基于稀疏传感的气动流场重建图神经网络

Gregory Duth´e苏黎世联邦理工学院¨
苏黎世 duthe@ibk.baug.ethz.ch

Imad Abdallah苏黎世联邦理工学院¨苏
黎世 abdallah@ibk.baug.ethz.ch

Sarah Barber
东部瑞士应用科学大学 sarah.barber@ost.ch

Eleni Chatzi苏黎世联邦理工学院
chatzi@ibk.baug.ethz.ch

arXiv:2301.03228v1 [cs.CE] 9 Jan 2023

摘要

感知任意几何形状周围的流体流动，需要根据在其表面感知到的物理量进行外推，以重建周围流体的特征。这是一个具有挑战性的逆问题，但若能解决，将对许多工程应用产生重大影响。近年来，随着价格低廉且性能可靠的基于微机电系统的传感器日益普及，这种逆向思路的应用逐渐受到关注。将这些传感器与新颖的数据驱动方法相结合，有望实现浸没结构周围的流场重建，从而助力无人驾驶飞行器／水下航行器的路径规划或控制，以及风力涡轮机叶片的结构健康监测等应用。在本研究中，我们训练深度可逆图神经网络（GNN），对二维空气动力学形状——翼型——周围的流动进行感知（流场重建）。受近期研究启发（该研究表明，图神经网络可作为基于网格的正向物理模拟器的强大替代方案），我们实现了一种消息传递神经网络，根据模拟翼型的表面压力分布，同时重建其周围的压力场和速度场，并以上下文向量的形式进一步提取有用的远场属性。我们通过模拟输入边界条件与翼型形状的随机但有意义的组合，生成了一个独特的计算流体力学模拟数据集。我们表明，尽管在高雷诺数湍流来流条件下重建任意翼型几何形状周围的流场面临挑战，我们的框架仍能很好地泛化到未见过的案例。

1 引言

许多工程应用都将受益于这样一种能力：从结构表面获取稀疏测量，并据此感知和重建流动特征。流动感知对于提高风力涡轮机和无人机控制器的精度与韧性至关重要。另一种可能的应用是监测风载结构（Barber等，2022年）；将廉价的微机电系统（MEMS）与新颖的流动感知方法相结合，有望实现稳健的结构健康监测方案。在这项工作中，我们关注常见的空气动力结构：旨在重建二维翼型周围的流场。传统上，计算翼型周围的流场需要采用计算流体力学（CFD）方法，这类方法属于正向物理模拟器。在计算流体力学中，需要设定来流、出流和壁面边界条件，并经过多次迭代求解离散化的纳维–斯托克斯偏微分方程，进而得到翼型表面的压力分布。我们旨在求解这一逆问题：仅给定翼型表面的压力分布，求得流场解和远场边界条件。此外，我们还希望针对各种湍流来流下的任意翼型几何实现这一目标。

采用 Erichson 等人（2020）的记法，该问题可描述如下。将配备有 p 个分布式气压传感器的翼型置于定常气流中，从而在其周边多个位置获得表面压力测量值 $s \in \mathbb{R}^p$。传感器通过测量算子 H对周围流场 $x \in \mathbb{R}^m$ 进行采样：

$$s = H(x) \tag{1}$$

目标是通过训练数据学习一个函数 $\mathcal{F}$，构造翼型周围流场的估计值 $\hat{x}$。该函数近似高度非线性的逆测量算子 G，使得：

$$\mathcal{F}(s) = \hat{x} \approx x = G(s) \tag{2}$$

网格是一种极为有用的工具，在许多工程领域中不可或缺，尤其是在计算流体力学中。与笛卡尔网格表示不同，网格表示具有很高的灵活性，适用于不规则几何形状，并允许采用可变的空间密度。这使其非常适合对复杂物理问题进行离散化，并能在特定关注区域内权衡数值精度与计算效率。此外，网格还可以用节点和边来描述，即表示为图。在此背景下，流场重建问题可描述如下：根据翼型的计算流体力学网格构建一个图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathcal{U})$，其中包含 m流体节点 $\mathcal{V}_f$ 和 p 翼型边界节点 $\mathcal{V}_a$。所有 $\mathcal{V}_f$ 的流动特征均未知，而 $\mathcal{V}_a$ 的特征已知。我们的目标是学习一个图算子 $\mathscr{F}$，利用翼型边界节点所包含的信息、输入图级属性 $\mathcal{U}_{in}$ 以及边 $\mathcal{E}$，估计流体节点处的信息：

$$\hat{\mathcal{V}}_f = \mathscr{F}(\mathcal{V}_a, \mathcal{E}, \mathcal{U}_{in}) \tag{3}$$

另一个附带目标是估计图的全局上下文 $\mathcal{U}$，因为其中包含对应用有用的信息。图1以图学习的视角描述了流场重建问题。

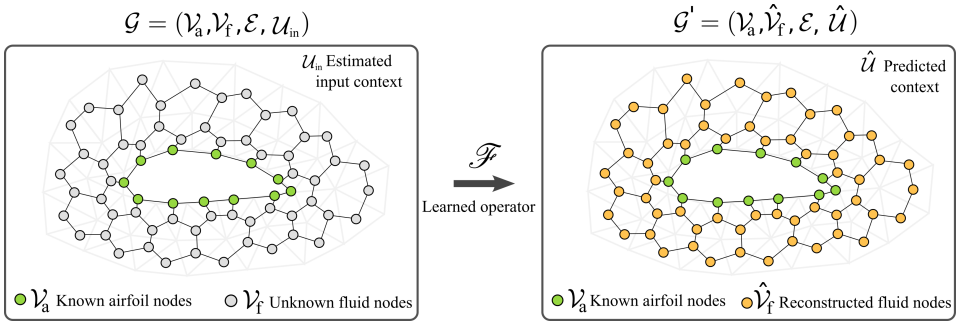


图1：问题设置。我们的目标是学习重建算子 $\mathscr{F}$，用以估计流体节点的属性以及图的上下文。这相当于重建纳维–斯托克斯方程的一个解，同时满足翼型表面处所感知到的边界条件。

从几何学习的角度来看，流场重建因若干原因而具有挑战性。首先需要克服的一大难题是图的规模。为了在关键区域实现良好的空间分辨率，我们采用了靠近翼型处密度较高的网格。因此，我们的数据集包含的图平均约有 55,000 个节点，比以往的网格图学习模拟方法高出一个数量级（Pfaff 等人，2020年）。此外，输入信息集中在图中一个非常局部的区域：翼型节点。浅层图神经网络（GNN）难以将重建远离翼型的节点所需的信息传播过去，这意味着需要采用具有大量消息传递步骤的深层图神经网络架构，才能将这道“信息屏障”推离翼型节点。然而，深层图神经网络也伴随着其他问题，例如内存需求大、过平滑和过压缩。

在本研究中，我们结合多种现有的图学习方法，以应对上述挑战。我们的贡献可总结如下：

• 我们将未知特征传播（Rossi 等人，2021年）与极深的分组可逆图神经网络（Li 等人，2021年）相结合，以重建流体节点处的流动特征，同时收集上下文远场信息。

