了适用于多种气体介质的统一框架, 既可精准刻画变比热比效应, 也完全适用于常规两气体流动; 保真度方面, 模型预测结果与标准隐式方法高度吻合, 能够准确解析爆轰波传播等复杂流动结构; 效率方面, 模型彻底规避了界面预测的迭代过程, 计算速度优于传统隐式方法。

关键词: 可压缩多介质流动; 多组分问题; 多介质 Riemann 问题; 无监督神经网络; 虚拟流体方法

中图分类号: 0359

国标学科代码: 13025

文献标识码: A

Unsupervised learning-based model for predicting interfaces in variable specific heat ratio gas flows

LIU Ziyang, FANG Zhenghao, XU Liang*, LIU Yaofeng

(China Academy of Aerospace Aerodynamics, 100074, Beijing, China)

Abstract: Compressible multi-material and multi-species flows involving shock waves and chemical reactions are central to explosion mechanics and shock dynamics. Machine learning approaches for solving multi-material Riemann problems and capturing interface coupling effects have emerged as an active research area. However, existing neural network-based approaches generally assume calorically perfect gases with constant specific heat ratios, and are therefore incapable of handling variations in the specific heat ratio arising from compositional changes or from the excitation of molecular vibrational energy modes under high-temperature conditions. Such variations are frequently encountered in realistic detonation and reactive flow problems. To address this limitation, an unsupervised physics-constrained neural network model, termed PCNN-RS- γ , was proposed, which extended the previously developed Physics-Constrained Neural Network framework for multi-material Riemann Solvers (PCNN-RS) from calorically perfect gases to thermally perfect gases with variable specific heat ratios. Parameters characterizing the specific heat ratios on both sides of the material interface were incorporated into the input layer, enabling the model to effectively

*收稿日期: 2026-05-18; 修回日期: 2026-08-05;

基金项目: 国家自然科学基金(12572338); 稳定支持资助项目(800009000199B0042353)

第一作者: 刘子岩(1998—), 男, 博士研究生, 工程师. E-mail: lzy210@buaa.edu.cn;

通信作者: 许 亮(1982—), 男, 博士, 研究员. E-mail: xul@buaa.edu.cn。

account for variations induced by chemical reactions or by high-temperature vibrational excitation. The Rankine-Hugoniot jump conditions and the thermally perfect gas equation of state were embedded in the loss function, thereby establishing an unsupervised learning framework requiring no labeled training data. The trained model was further integrated into the modified ghost fluid method (MGFM), enabling effective coupling with computational fluid dynamics solvers for multi-species reactive flow simulations. Comprehensive numerical experiments demonstrate that the proposed model exhibits strong generalization capability, high fidelity, and high computational efficiency. In terms of generalization, the model establishes a unified framework applicable to various gaseous material with specific heat ratios ranging from 1.2 to 1.7, accurately capturing variable specific heat ratio effects while remaining fully applicable to conventional two-gas flows with constant specific heat ratios. In terms of fidelity, the predictions of the model agree closely with those of standard implicit iterative methods, and the model faithfully resolves complex flow structures such as detonation waves and shock-bubble interactions involving chemical reactions. In terms of efficiency, the model eliminates the need for iterative interface prediction, and its computational cost is significantly lower than that of traditional implicit iterative approaches. These results indicate that the proposed model provides a reliable and efficient numerical tool for multi-species reactive flow simulations with variable specific heat ratio effects in explosion mechanics and shock dynamics.

Keywords: Compressible multi-material flow; Multi-species problem; Multi-material Riemann problem; Unsupervised neural network model; Ghost fluid method

0 引言

爆轰波及激波诱导的可压缩多介质流动，是爆炸与冲击动力学领域的核心问题。这类流动广泛存在于爆炸驱动、燃料爆轰等工程实际中，其本质是伴随剧烈化学反应的强间断多相流，物理机制高度复杂^[1]。深入理解此类问题，关键在于精确刻画爆轰波传播及其与物质界面的相互作用。然而，这面临双重挑战：其一，在流动层面，需清晰捕捉激波、接触间断等多重波系结构与物质界面的耦合演化；其二，在物理化学层面，燃烧反应导致气体组分与物性（如比热容）持续变化，产生显著的热力学非平衡效应，因此必须构建能描述实际气体行为的本构模型。发展能够克服上述挑战的高保真数值模拟方法，已成为揭示相关现象内在机制的重要途径。

求解多介质流动问题的主要难点之一，在于如何清晰、精确地捕捉物质界面的运动与变形^[2]。当前主流界面处理方法大致分为两类：一是将界面视为具有一定厚度的混合区域，该方法需构建能准确描述混合流体的控制方程^[3-4]；二是锐界面方法，即将界面处理为无厚度的几何面，其优势在于界面形态清晰，但需实时追踪界面位置^[5-6]，并在界面处为两侧流体施加精确的边界条件。虚拟流体方法是一种常用的锐界面处理方法，其早期版本主要适用于低压、低速的弱可压缩流动^[7]。直到 Liu 等^[8]提出了一种修正的虚拟流体方法（Modified Ghost Fluid Method, MGFM），通过在界面处构造并求解一维多介质 Riemann 问题，使其能够有效处理含激波等强可压缩流动结构，从而扩展了该方法的适用范围。

在精确求解多介质 Riemann 问题时，传统方法通常依赖于隐式迭代过程，导致计算成本高昂，尤其在复杂场景中更为突出^[9]。近年来，机器学习算法因其灵活有效的非线性问题求解能力在诸多领域得到了广泛应用^[10]，如流场模拟^[11]、爆炸与冲击问题建模^[12]等。基于神经网络的机器学习代理模型逐渐被引入 Riemann 问题求解，为突破传统数值方法的效率瓶颈提供了新途径。Magiera 等^[13]首次提出 Riemann 解神经网络，并使用物理约束损失函数或是增加物理解析层的方式使预测结果更精确；Ruggeri 等^[14]则借助神经网络预测真实流体与高能炸药的 Riemann 解，证实其与 Euler 方程结合时性能优于纯数据驱动的神经网络模型；Wang 与 Hickey^[15]发展了基于物理的 Riemann 求解器，在跨临界流动中实现了精度与效率的平衡；Xu 等^[16]进一步提出了物理约束神经网络多介质 Riemann 问题求

解器 (Physics-Constrained Neural Network as multi-material Riemann Solver, PCNN-RS)，通过无监督学习实现对多介质 Riemann 问题界面速度的高效求解，提升了神经网络模型的适用性与泛化能力。

尽管上述方法在单一比热比条件下表现优越，却难以直接推广至多组分、含化学反应的流动中。在超声速燃烧、爆轰等航空航天工程实际问题中，化学反应会引起介质组分及质量分数的实时变化，进而导致混合介质的比热比随之变化。在相关的 Riemann 问题神经网络代理模型研究中，气体通常用比热比恒定的量热完全气体 (Calorically Perfect Gas, CPG) 状态方程来描述。一旦考虑气体动力学中的高温效应，分子的振动能将被激发，其热力学性质与定比热比的情况完全不同。对于空气而言，当温度高于 800K 时，这种影响变得十分重要^[17]。因此需建立热完全气体 (Thermally Perfect Gas, TPG) 状态方程下的求解模型。

为此，本文提出了适用于含化学反应多介质多组分流动的无监督学习求解框架。基于热完全气体状态方程，首次构建了可变比热比的物理约束神经网络模型 PCNN-RS- γ 。该模型在数值模拟中，可根据由化学反应引起组分变化或温度变化实时更新的热物性参数，快速求解 Riemann 问题，最终实现对爆轰现象等复杂多相反应流动的高保真模拟。该模型同样适用于常规恒定比热比问题，并实现使用单一模型覆盖不同气体组合的多介质流动场景。

1 控制方程

包含 N 个组分的可压缩流动问题含化学反应二维 Euler 方程可以表示为如下形式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2] = \mathbf{S} \quad (1)$$

式中: $\mathbf{U} = [\rho Y_1, \dots, \rho Y_N, \rho u, \rho v, E]^T$, $\mathbf{F}_1 = [\rho u Y_1, \dots, \rho u Y_N, \rho u^2 + p, \rho uv, (E + p)u]^T$,

$\mathbf{F}_2 = [\rho v Y_1, \dots, \rho v Y_N, \rho uv, \rho v^2 + p, (E + p)v]^T$, $\mathbf{S} = [\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_N, 0, 0, 0]^T$ 。 ρ 、 p 、 u 和 v 分别表示流体的密