• 利用图神经网络学习二维空气动力流场的泛化能力，包括：(1) 任意翼型几何形状；(2) 任意湍流来流条件（流速、湍流强度和攻角）；以及 (3) 仅基于翼型表面的稀疏压力数据，同时重建流场并推理上下文远场流动信息。

• 生成了一个独特的训练数据集，其中包含使用 OpenFOAM 对多种不同几何形状和来流条件下的翼型进行的计算流体力学模拟；这些数据被解析为图结构并公开发布。

• 我们针对未见过的翼型和流场配置，收集定性和定量结果，并开展多项实验以了解该框架的局限性。具体而言，我们测试并比较了三种不同的图神经网络层架构。

2 相关工作

机器学习方法近年来在流体力学领域引起了广泛关注（Brunton 等，2020）。流体相关问题通常具有非线性、复杂且会产生大量数据等特点，而这些恰恰是深度学习方法大显身手的条件。具体到基于稀疏测量数据进行流场重建这一领域，文献中已有多种神经网络方法。Erichson 等人（2020）在一篇文章中采用“浅层神经网络”，即仅含两个隐藏层的全连接网络，根据稀疏测量数据估计非定常流动。作者使用单一特定几何流场配置训练网络，例如圆柱体后的流场，然后在相同配置下的不同时间步进行测试。我们的目标是估计任意翼型几何周围的流场，因此力求避免这一局限。作者将其结果与常用的本征正交分解（POD）方法进行比较，并指出重建误差显著降低。随后，Carter 等人（2021）基于实验数据，将这项工作扩展至翼型周围的湍流重建，并将结果与粒子图像测速（PIV）测量数据进行了比较。Fukami 等人（2020）的研究进一步证实了神经网络相对于其他方法的可行性；该研究比较了多种方法对圆柱体和翼型后方流场的估计效果。同样，这些模型是在单一¨流场配置下训练和测试的，同时还依赖笛卡尔几何输入。Ozbay 和 Laizet（2022）试图通过施瓦茨–克里斯托费尔映射来采样流场重建位置，从而使方法不受几何形状影响，以规避这一局限。作者在预先设定的来流雷诺数下，使用随机生成的二维贝塞尔形状周围的一系列非定常流动模拟，训练多种神经网络架构。作为流场重建的输入，他们使用形状表面上的多个压力传感器，以及尾流中的速度探针。结果表明，与笛卡尔采样策略相比，所有类型的神经网络性能均显著提升，尤其是在浸没形状附近。尽管该研究证明了方法对各种几何配置的鲁棒性，但它需要额外的速度传感器，且训练时仅采用单一远场边界条件；而我们旨在避免并改进这两点。Chen 等人（2021）报告了另一种不依赖几何形状的方法。在这项与我们的方法最为接近的研究中，作者在由随机生成的贝塞尔形状的计算流体力学网格构建的图上使用图卷积网络（GCN）（Kipf 和 Welling，2016）。GCN 用于预测固定层流来流条件（雷诺数为 10）下形状周围的流场，且不使用表面测量数据。相比之下，我们旨在仅凭表面读数重建多种湍流，这是一项约束少得多的问题。我们还旨在表征流场的全局属性，这与 Zhou 等人（2021）的工作类似。据我们所知，我们是首个尝试在任意翼型几何条件下，同时重建流场并估计大雷诺数湍流来流参数的研究。

我们生成用于训练图神经网络模型的数据集，在几何形状、网格划分和计算流体力学流程方面与 Thuerey 等（2020年）的工作类似，主要区别在于所选用的雷诺平均纳维–斯托克斯模型以及后处理（图解析）。文献中的其他数据集仅关注 NACA 系列翼型（Schillaci 等，2021年）。

图网络基于消息传递框架（Gilmer 等人，2017年），其中节点的特征通过聚合来自其邻居节点的消息来更新。可以构建许多不同类型的消息传递方案，其中一些采用注意力机制（Veli˘ckovi´c 等人，2017年），另一些则依托坚实的理论基础（Xu 等人，2018年）。图学习

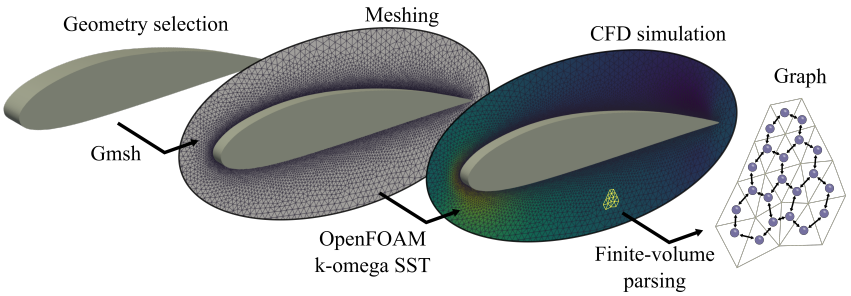


图 2：数据集生成流程示意图。从数据库中随机选取翼型形状，然后在 OpenFOAM 中进行网格划分，并使用随机的可行边界条件进行仿真。最后，使用有限体积格式将仿真网格解析为图。

方法正越来越多地应用于各种物理问题（Sanchez-Gonzalez 等人，2018年；2020年）。Pfaff 等人（2020年）成功展示了图神经网络如何学习复现基于网格的物理模拟器，并能够预测瞬态解的演化。受这些结果启发，我们的方法采用了相同的基本编码–处理–解码网络结构。然而，需要注意的一个关键区别是，与下一步预测问题不同，流场重建必须应对大量缺失信息，已知特征极为局部。为解决这一难题，我们采用基于图的特征传播方法（Rossi 等，2021年），这与矩阵补全方法（Monti 等人，2017年）密切相关。特征传播是一种有效且计算成本低廉的方法，可用于初始化存在特征缺失的图。我们将此方法用作预处理步骤，图在输入其余图神经网络模型之前会先经过该步骤。

针对大型图训练图神经网络颇具挑战，常见方法倾向于尽可能减少可学习参数的数量，使问题变得可处理（Chen 等人，2020年）。这通常会导致图神经网络相对较浅，从而可能不利于将翼型节点中包含的信息传播到足够广的图范围内。采用子图采样策略（Hamilton 等人，2017年）是另一种可行方法，也能支持构建更大或更深的图神经网络。然而，由于信息定位具有异质性，我们需要在一次处理中输入完整的图，因此这些方法并不适用于我们的情况。此外，子图采样还会使我们的辅助目标——预测用于远场估计的全局图属性——更加难以实现。Li 等人（2021年）的近期研究表明，借助分组可逆层，可以在大型图上训练非常深的图神经网络，同时以增加计算量为代价降低内存需求。这一方法构成了所提出的流场重建图神经网络中处理模块的核心。传统上，在大型图上训练深层图神经网络还面临另一个问题，即过压缩（Alon 和 Yahav，2020年）。过压缩是图结构所导致的副作用：瓶颈和树状结构（Topping 等人，2021年）可能导致某些节点的潜在表示被需要存储的大量信息所淹没。我们在将仿真网格解析为图时利用了这一信息。

3 数据集生成

本节介绍数据生成流程中的各个组成部分。我们总共生成了 1120 个收敛模拟，并按照 80/10/10 的比例将其划分为训练、验证和测试数据集。图 2 展示了该流程的示意图。

几何选择与网格划分在我们的数据集生成流程中，翼型形状是从 UUIC翼型数据库（Selig，1996年）中随机选取的。在将形状传递给网格划分算法之前，我们会进行一些额外的插值和处理，以确保所选翼型的前缘有足够数量的点，并且后缘定义得当。随后，我们使用 Gmsh（Geuzaine 和 Remacle，2020年）在所选翼型周围构建非结构化O形网格。我们在翼型附近设置尺寸场，以确保生成的网格具有适用于计算流体力学壁面函数的 y+ 值。我们还设置了一个整体尺寸参数

以确保远场密度足够，同时调整该参数以保证生成适量的网格单元（$< 150'000$）。

计算流体力学模拟每个网格对应一种不同的来流配置。远场条件由三个参数控制：攻角、来流速度和湍流强度。这些参数依据概率分布抽取，以反映雷诺数范围为 $2 \cdot 10^5$ 至 $6.5 \cdot 10^6$、平均雷诺数约为 $3 \cdot 10^6$ 的真实大气流动。该平均值远高于约为 $5 \cdot 10^5$ 的典型层流向湍流转捩阈值（Incropera 等人，1996），这大大增加了流场重建问题的难度。远场条件构成图的全局上下文向量，并在推理时进行估计。我们使用基于 OpenFOAM 软件包（Jasak 等人，2007）的稳态二维雷诺平均纳维–斯托克斯（RANS）计算流体力学求解器，模拟翼型周围的流场。在湍流建模方面，我们选用 K-ω SST 模型（Menter 和 Esch，2001），并采用 OpenFOAM 标准壁面函数进行边界层处理。仅保留压力、速度和湍流残差均低于 $5 \cdot 10^{-5}$ 且充分收敛的计算流体力学模拟。

图解析 与许多其他基于网格的物理模拟器不同，OpenFOAM 等计算流体力学求解器基于有限体积法。网格转换为图的方式应当反映这一显著差异。为此，我们将网格单元本身作为节点，并在相邻网格单元之间构建双向边。这样便能收集一个与底层物理相关的额外边特征。具体而言，两个网格单元之间边界的长度（对于三维网格则为表面积）被用作边特征。这样做有两方面的好处：一方面，将一种尺寸信息输入网络；另一方面，在边上设置了一个与通量计算相关的量。对于节点，我们收集 4 类特征：压力、x 方向速度分量、y 方向速度分量和节点类别（流体、远场、壁面），其中节点类别以独热向量的形式输入。全局上下文特征为远场条件（湍流强度、来流速度和攻角）。为避免不必要的计算开销，我们没有将半径为 100 个翼型弦长的整个计算流体力学计算域解析为图。相反，我们只保留以翼型为中心、位于 1 个弦长圆内的网格单元。此外，我们将翼型节点设置在翼型网格边界上，并在相邻翼型节点之间添加双向边。添加这些额外边的目的是避免图中出现树状结构，因为这类结构可能会在学习过程中造成瓶颈（Topping 等人，2021年）。我们的数据集中的图平均约有 55k 个节点和约 85k 条独立边。

4 图神经网络框架

4.1 架构

对于我们的图神经网络架构，我们采用了如今在基于图的物理问题学习中广受欢迎的编码-处理-解码逻辑（Sanchez-Gonzalez 等人，2020年；Pfaff 等人，2020年；Godwin 等人，2022年），但做了一些显著的修改。图3展示了流场重建图神经网络的概览。

输入特征 在流场重建问题中，我们假设图的全局上下文未知，但可以估算描述流场的一些有用物理参数。根据伯努利原理，并且鉴于所有翼型的模拟均采用零远场静压，远场来流速度大小可初步近似为：

$$\hat{U}_\infty = \sqrt{\frac{2 \cdot p_0}{\rho}} \tag{4}$$

其中，ρ 为空气密度（在所有模拟中保持恒定），p_0 为驻点处测得的总压，可通过取翼型节点处压力的最大值$p_0 = \max(p_{v_a})$来估算。伯努利原理并不适用于湍流等我们试图重建的流场，但可作为估算远场速度的良好起点。另一个可提取的有用图属性是作用于翼型上的法向力系数。虽然通常使用升力系数来表征翼型，但由于攻角未知（这是需要通过学习得到的模型推断的量），因此无法计算升力系数。尽管如此，法向系数

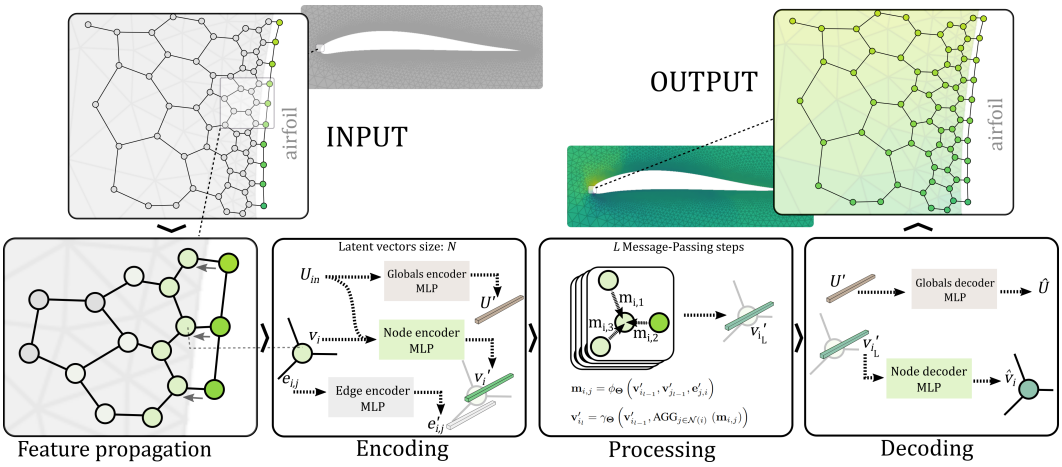


图3：流场重建图神经网络架构概览。使用特征传播初始化未知的流体节点。随后将图输入编码-处理-解码流程，以获得重建的流场。在处理步骤中，通过深层分组可逆图神经网络中的消息传递来更新节点特征。

与升力系数直接相关，并提供额外的物理信息，可能有助于网络重建流场。它可通过以下公式估算：

$$\hat{C}_n = \frac{\sum_{v_i \in \mathcal{V}_a} p_{v_i} \cdot l_{v_i} \cdot n_{y,v_i}}{p_0} \tag{5}$$

其中， l 是边界长度， n_y 是边界法向量的 y 分量，这两者都是每个网格单元边界的已知属性。因此，我们使用 $\mathcal{U}_{in} = (\hat{}U_\infty, \hat{}C_n)$ 作为二维输入上下文向量。

对于节点，我们只能获取翼型表面的压力分布，而流体节点处的压力值则设为“NaN”。每个节点的类型都是已知的，并以独热向量编码，因此输入节点特征总数为四个。为考虑网格几何，使用以下四种边特征作为输入：相对边方向向量的 x 和 y 分量、边长以及网格单元边界长度值 l（见第 3 节）。