度、压力和 x 、 y 方向上的速度。 Y_i 表示第 i 种组分的质量分数且满足 $\sum_{i=1}^N Y_i = 1$ 。 E 表示单位体积流体

的总能，表达式为 $E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2)$ ， e 为单位质量流体的内能。 $\dot{\omega}_i$ 表示组分 i 的质量生成率。

当应用于含化学反应问题时，需给定一组包含 L 个化学反应的化学反应机制， $\dot{\omega}_i$ 的表达式为

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{k=1}^L (v_{ik}'' - v_{ik}') \left(K_{fk} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v_{jk}'} - K_{rk} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v_{jk}''} \right) \quad (2)$$

式中: W_i 表示组分 i 的摩尔质量。 v_{ik}' , v_{ik}'' 表示化学反应 k 中组分 i 的化学计量系数。 $[X_j]$ 表示组分 j

的摩尔浓度。 K_{fk} 和 K_{rk} 表示化学反应 k 的正向、逆向反应速率。这些系数均由具体的化学反应确定。

当应用于不含化学反应问题时，方程中的源项 $\mathbf{S}$ 为零向量。

Euler 方程组的完备还需要补充状态方程信息，完全气体状态方程的表达式为

$$p = (\gamma - 1) \rho e \quad (3)$$

式中:

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{c_p}{c_p - R} \quad (4)$$

式中： c_p 为定压比热比， c_v 为定容比热比， $R = \sum_{i=1}^N Y_i R_i$ 为混合气体的比气体常数。 $R_i = R_u / W_i$ 为组分 i 的比气体常数。 $R_u = 8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ 为通用气体常数。对于大部分可压缩多介质问题来说，常将比热比 γ 近似作为固定常数考虑，此时状态方程称为量热完全气体（CPG）状态方程。但在高温条件下，高温效应会触发分子的振动能，使其热力学性质与常温下的情况完全不同。高温下 c_p 、 c_v 受温度的影响不可忽视，由常数转变为关于温度 T 的函数，比热比 γ 也成为关于温度的函数。因此，在流场模拟的不同时空阶段，比热比是不固定的。考虑这一效应的完全气体状态方程称为热完全气体（TPG）状态方程。

2 多介质 Riemann 问题物理约束神经网络

2.1 多介质多组分 Riemann 问题

“多介质”是指由不掺混的多种介质构成的流动系统，本研究中只涉及气体介质。“多组分”则指这些介质本身可能包含多种成分，其热力学性质（如比热比）会随组分浓度与温度动态变化。本研究使用 MGFM 处理不掺混多介质流体界面处的相互作用，需要沿界面法线方向构造并求解一维多介质 Riemann 问题以定义界面条件。对于多介质多组分流动，其一维 Riemann 问题可以被表述为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad U|_{t=0} = \begin{cases} U_L, & x < x_0 \\ U_R, & x > x_0 \end{cases} \quad (5)$$

式中： $U = [\rho Y_1, \dots, \rho Y_N, \rho u, E]^T$ ， $F = [\rho u Y_1, \dots, \rho u Y_N, \rho u^2 + p, (E + p)u]^T$ ， $E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u^2$ 。 U_L 和 U_R

是界面 x_0 左右两侧的流体状态值。

求解 Riemann 问题对于正确描述界面间断而产生的波系至关重要。由于不考虑相变和表面张力，因此在界面处不会发生速度和压力跳跃，即 $[u] = 0$ ， $[p] = 0$ 。解的结构通常被两道激波或稀疏波和一个界面接触间断波划分为四个区域，如图 1 所示。图中的 I、IL、IR 分别指界面、界面左侧和界面右侧。界面左右两侧的组分种类和质量分数可以是不同的，但在激波和稀疏波两侧不会发生改变。

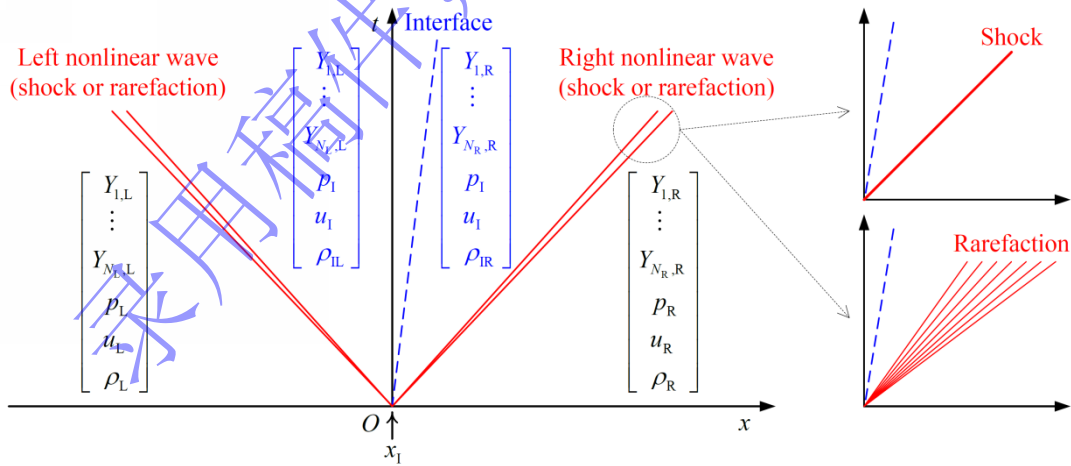


图 1 多介质多组分 Riemann 问题的解的结构^[18]

Fig. 1 Solution structure of the multi-material multi-species Riemann problem

两侧的组分系数 $[Y_{1,L}, \dots, Y_{N,L}]$ ， $[Y_{1,R}, \dots, Y_{N,R}]$ 和温度决定了两侧气体的比热比 γ_L 和 γ_R 。求解多介质 Riemann 问题的界面状态需要求解方程组^[19]

$$\begin{cases} u_L - u_1 = f_L(\gamma_L, p_L, \rho_L, p_1, \rho_{1L}) \\ u_1 - u_R = f_R(\gamma_R, p_R, \rho_R, p_1, \rho_{1R}) \end{cases} \quad (6)$$

式中： f 表示激波关系式和稀疏波关系式，对于热完全气体方程，

$$f_Q(\gamma_Q, p_Q, \rho_Q, p_1, \rho_{1Q}) = \begin{cases} \sqrt{(p_1 - p_Q) \left(\frac{1}{\rho_Q} - \frac{1}{\rho_{1Q}} \right)} & \text{if } p_1 \geq p_Q \\ \frac{\gamma_Q - 1}{2\gamma_Q} \left(\sqrt{\gamma_Q p_1 \rho_{1Q}} - \sqrt{\gamma_Q p_Q \rho_Q} \right) & \text{if } p_1 < p_Q \end{cases} \quad (7)$$

式中： Q 指代L或者R。精确求解比热比随温度、气体组分而变化的 Riemann 问题相比于定比热比的 Riemann 问题更为复杂，在求解界面压力的每一步迭代过程中还嵌套了迭代求解温度的过程，详细流程可参考文献[18]。

2.2 无监督物理约束神经网络

为克服 PCNN-RS 在处理变比热比问题时的局限性，本节提出其改进模型 PCNN-RS- γ 。后缀 γ 是指该模型是一个适用于变比热比情形的强泛化性网络模型。PCNN-RS- γ 的结构如图 2 所示。模型整体由基础神经网络架构和物理约束部分共同组成。

基础神经网络架构由输入层、隐藏层、输出层组成。图中蓝色框表示神经网络输入层，共有 7 个节点，分别为界面左右两侧的压力值 p_L 、 p_R ，密度值 ρ_L 、 ρ_R ，界面左右两侧的速度差 Δu 以及为求解多组分问题新增加的界面左右两侧的比热比 γ_L 、 γ_R 共 7 个量。图中黑色框表示神经网络隐藏层。在文献[20]中对隐藏层层数及每层节点数做过对比研究，结果反映出对于求解 Riemann 问题界面解共使用 2 个隐藏层，每个隐藏层使用 50 个神经元，即可满足要求。图中绿色框表示神经网络输出层，输出结果为界面压力 p_1 。对于其他三个界面量，界面速度 u_1 、界面密度 ρ_{1L} 、 ρ_{1R} 可由简单的计算公式得到。界面密度 ρ_{1Q} 的求解公式为

$$\rho_{1Q} = \begin{cases} \rho_Q \frac{(\gamma_Q + 1)p_1 + (\gamma_Q - 1)p_Q}{(\gamma_Q - 1)p_1 + (\gamma_Q + 1)p_Q} & \text{if } p_1 \geq p_Q \\ \rho_Q \left(\frac{p_1}{p_Q} \right)^{\frac{1}{\gamma_Q}} & \text{if } p_1 < p_Q \end{cases} \quad (8)$$