预处理 输入和目标节点特征均经过归一化。为避免归一化产生偏差，所有压力特征均使用已知翼型表面压力分布的均值和标准差进行归一化，而速度目标特征ˆ 的两个分量均使用初始估计的远场速度 U_∞ 进行归一化。在将图输入图神经网络之前，我们使用特征传播（Rossi 等，2021）作为预处理步骤。这一步是我们框架的重要组成部分，可将输入图调整至合理的初始状态。从本质上说，特征传播器会将表面压力信息向外传播。在大多数情况下，我们发现进行 20 次特征传播迭代就足够了。

编码 在编码层中，我们使用经 ReLU 激活的多层感知机（包含两个隐藏层）和层归一化，将图的输入特征投影为大小为 N 的潜在向量。该编码层与标准 GraphNet 编码器（Sanchez-Gonzalez 等，2020）不同之处在于，节点编码器多层感知机的输入除了输入节点特征外，还包括潜在全局向量。我们作出这一修改，是为了在构造节点潜在变量时考虑图级属性；而在处理步骤中则不会考虑这些属性。

处理 在处理步骤中，我们选择使用包含 L 个消息传递层的深层分组可逆图神经网络（Li 等，2021年）。该架构对典型的图神经网络架构进行了改进：首先沿特征维度将输入节点特征矩阵 V 拆分为 C 组 $\langle V_1, V_2, ..., V_C \rangle$，随后将其处理为分组输出 $\langle V_1', V_2', ..., V_C' \rangle$，并通过一个

分组可逆 GNN 层计算这些输出。计算方式如下：

$$
\begin{aligned}
V_0' &= \sum_{k=2}^{C} V_k \\
V_k' &= f_{wk}(V_{k-1}', A, E) + V_k, \quad k \in \{1, \ldots, C\}
\end{aligned}
\tag{6}
$$

其中 A 为邻接矩阵， E 为边特征矩阵。
分组可逆框架允许为 GNN 层 f_{wk}选择任意类型的消息传递架构。我们选择测试三种常用的 GNN 层：图注意力网络（GAT）（Veli˘ckovi´c 等人，2017年）、改进的图同构网络（GIN）（Xu 等人，2018年），该网络将边特征纳入考虑（Hu 等人，2019年）；以及广义聚合网络（GEN）（Li 等人，2020年），该网络通过采用不同的聚合方案改进标准 GCN，同时也利用边特征。

解码只有节点和全局上下文会被解码回特征空间，因为边不会更新。两个解码神经网络均为包含两个隐藏层并采用 ReLU 激活函数的多层感知机，且不进行任何输出归一化。在解码器的输出端，我们为每个节点汇总估计得到的压力和速度场。输出上下文向量由更新后的远场速度，以及对来流角（攻角）和湍流强度的估计组成。

4.2 训练

总体方面 我们的模型在由 896 个图组成的数据集上进行训练。模型使用 Adam 优化器，在一块显存为 10GB 的 Nvidia GPU 上进行训练。由于图的规模和性质，我们只能使用批量大小为 1，不过每个训练轮次都会随机打乱顺序。学习率初始设为 $5 \cdot 10^{-4}$，并以 0.97 的因子进行指数衰减。

损失函数 我们采用多分量损失函数，以同时最小化节点特征重建误差和上下文向量预测误差，两个分量均使用 L_2 损失。我们还测试了一个基于速度散度的附加损失分量，但它产生了过多伪影，因此被舍弃。总体损失为：

$$
\mathcal{L} = L_2(\mathcal{V}, \hat{\mathcal{V}}) + \lambda \cdot L_2(\mathcal{U}, \hat{\mathcal{U}}) \tag{7}
$$

其中， λ 是用于平衡不同分量的超参数。实践中，我们通常将 λ 设为 1。

5 结果

我们在一个包含 112 个未见过的翼型模拟的数据集上测试训练好的模型，其中每个模拟的湍流来流参数组合各不相同。此处展示模型的定性和定量结果，并通过实验探究所提出框架的局限性及改进方向。

GNN 层比较 在表 1 中，我们汇总并比较了处理器中使用的三种不同类型 GNN 层的结果：图注意力网络、图同构网络和 GEN。编码器和解码器网络的架构保持不变，节点、边和全局特征的潜在维度为$N = 128$。在分组可逆处理器中，层数设为 $L = 30$，组数设为 $C = 4$。为使可学习参数的数量保持一致，我们仔细选择了每种 GNN 层类型的超参数。有关不同配置的更多信息，请参阅附录。我们还在附录 D 中研究了深度和宽度对各模型性能的影响。

速度重建 更具挑战性的预测任务之一，是估计远离翼型处的速度场。即便对于计算流体力学模拟器，准确捕捉速度剪切和回流区也并非易事，而且高度依赖于翼型形状和来流角。

表 1：流场重建任务和全局参数估计任务在测试数据集上的均方根预测误差。结果为采用不同初始化运行 3 次后的均值。所有模型的潜在维度均为 $N = 128$，且有 $L = 30$ 层。revGAT 模型在压力和 y 方向速度重建方面表现最佳，但在 x 方向速度重建和图级属性预测方面不及 revGIN 模型。

	节点重建均方根误差			全局参数预测均方根误差		
	压力 [Pa]	x方向速度 [米/秒]	y方向速度 [米/秒]	远场速度 [米/秒]	攻角 [°]	湍流强度 [-]
revGAT	**77.98 ± 17.99**	7.96 ± 1.19	**2.69 ± 0.53**	0.92 ± 0.17	4.16 ± 0.10	0.04 ± 0.003
revGIN	158.37 ± 5.16	**6.23 ± 0.32**	4.43 ± 0.22	**0.45 ± 0.06**	4.12 ± 0.09	**0.03 ± 0.003**
revGEN	137.51 ± 17.31	10.81 ± 0.25	5.47 ± 0.05	0.46 ± 0.05	**4.12 ± 0.01**	0.04 ± 0.002

要成功完成这项任务，图神经网络需要具备足够的表达能力，以便在整个图中传播相关信息。表2总结了三种模型在翼型周围多个同心区域内对速度场的预测误差。我们观察到，对于这三种模型，x方向速度的误差会随着远离翼型而进一步减小，但y方向速度则并非如此。

表2：流场不同同心区域内速度分量的均方根预测误差，取测试数据集上的平均值。每个区域定义为椭圆内部，其中半长轴长度为 a，半短轴长度为 b（以弦长为单位）。结果为采用不同初始化进行的3次运行的平均值。

	x方向速度 [米/秒]			y方向速度 [米/秒]		
	revGAT	revGIN	revGEN	revGAT	revGIN	revGEN
区域 1 (a=0.6,b=0.1)	8.26 ± 1.34	**6.46 ± 0.39**	11.44 ± 0.25	**2.48 ± 0.60**	4.15 ± 0.18	5.40 ± 0.03
区域 2(a=0.7, b=0.15)	7.98 ± 1.25	**6.30 ± 0.35**	11.00 ± 0.26	**2.49 ± 0.43**	4.40 ± 0.23	5.52 ± 0.05
区域 3(a=0.8, b=0.2)	7.95 ± 1.24	**6.27 ± 0.33**	10.92 ± 0.26	**2.61 ± 0.55**	4.44 ± 0.23	5.53 ± 0.05