界面速度 u_1 的求解公式为

$$u_1 = \frac{1}{2}(f_R - f_L) + \frac{1}{2}(u_L + u_R) \quad (9)$$

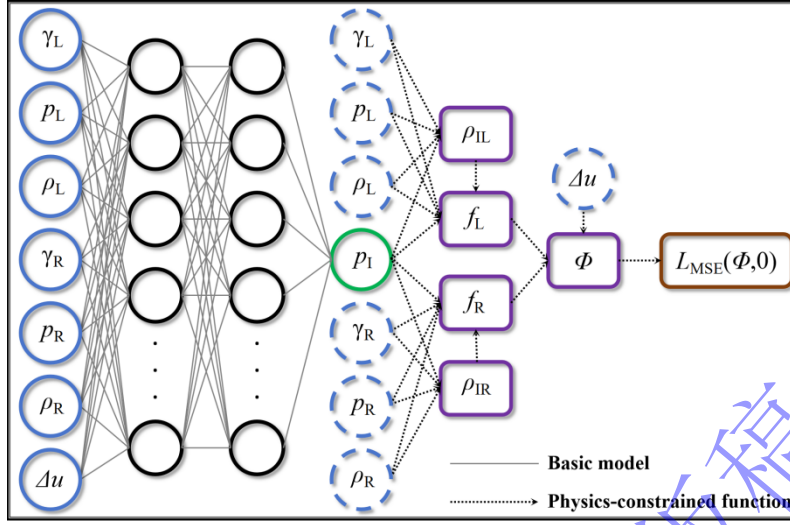


图2 无监督的 PCNN-RS- γ 模型示意图

Fig. 2 Sketch of the PCNN-RS- γ without labeled data

图中紫色框表示物理约束部分，这部分仅在神经网络训练过程中使用，不构成最终模型的一部分，因此使用虚线连接。物理约束的构建同时也需要输入量，在图中用蓝色虚线框表示。物理约束原理为将求解 Riemann 问题所需方程信息构建到损失函数中。由式(6)消元去掉界面速度 u_1 ，由式(8)计算得到 ρ_Q ，那么物理约束函数在初始状态给定后只与界面压力 p_I 相关，

$$\phi \equiv f_L(p_I) + f_R(p_I) + \Delta u = 0 \quad (10)$$

将物理约束函数加入到损失函数中参与训练，损失函数使用均方误差 (MSE) 损失函数。

在相关文献[13、14、15、16、20、21]中，比热比均作为定值参与网络训练，得到的神经网络模型只适用于一种特定的单介质或多介质问题。修改后比热比成为了参与训练的输入量，因此得到的神经网络模型可适用于不同比热比的多介质问题，进而可适用于考虑化学反应的多组分变比热比问题。

2.3 神经网络采样、训练及使用

本文涉及多组分含化学反应混合气体问题，气体的比热比 γ 的理论值为

$$\gamma = \frac{n+2}{n} \quad (11)$$

式中： n 为气体分子的自由度。在不考虑温度的影响下， γ 的取值随自由度 n 的上升而下降。具备最低自由度的气体分子为惰性气体分子，作为单原子分子只具备 3 个平动自由度， γ 取到最大值 1.667。对于两原子分子而言，由于增加了 2 个方向上的转动自由度， $n=5$ ， γ 取值为 1.4，例如主要由氧气和氮气组成的空气的比热比，在数值模拟中常取值为 1.4。对于更加复杂的分子结构，至多具备 6 个自由度，因此 γ 理论上取值最小为 1.33。实际情况中高温也会使 γ 值降低，例如对于火箭发动机的燃后气体的比热比，在工程计算中常取值为 1.25^[22]。综上考虑，建立无监督神经网络模型时，界面两侧流体比热比 γ 的采样范围设置为[1.2,1.7]。

对于两侧流体的压力、密度以及速度差，采用文献[20]提出的样本数据泛化增强方法，将其转化为无量纲量：以两侧压力之和 $p_0 = p_L + p_R$ 与密度之和 $\rho_0 = \rho_L + \rho_R$ 为参考量，令 $\bar{p} = p / p_0$ 、

$\bar{\rho} = \rho / \rho_0$ 、 $\Delta \bar{u} = \Delta u / \sqrt{p_0 / \rho_0}$ 。经此变换，无量纲压力与密度自动落在有界区间(0, 1)内，实际采

样取[0.001, 0.999], 可覆盖两侧压力比、密度比 1000 倍以内的工况; 无量纲速度差取[-10, 10], 按常规气体状态 ($\sqrt{p_0/\rho_0}$ 约 300 m/s) 对应实际速度差约[-3000 m/s, 3000 m/s], 可完整覆盖常见的计算工况。根据文献[20]中的定理, 变换前后问题的解仅相差同一组尺度因子, 故神经网络只需在上述有界无量纲范围内采用拉丁超立方采样获得训练样本, 即可适用于常见计算工况的实际问题。无监督神经网络模型生成样本时只需要生成样本特征值, 无需求解获得样本标签值。

在 Pytorch 框架下训练神经网络模型, 选用 Adam 优化器, 学习率设置为 0.001。本文使用的神经网络模型较为简洁, 只包含 2 个隐藏层, 每个隐藏层包含 50 个网络节点。一共训练 20000 个 epoch 以保证完全收敛。

神经网络模型模拟多组分流动的流程如图 3 所示。该图的左列说明了基于 Level Set-MGFM 的 CFD 程序模拟可压缩多介质多组分流动的一般过程。神经网络训练完成后, 模型可被直接应用于基于 Level Set-MGFM 的 CFD 程序中替代标准隐式迭代方法求解多介质 Riemann 问题, 并被设计为一个可选的计算模块。在不影响其原有功能的基础上, 可以方便地对 CFD 程序嵌入这种神经网络模型, 而不需要进行复杂的修改。

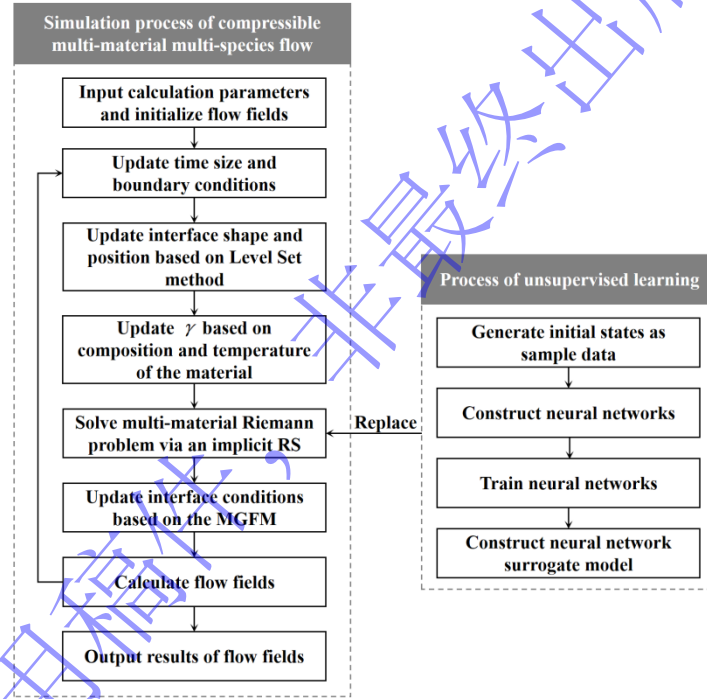


图 3 PCNN-RS- γ 应用于基于 Level Set-MGFM 的 CFD 程序流程图

Fig. 3 Flow chart of the PCNN-RS- γ applied to Level Set-MGFM-based algorithms for multi-material multi-species dynamic simulations

3 数值实验

本章节的第 3.1-3.2 节分别为对神经网络模型的精度测试和效率测试。后续的 3.3-3.5 节为数值模拟算例, CFD 程序使用 Level Set 方法捕捉界面位置, 使用 MGFM 方法定义界面条件, 分别使用标准隐式迭代方法和神经网络模型求解界面状态。使用 5 阶 WENO 格式进行空间离散, 使用 3 阶 Runge-Kutta 格式进行时间离散。

3.1 测试集误差

本节通过构建测试集的方式对 PCNN-RS- γ 模型进行测试。测试样本同样采用拉丁超立方采样生成, 两侧气体的比热比采样范围均为[1.2,1.7], 密度以及压力的采样范围均为[0.1,0.9], 速度的采样

与训练集中对速度差采样有所不同，对两侧气体速度分别采样，采样范围均为 $[-3.0, 3.0]$ 。共生成 12500 个测试样本，将其按波系结构的不同分为双稀疏波结构（RR）、稀疏波激波共存的结构（RS）以及双激波结构（SS）共三组分开测试，样本量分别为 4400、3319、4781。对三组样本进行 Bootstrap 重采样，分别重复 1000 次，每次从样本集中重抽样 2000 个样本，计算并统计神经网络预测解与精确解之间的平均绝对误差（Mean Absolute Error, MAE）、平均相对误差（Mean Relative Error, MRE）及其 95%置信区间，计算结果见表 1 和表 2。

表 1 测试集 MAE 及 95%置信区间

Table 1 MAE and 95% confidence Intervals on the Test set

	$p_l(\times 10^{-4})$	$u_l(\times 10^{-4})$	$\rho_{IL}(\times 10^{-4})$	$\rho_{IR}(\times 10^{-4})$
RR	6.361(6.049-6.672)	8.824(8.291-9.357)	7.054(6.646-7.461)	6.745(6.379-7.111)
RS	15.792(15.466-16.118)	8.831(8.321-9.340)	13.760(13.014-14.506)	13.145(12.440-13.850)
SS	49.298(46.565-52.031)	8.271(7.804-8.737)	16.077(15.306-16.847)	15.429(14.687-16.170)

表 2 测试集 MRE 及 95%置信区间

Table 2 MRE and 95% confidence Intervals on the Test set

	p_l	u_l	ρ_{IL}	ρ_{IR}
RR	0.558%(0.530%-0.589%)	0.349%(0.200%-0.662%)	0.388%(0.369%-0.412%)	0.388%(0.369%-0.408%)
RS	0.359%(0.345%-0.373%)	0.294%(0.179%-0.469%)	0.242%(0.232%-0.252%)	0.243%(0.234%-0.253%)
SS	0.276%(0.267%-0.285%)	0.328%(0.226%-0.503%)	0.155%(0.149%-0.160%)	0.151%(0.145%-0.156%)

表格中给出了每组测试样本的平均误差，同时在括号内给出了 95%置信区间（下限 - 上限）。其中界面压力 p_l 的预测值直接由神经网络模型计算得到，两个界面密度 ρ_{IL} 、 ρ_{IR} 以及界面速度 u_l 的预测值分别由式(8)、式(9)得到。分析表中结果，对于不同的波系结构，平均绝对百分比误差都在同一个量级上，误差较小。另外，双激波结构下的压力平均绝对误差相对来说较大，但误差也在 10^{-3} 的量级上，对数值模拟不会产生明显影响。

3.2 计算效率对比

通过构建循环迭代求解 Riemann 问题的方式对比传统隐式迭代 Riemann 求解器、Harten-Lax-van Leer-Contact (HLLC) 显式近似 Riemann 求解器与物理约束神经网络模型的计算效率，两侧的压力、密度均在 $\{0.001, 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.50, 0.60, 0.70, 0.80, 0.90, 0.999\}$ 中取值，两侧速度均在 $\{-5.0, -4.0, -3.0, -2.0, -1.0, 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0\}$ 中取值，两侧的比热比均在 $\{1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6\}$ 中取值。统计每种方法的求解总共用时，分别重复 5 次，取其平均值。统计结果见表 2 所示。

表 3 计算效率对比

Table 3 Comparison of computational cost

	Implicit-RS	HLLC-RS	PCNN-RS
第一次用时/s	147.984	3.844	44.438
第二次用时/s	147.969	3.844	43.672
第三次用时/s	149.109	3.969	50.187
第四次用时/s	147.891	3.828	43.859
第五次用时/s	147.422	3.922	43.844
平均用时/s	148.075	3.881	45.200

由表中数据可得，三种方法单次求解的平均耗时关系为：HLLC 方法最快，约为 PCNN-RS 的

1/10; PCNN-RS 次之, 约为隐式迭代方法的 1/3。这一结果与三类方法的构造特点相符: HLLC 属于无迭代的近似 Riemann 求解器, 计算量最小, 但其星区状态由波速估计完全确定, 估计方法选取不当将引起精度下降甚至非物理状态; PCNN-RS 以一次前向推断替代隐式迭代过程, 在保持对精确 Riemann 解直接逼近的同时, 将计算耗时降低了约 2/3, 且求解精度不依赖于波速估计等人为选取。需要指出的是, 当问题拓展至更复杂的状态方程, 如 JWL (Jones-Wilkins-Lee) 状态方程时, 隐式迭代过程的复杂度与计算开销均会显著增加; HLLC 类方法的波速估计亦将随之复杂化^[23]; 而神经网络前向推断的计算量与状态方程的具体形式基本无关, 仅取决于网络结构本身。因此, 随着状态方程复杂度的提升, PCNN-RS 在效率与精度综合权衡下的优势将进一步显现。

3.3 一维定比热比两气体 Riemann 问题

相关研究中的神经网络代理模型只适用于同一类型的问题, 对于不同的介质组合, 需要分别训练神经网络模型。本研究的神经网络模型突破了这种限制, 能够适用于多种气体介质流动问题。下面分别对一维空气-空气 Riemann 问题和一维空气-氮气多介质 Riemann 问题进行求解, 并给出与标准隐式迭代方法解、精确解的对比。在 $0 \leq x \leq 1$ 的计算域内共划分 1000 个计算网格。

一维空气-空气算例的无量纲初始条件为

$$(\gamma, \rho, u, p) = \begin{cases} (1.4, 1.0, -1.0, 1.0) & \text{for } x < 0.5 \\ (1.4, 1.4, 1.0, 1.0) & \text{for } x \geq 0.5 \end{cases} \quad (12)$$

计算结果如图 4 所示。

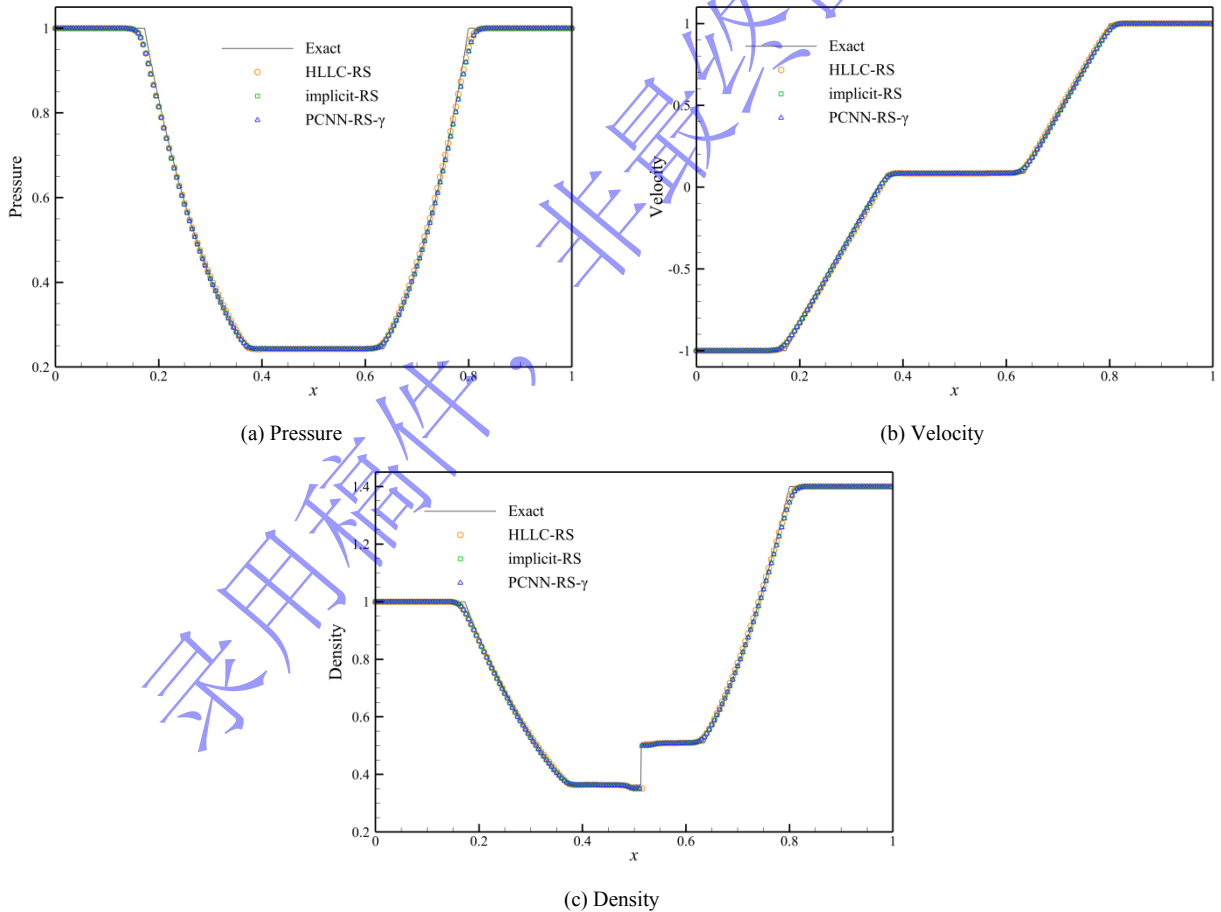


图 4 空气-空气算例 ($t=0.15$) 算例不同模型数值结果对比

Fig. 4 Comparison of numerical results of several models in air-air problem ($t=0.15$)