定性结果 图4展示了我们表现最佳的两个模型（revGAT 和 revGIN）的一些定性结果，并与 CFD 模拟的真实值进行了比较。这些结果凸显出，学习得到的模型能够很好地重建流动特征，尽管仍存在一些伪影。随着与翼型的距离增大，这些缺陷变得更加明显。此外，流场中的某些部分未能得到良好捕捉。长尾流的流场便是如此。另一方面，我们注意到，翼型前缘附近的流动特征通常能够得到很好的捕捉。附录E中提供了更多重建流场的示例。

远场估计 图5展示了revGIN模型在测试集上的图级上下文预测结果。得益于作为输入提供的良好初始远场估计，图神经网络能够准确预测远场来流速度。对于攻角估计，小攻角下的结果良好，但正、负大攻角下的效果较差。不过，湍流强度的预测效果相对较差，这可能是因为该变量对翼型压力分布的影响较小。此外，在CFD模拟中并未直接设置该变量，而是将其用于计算湍流边界条件（$k-\omega$ 湍流模型的动能 k 和比耗散率 ω），因此在这一逆向情境中更难推断该变量。

6 讨论

我们的结果表明，分组可逆处理器中所选图神经网络架构的类型会明显影响流场重构质量。通过比较，我们发现，总体而言，使用图注意力网络层通常能得到最佳的重构结果。不过，我们也观察到，图同构网络层更善于捕捉分离流（见附录E）。或许将二者结合起来能够得到更好的重构流场，例如可以

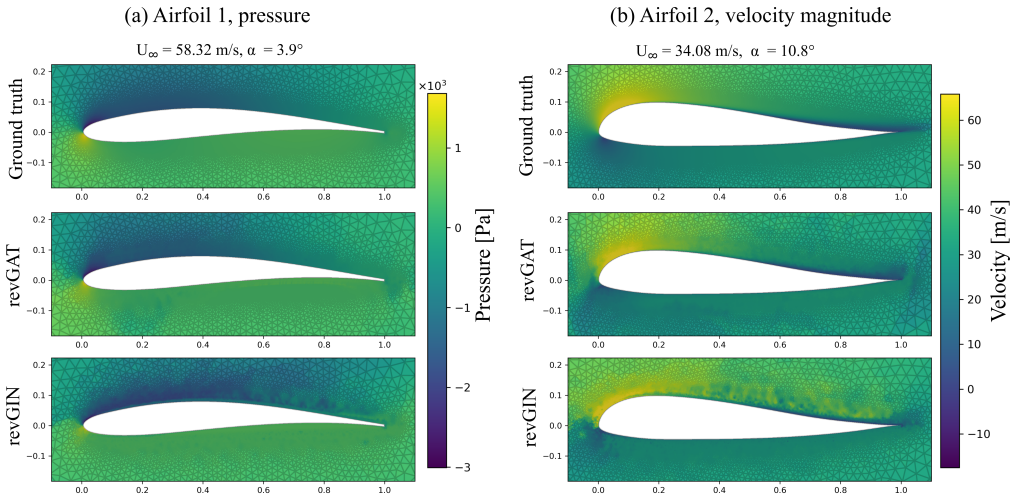


图4：revGAT 和 revGIN 模型在不同来流配置下对两种未见过的任意翼型几何形状周围流场的重建结果。图（a）展示了重建的压力场，图（b）展示了重建的速度场。每种情况下均展示了真实值以供比较。从定性角度看，revGAT 模型生成的解中伪影较少。

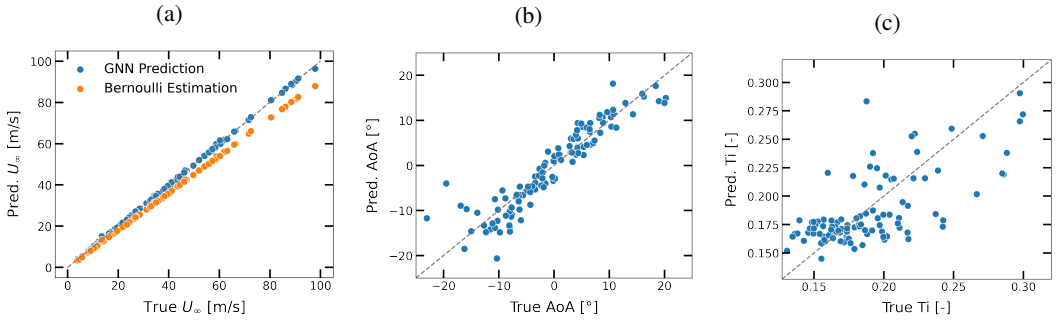


图5：在测试数据集上评估的 revGIN 模型预测全局属性与真实值的对比。得益于较好的初始估计，该模型能够准确预测远场流速（a），对攻角（b）的预测效果稍逊，但在远场湍流强度预测（c）方面表现不佳。

通过交替使用 GIN 层和 GAT 层来实现。最后，我们发现 GEN 层的表现有些差强人意。

值得注意的是，翼型周围最初几层节点携带了不成比例的大量相关信息，这些信息需要向外传播到数量不断增加的节点，从而在图中形成类似树状的人工路径。分组可逆框架为训练深度网络提供了很好的方法，有助于克服这一问题，但其他方法也可能可行。一种可能的解决方案是采用 Martinkus等（2021）提出的层级结构。另一种选择是迭代应用消息传递图神经网络，每一步都重建翼型周围范围逐渐扩大的同心带。基于物理的学习方法也可能带来改进。例如，消息传递框架或许很适合融入格子玻尔兹曼方法（Chen和Doolen，1998）中的元素，因为该方法同样采用类似的两步算法（碰撞和迁移）。另一个可能的方案是按照 Taha和Gonzalez（2021）的描述，最小化压力梯度。

7 结论

在这项工作中，我们应用深度图学习技术，重建高雷诺数湍流作用下任意翼型几何形状周围的压力场和速度场。我们表明，尽管该问题存在大型图以及输入信息高度局部化等挑战，我们的流场重建图神经网络框架仍能提供良好的重建结果，并推断上下文远场流动信息。我们在分组可逆处理器图神经网络中比较了多种消息传递架构，发现图注意力网络层能够得到最佳重建结果。这项工作提供了一个灵活的框架，可轻松应用于其他基于网格的逆物理问题，并且可能对许多工程应用具有重要意义。

参考文献

Uri Alon 和 Eran Yahav。关于图神经网络的瓶颈及其实际影响。*arXiv* 预印本 *arXiv:2006.05205*，2020年。

Sarah Barber、Julien Deparday、Yuriy Marykovskiy、Eleni Chatzi、Imad Abdallah、Gregory Duth´e、Michele Magno、Tommaso Polonelli、Raphael Fischer 和 Hanna M¨uller。用于大型运行中风力涡轮机叶片的无线、非侵入式基于微机电系统的压力与声学测量系统的开发。《风能科学》，7(4):1383–1398，2022年。

Steven L Brunton、Bernd R Noack 和 Petros Koumoutsakos。流体力学中的机器学习。《流体力学年度评论》，52:477–508，2020年。

Douglas W Carter、Francis De Voogt、Renan Soares 和 Bharathram Ganapathisubramani。利用实验数据对失速翼型上方流场进行数据驱动的稀疏重建。《数据中心工程》，2，2021年。