一维空气-氮气算例的无量纲初始条件为

$$(\gamma, \rho, u, p) = \begin{cases} (1.4, 1.0, -1.0, 1.0) & \text{for } x < 0.4 \\ (1.667, 1.0, 1.0, 10.0) & \text{for } x \geq 0.4 \end{cases} \quad (13)$$

计算结果如图 5 所示。

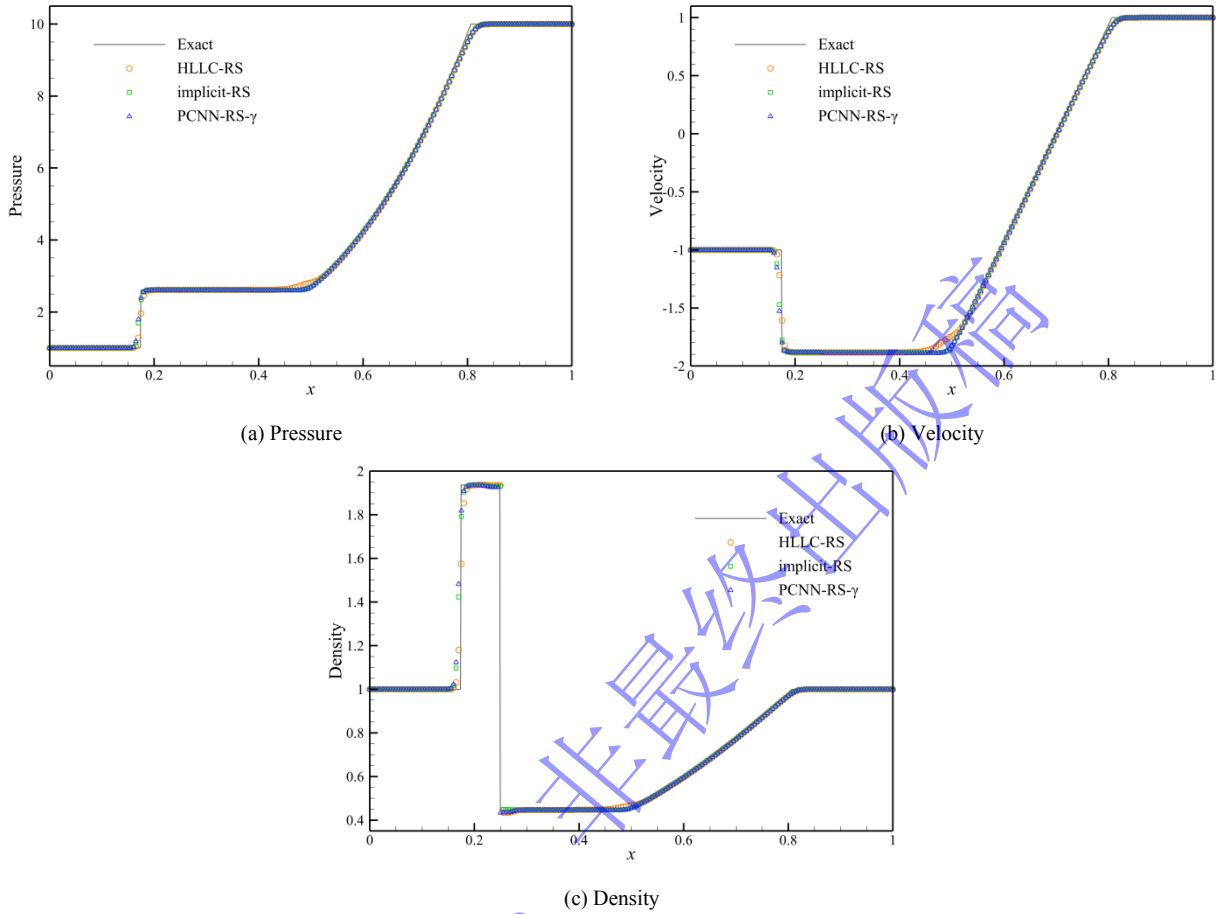


图 5 空气-氦气 ($t=0.08$) 算例不同模型数值结果对比

Fig. 5 Comparison of numerical results of several models in air-Helium problem ($t=0.08$)

分析以上两个一维算例结果，空气-空气算例形成了稀疏波-稀疏波结构，空气-氦气算例形成了激波-稀疏波结构。对于空气-空气算例，HLLC 方法在采用合适的波速估计时，其结果与隐式迭代方法、PCNN-RS 的结果较为贴合；但值得注意的是，该算例为稀疏波主导问题，文献[19]中的四种典型波速估计中有两种得到了负的星区压力并导致计算失败，仅有另外两种能够得到合理结果。这一现象源于 HLLC 的星区压力由波速估计 SL、SR 通过 Rankine-Hugoniot 关系显式确定，稀疏波主导时该代数估计可能失去物理意义，即求解结果对波速估计的选取极为敏感。对于空气-氦气算例，HLLC 方法的整体结构与精确解一致，但在稀疏波的波尾附近出现了可见误差，这是由于将其将稀疏波的连续结构简化为单道间断所产生的数值耗散。相比之下，PCNN-RS 对上述两个算例均取得了与标准隐式迭代方法几乎完全一致的计算精度，其求解过程不涉及波速估计等人为选取，也不存在近似求解器在稀疏波主导问题中的上述稳健性问题。此外，对于这两个不同介质类型的问题，本文使用同一个神经网络模型进行数值模拟，而在文献[20]中需要分别对这两类问题训练对应的神经网络模型。由此可见，本文提出的神经网络模型可处理不同气体组成的多介质 Riemann 问题，且求解精度与稳健性不依赖于问题类型，有效提高了模型的适用范围。

3.4 一维变比热比两气体 Riemann 问题

该一维问题用来说明应用于有着高温条件的问题时，PCNN-RS 模型的局限性以及 PCNN-RS- γ 模型的改进效果。与上一节的算例区别在于充分考虑了热完全气体状态方程下比热比受温度的影响。

模拟的同样为一维空气-氦气两气体问题，在常温下比热比分别为 1.4 和 1.667。为直观反映高温属性，本算例使用带量纲的数据。在 $0 \leq x \leq 1$ 的计算域内共划分 1000 个计算网格，两侧流体的初始条件分别为

$$(\rho, u, p) = \begin{cases} (1.225 \text{ kg/m}^3, 0.0 \text{ m/s}, 800 \text{ kPa}) & \text{for } x < 0.4 \\ (0.138 \text{ kg/m}^3, 0.0 \text{ m/s}, 100 \text{ kPa}) & \text{for } x \geq 0.4 \end{cases} \quad (14)$$

该问题并不会发生化学反应，但是因较高的温度会使比热比发生明显变化。首先给出基于热完全气体状态方程的精确解程序求解的温度解以及受温度影响的比热比变化情况，见图 6。求解时间为 $2.73 \times 10^{-8} \text{ s}$ 。

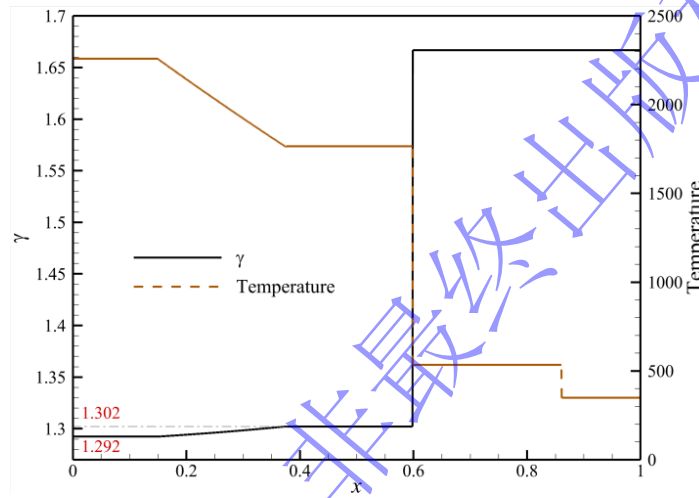
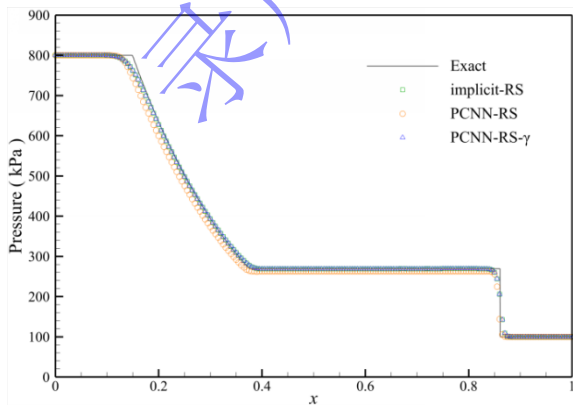


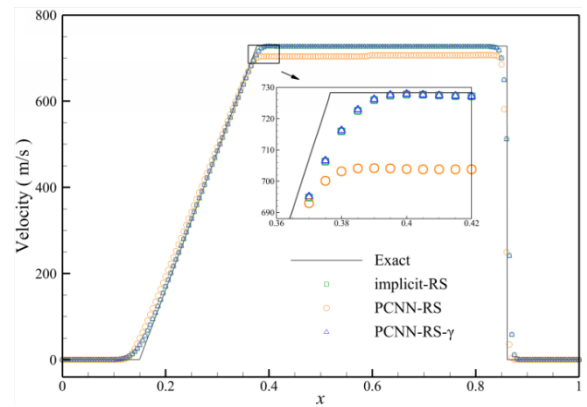
图 6 比热比受温度影响示意图

Fig. 6 Dependence of the specific heat ratio on temperature

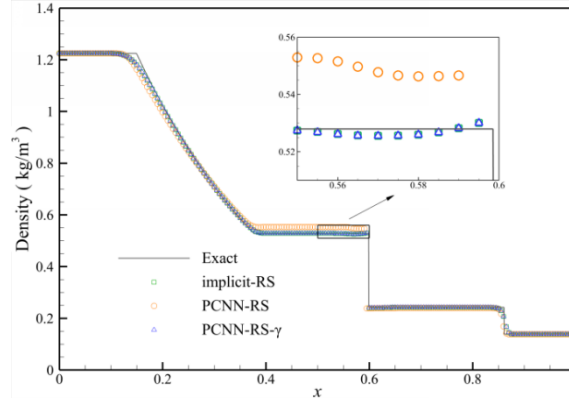
该算例左侧介质为空气，因为具备较高的初始压力值，有着 2000K 以上的高温。在高温的影响下空气的比热比发生了比较明显的变化，由 1.4 下降到 1.292-1.302 之间。右侧流体为氦气，为单原子分子，因不具备分子内部结构，定压比热 c_p 和定容比热 c_v 基本不受温度变化影响，因此比热比仍保持等于常数。图 7 中给出了 PCNN-RS、PCNN-RS- γ 、标准隐式迭代方法以及精确解之间的压力、速度、密度流场结果对比。



(a) Pressure



(b) Velocity



(c) Density

图 7 不同模型数值结果对比

Fig. 7 Comparison of numerical results of several models

由图中结果可以看出，PCNN-RS- γ 的计算结果与标准隐式迭代方法的结果十分接近，甚至在局部放大图上也很难看出明显的误差，与精确解之间也十分接近。而将比热比作为常数求解的 PCNN-RS 的计算结果能看出有着明显的求解误差，当应用于高维问题时，这种误差会被无限积累，出现数值不稳定以及非物理现象。本算例证明了本文构建的神经网络模型在求解含高温条件的算例有着更高的求解精度。

3.5 激波冲击化学反应气泡问题

本算例为二维激波诱导气泡问题，数值模拟了马赫数为 2.83 的激波冲击一个处于纯净氮气环境中的可燃混合气体气泡。该模拟旨在揭示气泡在激波作用下的形态演变过程，以及反应气体由此引发的爆轰现象，用于证明提出的神经网络模型 PCNN-RS- γ 能够适用于发生化学反应而导致组分发生变化的问题。混合气体的物质的量比例为 $H_2 : O_2 : Xe = 2 : 1 : 3.67$ 。氢氧燃烧机理总共涉及 19 个化学反应，式 (2) 中所需的反应参数见文献[24]。在 Level Set-MGFM 框架下分别使用标准隐式迭代方法和物理约束神经网络模型进行求解。初始流场在图 8 中给出，网格量设置为 1301×501 。两侧流体的无量纲初始条件为

$$(\rho, u, v, p) = \begin{cases} (4.273, 722.755, 0.0, 929.865) & \text{for } (x, y) \in \Omega(I) \\ (1.157, 0.0, 0.0, 101.325) & \text{for } (x, y) \in \Omega(II) \\ (3.258, 0.0, 0.0, 101.325) & \text{for } (x, y) \in \Omega(III) \end{cases} \quad (15)$$

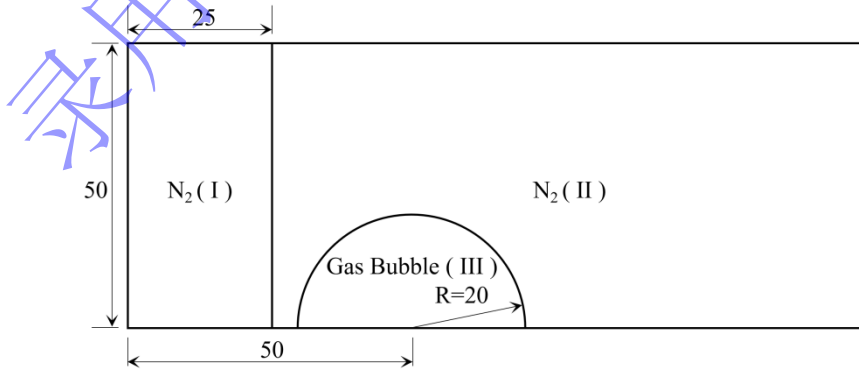


图 8 激波诱导气泡问题几何初场图

Fig. 8 Geometry used for a shock-bubble interaction

图 9 中展示的内容为流场纹影结果对比。入射激波到达气泡后产生透射激波和反射激波。同时，

Kelvin-Helmholtz 不稳定性发展。反应波以超声速通过气泡传播,使气泡进一步膨胀,同时还抑制了 Kelvin-Helmholtz 不稳定性的增长和涡核的形成,这与 Diegelmann 等[25]的数值研究类似。相比较而言,这些现象都是在传统的量热完全气体状态方程下无法捕捉到的。基于热完全气体状态方程的 PCNN-RS- γ 准确还原了这一过程,与标准隐式迭代方法相比没有明显误差。该算例证明了本文构建的神经网络模型适用于含化学反应过程的可压缩多相流动模拟,且在强激波与复杂物性耦合作用下仍保持高保真度和稳定性。