Junfeng Chen、Elie Hachem 和 Jonathan Viquerat。基于图神经网络的随机二维形状周围层流预测。*arXiv*预印本 *arXiv:2107.11529*，2021年。

Ming Chen、Zhewei Wei、Zengfeng Huang、Bolin Ding 和 Yaliang Li。简单且深层的图卷积网络。载于国际机器学习会议，第1725–1735页。PMLR，2020年。

Shiyi Chen 和 Gary D Doolen。用于流体流动的格子玻尔兹曼方法。《流体力学年度评论》，30(1)：329–364，1998年。

N Benjamin Erichson、Lionel Mathelin、Zhewei Yao、Steven L Brunton、Michael W Mahoney 和 J Nathan Kutz。利用有限传感器进行流场重建的浅层神经网络。《皇家学会会刊*A*辑》，476(2238)：20200097，2020年。

Kai Fukami、Koji Fukagata 和 Kunihiko Taira。流体流动监督机器学习方法的评估。《理论与计算流体力学》，34(4):497–519，2020年。

Christophe Geuzaine 和 Jean-François Remacle。具有内置前处理和后处理功能的三维有限元网格生成器。《国际工程数值方法杂志》，(11):79，2020年。

Justin Gilmer、Samuel S Schoenholz、Patrick F Riley、Oriol Vinyals 和 George E Dahl。用于量子化学的神经消息传递。载于国际机器学习会议，第1263–1272页。PMLR，2017年。

Jonathan Godwin、Michael Schaarschmidt、Alexander Gaunt、Alvaro Sanchez-Gonzalez、Yulia Rubanova、Petar Veli˘ckovi´c、James Kirkpatrick 和 Peter Battaglia。面向三维分子性质预测及更多领域的简易图神经网络正则化。*arXiv* 预印本 *arXiv:2106.07971*，2022年。

Nigel Gregory 和 CL O'reilly。包含模拟白霜的上表面粗糙度影响的 NACA 0012 翼型截面低速空气动力特性。1970年。

Will Hamilton、Zhitao Ying 和 Jure Leskovec。大型图上的归纳式表示学习。神经信息处理系统进展，30，2017年。

Weihua Hu、Bowen Liu、Joseph Gomes、Marinka Zitnik、Percy Liang、Vijay Pande 和J ure Leskovec。图神经网络的预训练策略。*arXiv* 预印本 *arXiv:1905.12265*，2019年。

Frank P Incropera、David P DeWitt、Theodore L Bergman、Adrienne S Lavine 等。传热与传质基础，第 6 卷。Wiley，纽约，1996年。

Hrvoje Jasak、Aleksandar Jemcov、Zeljko Tukovic 等。Openfoam：用于复杂物理模拟的 c++ 库。在数值动力学耦合方法国际研讨会上，第 1000 卷，第 1–20 页。杜布罗夫尼克国际大学中心，克罗地亚，2007年。

Thomas N Kipf 和 Max Welling. 基于图卷积网络的半监督分类。*arXiv* 预印本 *arXiv:1609.02907*，2016年。

Sherrie L Krist. *CFL3D 用户手册（第 5.0 版）*。美国国家航空航天局兰利研究中心，1998年。Guohao Li、Chenxin Xiong、Ali Thabet 和 Bernard Ghanem。DeeperGCN：训练更深层图卷积网络所需的一切。*arXiv* 预印本 *arXiv:2006.07739*，2020年。Guohao Li、Matthias M¨uller、Bernard Ghanem 和 Vladlen Koltun。使用 1000 层训练图神经网络。载于国际机器学习会议，第 6437–6449 页。PMLR，2021年。

Karolis Martinkus、Aurelien Lucchi 和 Nathana¨el Perraudin。用于粒子模拟的可扩展图网络。载于*AAAI*人工智能大会论文集，第35卷，第8912–8920页。AAAI出版社，2021年。

Florian Menter 和 Thomas Esch。工业传热预测要素。载于第*16*届巴西机械工程大会 *(COBEM)*，第109卷，第650页，2001年。

Federico Monti、MichaelBronstein 和 XavierBresson。利用循环多图神经网络进行几何矩阵补全。神经信息处理系统进展，第30卷，2017年。

¨Ali Girayhan Ozbay 和 Sylvain Laizet。利用保角映射和稀疏传感器，对任意二维物体周围的流体流动进行深度学习重建。*AIPAdvances*，12(4)：045126，2022年。

Tobias Pfaff、Meire Fortunato、Alvaro Sanchez-Gonzalez 和 Peter W Battaglia。使用图网络学习基于网格的模拟。*arXiv*预印本 *arXiv:2010.03409*，2020年。

Emanuele Rossi、Henry Kenlay、Maria I Gorinova、Benjamin Paul Chamberlain、Xiaowen Dong 和 Michael Bronstein。关于在具有缺失节点特征的图上进行学习时，特征传播具有不合理有效性的研究。*arXiv* 预印本 *arXiv:2111.12128*，2021年。

Alvaro Sanchez-Gonzalez、Nicolas Heess、Jost Tobias Springenberg、Josh Merel、Martin Riedmiller、Raia Hadsell 和 Peter Battaglia。图网络作为可学习的物理引擎，用于推理和控制。发表于国际机器学习会议，第 4470–4479 页。PMLR，2018年。

Alvaro Sanchez-Gonzalez、Jonathan Godwin、Tobias Pfaff、Rex Ying、Jure Leskovec 和 Peter Battaglia。利用图网络学习模拟复杂物理现象。发表于国际机器学习会议，第 8459–8468 页。PMLR，2020年。

Andrea Schillaci、Maurizio Quadrio、Carlotta Pipolo、Marcello Restelli 和 Giacomo Boracchi。从流体动力学特征推断功能属性。载于*2020*年第*25*届国际模式识别会议（*ICPR*），第4091–4098页。IEEE，2021年。

Michael S Selig。UIUC 翼型数据网站。1996年。网址 https://m-selig.ae.illinois.edu/ads.html。Haithem Taha 和 Cody Gonzalez。升力变分理论。载于美国物理学会流体动力学分会会议摘要，第 P17–006 页，2021年。Nils Thuerey、Konstantin Weißenow、Lukas Prantl 和 Xiangyu Hu。翼型流动的雷诺平均纳维–斯托克斯模拟深度学习方法。《美国航空航天学会期刊》，58(1)：25–36，2020年。

Jake Topping、Francesco Di Giovanni、Benjamin Paul Chamberlain、Xiaowen Dong 和 Michael M Bronstein。通过曲率理解图上的过压缩与瓶颈。*arXiv* 预印本 *arXiv:2111.14522*，2021年。

Petar Veli˘ckovi´c、Guillem Cucurull、Arantxa Casanova、Adriana Romero、Pietro Lio 和 Yoshua Bengio。图注意力网络。*arXiv* 预印本 *arXiv:1710.10903*，2017年。

Keyulu Xu、Weihua Hu、Jure Leskovec 和 Stefanie Jegelka。图神经网络的能力有多强？*arXiv* 预印本 *arXiv:1810.00826*，2018年。

Kaiwen Zhou、Luanliang Zhou、Simeng Zhao、Xingyu Qiang、Yingzheng Liu 和 Xin Wen。利用分布式压力测量进行气动参数流动感知的数据驱动方法。《美国航空航天学会期刊》，59(9):3504–3516，2021年。

附录

A 计算流体力学模型基准测试

为确保构成我们数据集的模拟具有足够的质量，我们将计算流体力学流程与文献中报告的NACA 0012翼型结果（Krist，1998年；Gregory & O’reilly，1970年）进行对比。在图 6 中，我们绘制了该翼型在两个攻角下的压力系数。可以看到，我们的计算流体力学流程与此前的实验和数值结果均吻合良好。

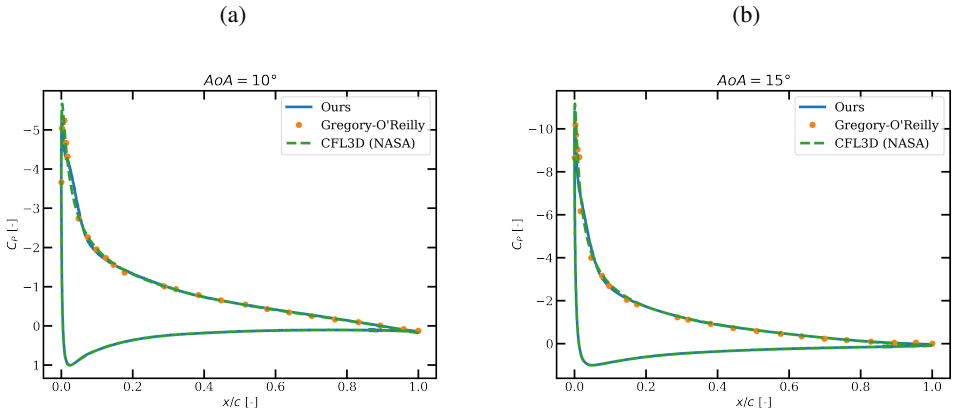


图 6：将我们的计算流体力学数据流程与实验结果（Gregory & O’reilly，1970年）及其他计算流体力学结果（Krist，1998年）进行比较。我们绘制了 NACA 0012翼型在 $Re = 6 \cdot 10^6$ 处、攻角为 (a) $10°$ 和 (b) $15°$ 时的表面压力系数分布。

B 补充超参数细节

对于所有模型，均使用 30 层，并将潜在空间大小设为 128。图注意力网络模型采用 2 个注意力头。此外，每个图注意力网络层的输出都会经过一层层归一化，因为研究发现这能显著提高训练稳定性。图同构网络和 GEN 的实现均使用由 ReLU 激活的多层感知机，其中包含两个隐藏层和层归一化。这些参数选择确保每个单独的层约有 4.5k 至 5k 个可学习参数。对于具有 30 层、潜在空间大小为 $N = 128$ 的基线模型，总体而言，我们得到的模型约有 700k 个可训练参数。

C 估计远场参数消融实验

ˆ ˆ 我们在图 7 中绘出了从模型输入中移除估计的远场条件（U_∞ 和 C_n）后的结果。我们注意到，远场量的预测质量显著下降。

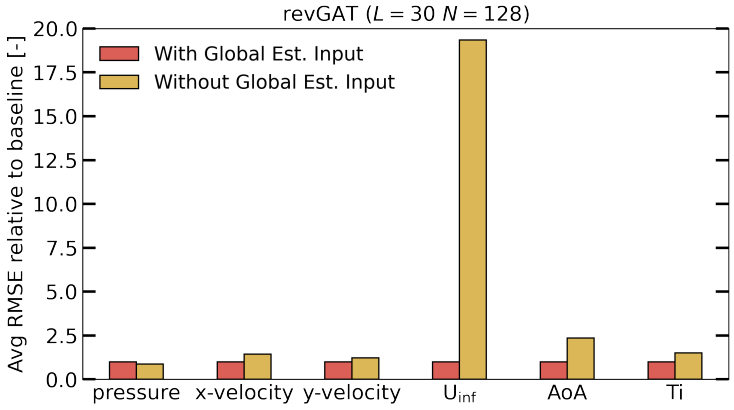


图 7：输入中不使用估计的远场参数时，模型相对于基线模型的性能。

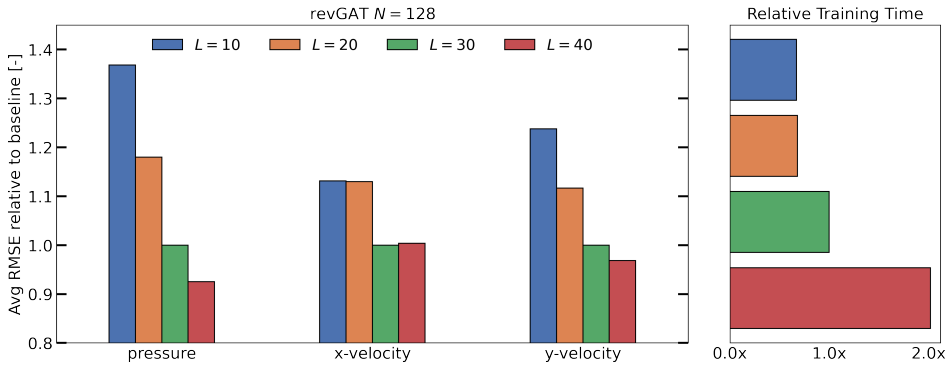
D 深度与宽度研究

图8展示了模型深度对各可逆模型重建性能的影响。图 9展示了不同模型在不同潜空间大小（宽度）下的相对性能。

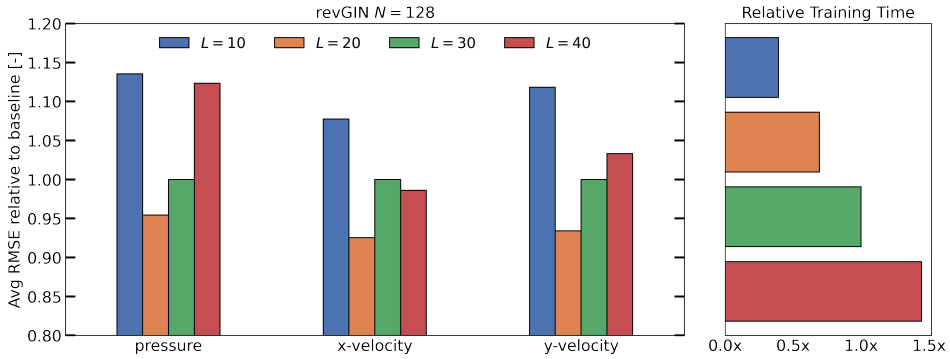
E 补充结果

我们在图 10和图 11中展示了一些补充结果，体现了模型的重建能力，也展示了模型难以准确捕捉的一些配置。值得注意的是，分离流并非总能得到正确重建；这可能是因为数据集中分离流数量不足，也可能是图神经网络架构带来的挑战所致。

(a)



(b)



(c)