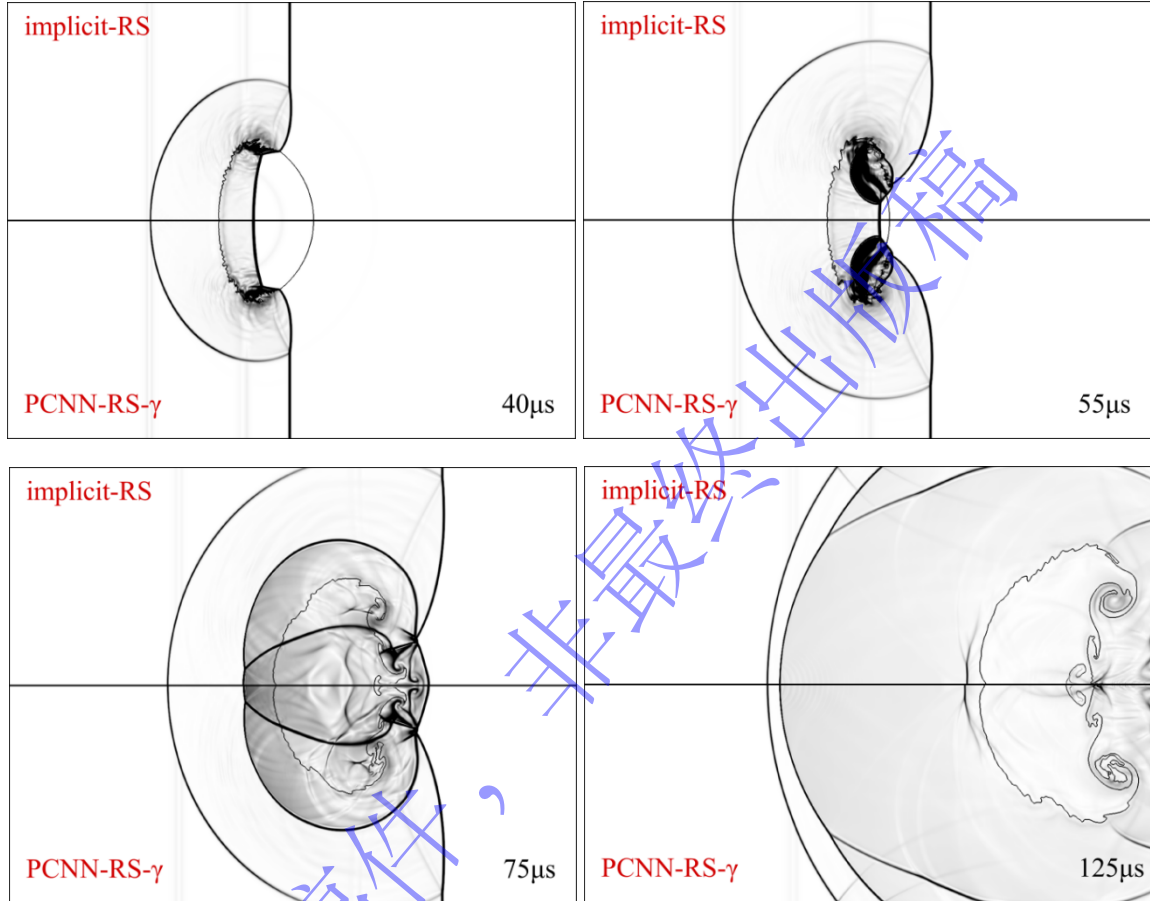


图 9 不同时刻密度纹影结果

Fig. 9 Density schlieren at different instants

图 10 中给出的是在 $50\text{--}60\text{ }\mu\text{s}$ 时刻的温度流场结果,图中的黑色实线框为气泡所在区域。在激波与气泡相互作用过程中,化学反应释放的能量显著改变了局部流场结构,可燃混合气体在激波聚焦点之前产生非常强烈的爆轰现象,高温气体瞬间膨胀充满了整个气泡,这与 Haehn 等人的实验结果^[26]较为吻合。PCNN-RS- γ 模型能较好地反映出这一现象,进一步证明了其应用价值。

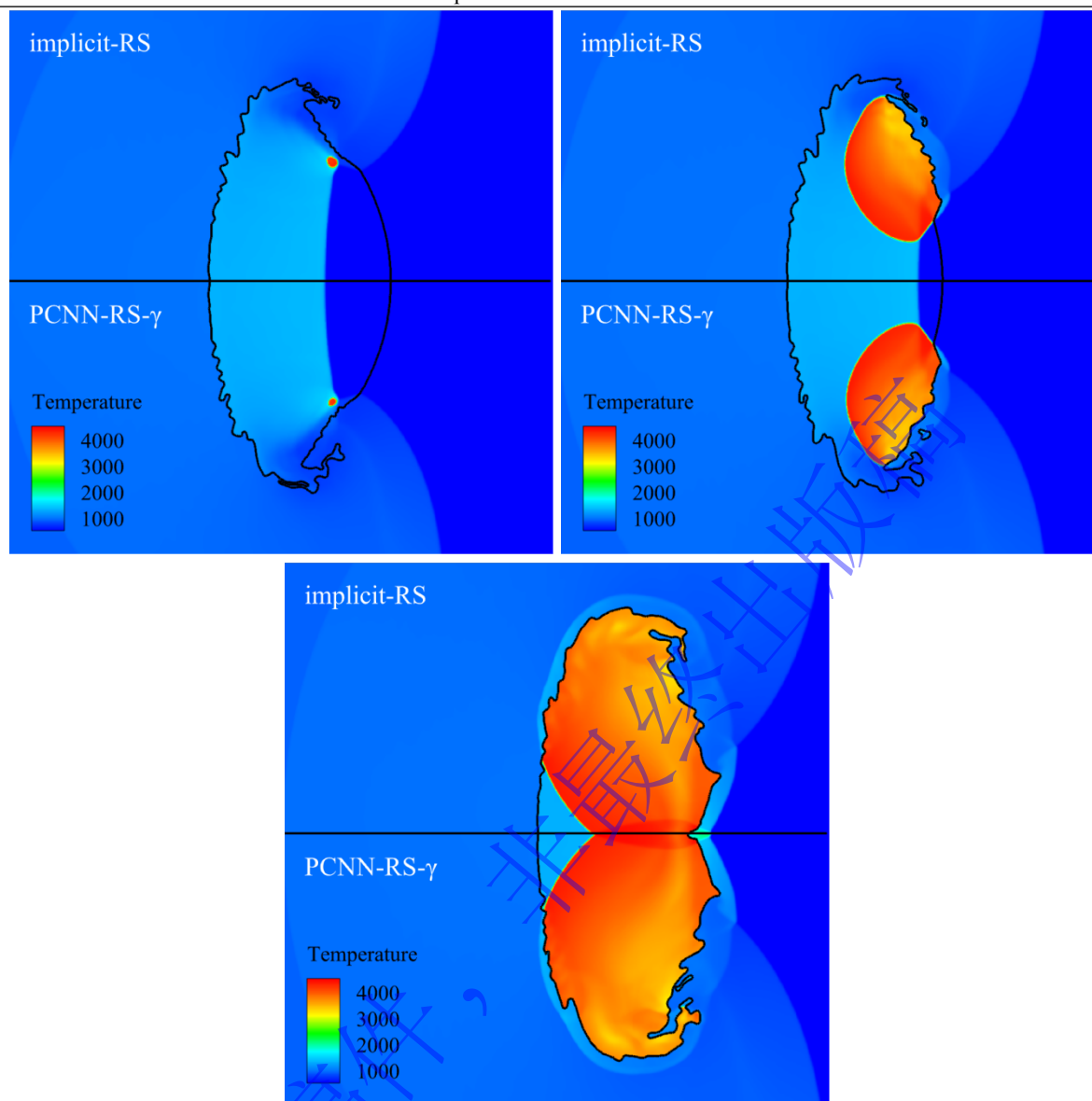


图 10 爆轰波产生时段温度流场对比

Fig. 10 Comparison of temperature fields during detonation wave initiation

以下是和文献[26]的实验结果的定量对比，对比的相同时刻下化学反应气泡的宽度，结果如图 11 所示。图中橙色三角形为文献中给出的实验测量结果，绿色方形为使用 PCNN-RS- γ 模型求解 Riemann 解的程序的数值结果，可见趋势走势是基本一致的，证明了方法的准确性。

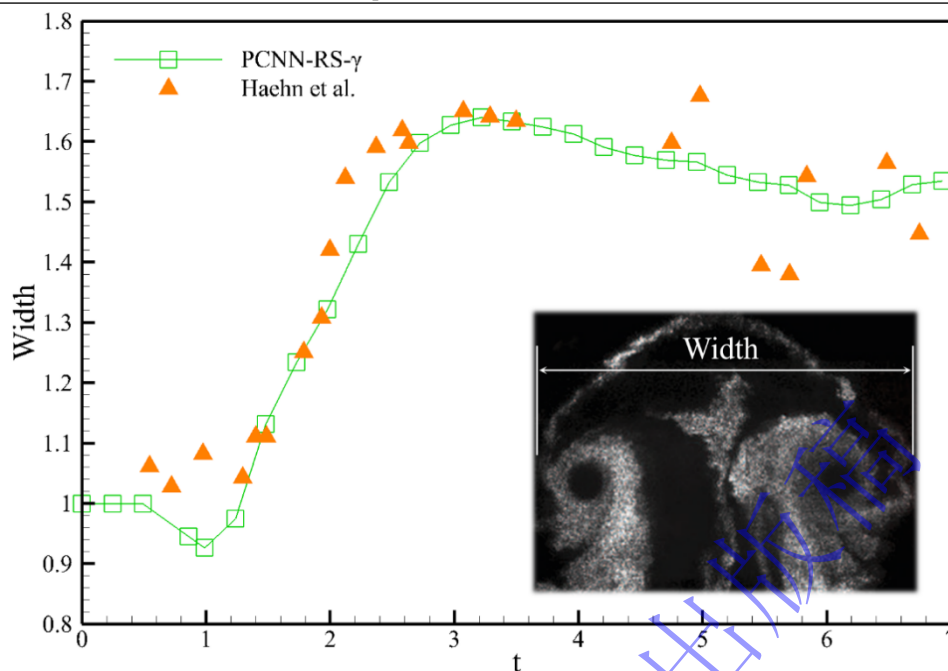


图 11 气泡宽度随时间发展变化对比

Fig. 11 Comparison of the temporal evolution of bubble width

4 结 论

本文基于无监督物理约束神经网络模型 PCNN-RS，提出了一种改进模型 PCNN-RS- γ ，能够适应不同气体类型与复杂热力学状态。主要归纳如下：

(1) 实现了多气体介质的统一建模：通过将介质比热比作为输入参数引入神经网络，克服了传统代理模型局限于单一气体类型的问题，使同一模型能够适用于多种气体介质流动，具有较强的泛化能力。

(2) 具备高保真度的复杂物理现象预测能力：模型通过引入量热完全气体效应，能够准确刻画真实气体在高温高压下的热力学非平衡行为，其预测结果与标准隐式迭代方法高度吻合，能够精确解析爆轰波传播、界面不稳定性演化等关键物理过程。

(3) 显著提升了数值计算的效率：由于彻底规避了传统方法中界面耦合的复杂迭代求解过程，本模型在保持高保真度的同时，大幅提升了计算速度，为涉及真实气体效应的工程问题提供了高效可靠的数值工具。

当前模型基于热完全气体状态方程，后续研究将致力于将该框架扩展至更一般的状态方程形式（如 Mie-Grüneisen 方程等），以进一步提升模型在超高压、强非理想热力学条件下的适用性。

参考文献

- [1] 韩文虎, 张博, 王成. 气相爆轰波起爆与传播机理研究进展[J]. 爆炸与冲击, 2021, 41(12): 65-96. DOI: 10.11883/bzycj-2021-0398.
HAN W H, ZHANG B, WANG C. Progress in studying mechanisms of initiation and propagation for gaseous detonations [J]. Explosion and Shock Waves, 2021, 41(12): 65-96. DOI: 10.11883/bzycj-2021-0398.
- [2] XU L, LIU T G. Ghost-fluid-based sharp interface methods for multi-material dynamics: A review[J]. Communications

- in Computational Physics, 2023, 34(3): 563-612. DOI: 10.4208/cicp.RE-2022-0189.
- [3] JENNY P, MULLER B, THOMANN H. Correction of conservative Euler solvers for gas mixtures[J]. Journal of Computational Physics, 1997, 132(1): 91-107. DOI: 10.1006/jcph.1996.5625.
- [4] COCCHI J, SAUREL R. A Riemann problem based method for the resolution of compressible multi-material flows[J]. Journal of Computational Physics, 1997, 137(2): 265-298. DOI: 10.1006/jcph.1997.5768.
- [5] KAWAKAMI K, KITA Y, YAMAMOTO Y. Front-tracking simulation of the wetting behavior of an impinging droplet using a relaxed impermeability condition and a generalized Navier boundary condition[J]. Computers and Fluids, 2023, 251: 105739. DOI: 10.1016/j.compfluid.2022.105739.
- [6] OSHER S, SETHIAN J A. Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations[J]. Journal of Computational Physics, 1988, 79(1): 12-49. DOI: 10.1016/0021-9991(88)90002-2.
- [7] FEDKIW R P, ASLAM T, MERRIMAN B, et al. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multi-material flows(the ghost fluid method)[J]. Journal of Computational Physics, 1999, 152(2): 457-492. DOI: 10.1006/jcph.1999.6236.
- [8] LIU T G, KHOO B C, YEO K S. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface[J]. Journal of Computational Physics, 2003, 190(2): 651-681. DOI: 10.1016/S0021-9991(03)00301-2.
- [9] MA W T, ZHAO X N, ISLAM S, et al. Efficient solution of bimaterial Riemann problems for compressible multi-material flow simulations[J]. Journal of Computational Physics, 2023, 493: 112474. DOI: 10.1016/j.jcp.2023.112474.
- [10] BRUNTON S L, NOACK B R, KOUMOUTSAKOS P. Machine learning for fluid Mechanics[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2020, 52: 477-508. DOI: 10.1146/annurev-fluid-010719-060214.
- [11] 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, 2020, 378: 686-707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- [12] 李秦超, 姚成宝, 程帅, 等. 神经网络状态方程在强爆炸冲击波数值模拟中的应用[J]. 爆炸与冲击, 2023, 43(4): 102-112. DOI: 10.11883/bzycj-2022-0222.
- LI Q C, YAO C B, CHENG S, et al. Application of the neural network equation of state in numerical simulation of intense blast wave[J]. Explosion and Shock Waves, 2023, 43(4): 102-112. DOI: 10.11883/bzycj-2022-0222.
- [13] MAGIERA J, RAY D, HESTHAVEN J S, et al. Constraint-aware neural networks for Riemann problems[J]. Journal of Computational Physics, 2020, 409: 109345. DOI: 10.1016/j.jcp.2020.109345.
- [14] RUGGERI M, ROY I, MUETERTHIES M J, et al., Neural-network-based Riemann solver for real fluids and high explosives; application to computational fluid dynamics[J]. Physics of Fluids, 2022, 34: 116121. DOI: 10.1063/5.0123466.
- [15] WANG J C, HICKEY J P. FluxNet: A physics-informed learning-based Riemann solver for transcritical flows with non-ideal thermodynamics[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2023, 411: 116070. DOI:

10.1016/j.cma.2023.116070.

- [16] XU L, LIU Z Y, FENG Y W, et al. Unsupervised neural-network solvers for multi-material Riemann problems[J]. *Computer Physics Communications*, 2025, 308: 109470. DOI: 10.1016/j.cpc.2024.109470.
- [17] BECCANTINI A, STUDER E. The reactive Riemann problem for thermally perfect gases at all combustion regimes[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2010, 64: 269 – 313. DOI: 10.1002/fld.2149.
- [18] XU L, YANG W B, LIU T G. An interface treatment for two-material multi-species flows involving thermally perfect gases with chemical reactions[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, 448: 110707. DOI: 10.1016/j.jcp.2021.110707.
- [19] TORO E F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction[M]. 3rd ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009: 151-162. DOI: 10.1007/b79761.
- [20] XU L, LIU Z Y, FENG Y W, et al. Physics-constrained neural networks as multi-material Riemann solvers for compressible two-gas simulations[J]. *Journal of Computational Science*, 2024, 78: 102261. DOI: 10.1016/j.jocs.2024.102261.
- [21] 刘子岩, 许亮. 嵌入物理约束的可压缩多介质流神经网络模型[J]. *计算物理*, 2023, 40(6): 761-769. DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.8670.
- LIU Z Y, XU L. Neural network models of compressible multi-medium flows embedded with physical constraints[J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2023, 40(6): 761-769. 10.19596/j.cnki.1001-246x.8670
- [22] 孙得川, 杨建文. 液体火箭发动机喷管仿真模型[J]. *火箭推进*, 2022, 48(2): 56-65.
- SUN D C, YANG J W. Nozzle simulation model of liquid rocket engine[J]. *Journal of Rocket Propulsion*, 2022, 48(2): 56-65.
- [23] HU X Y, ADAMS N A, IACCARINO G. On the HLLC Riemann solver for interface interaction in compressible multi-fluid flow[J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228: 6572-6589. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.06.002.
- [24] CONAIRE M Ó, CURRAN H J, SIMMIE J M, et al., A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation[J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2004, 36(11): 603–622. DOI: 10.1002/kin.20036.
- [25] DIEGELMANN F, TRITSCHLER V, HICKEL S, et al. On the pressure dependence of ignition and mixing in two-dimensional reactive shock-bubble interaction[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 163: 414-426. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.10.016.
- [26] HAEHN N, RANJAN D, WEBER C, et al. Reacting shock bubble interaction[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 1339 – 1350. DOI: 10.1016/j.combustflame.2010.11.015.