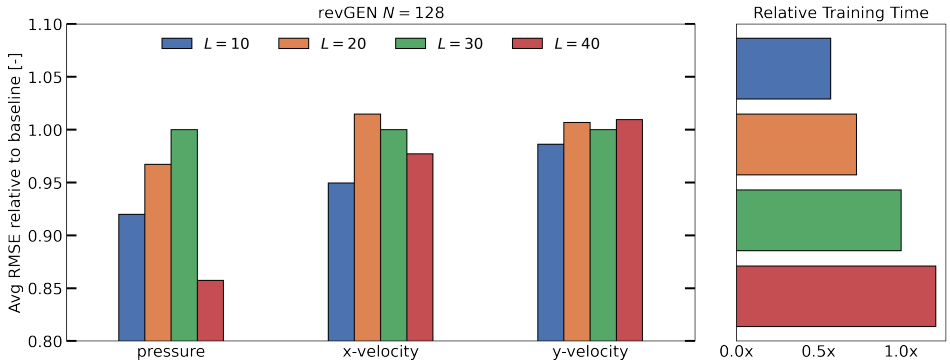
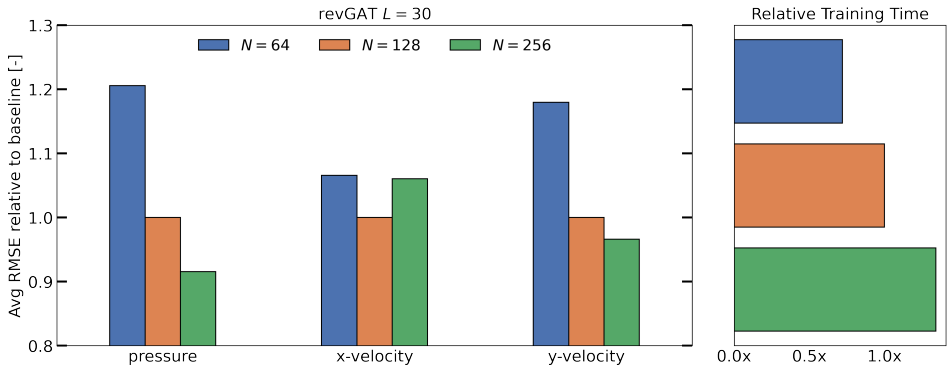
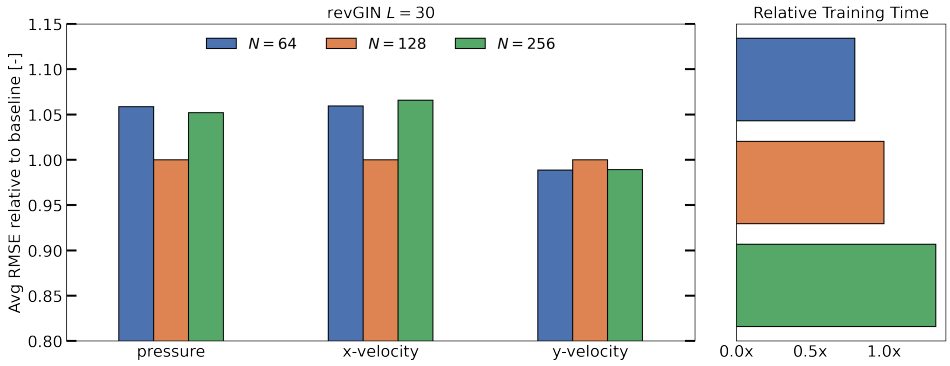


图 8：比较不同层数下深度对重建性能的影响，并与 30 层的基线架构（绿色）进行对比。我们还展示了各深度对应的相对训练时间。

(a)



(b)



(c)

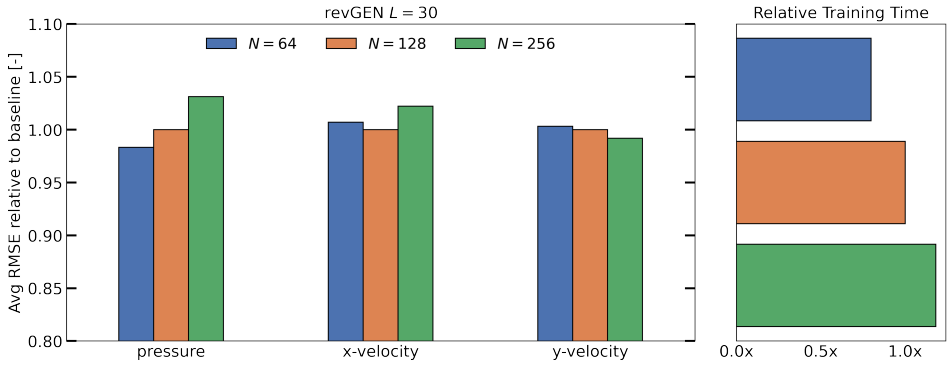


图 9：比较潜在空间大小对不同层重建性能的影响，并与潜在空间大小为 $N = 128$ 层的基线架构（橙色）进行对比。我们还展示了不同宽度下的相对训练时间。

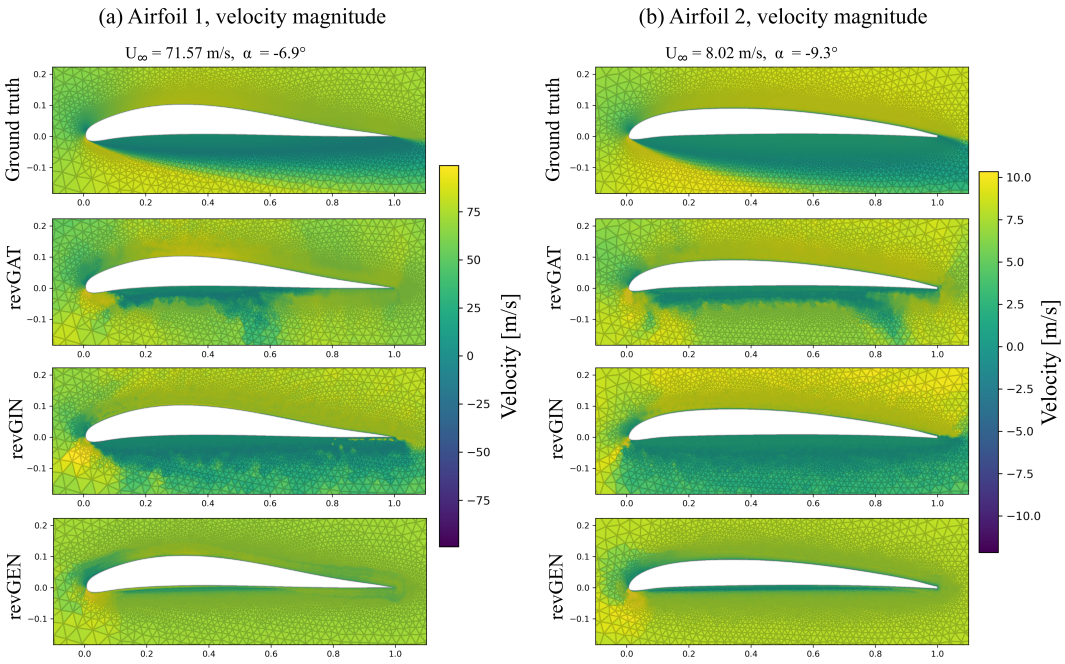


图 10：revGAT、revGIN 和 revGEN 模型在不同大尾流来流配置下，对两个未见过的任意翼型几何形状周围速度场大小的重建结果。每种情况下均显示真实值以供比较。从定性结果来看，revGIN 模型能够更好地捕捉解中的分离流。

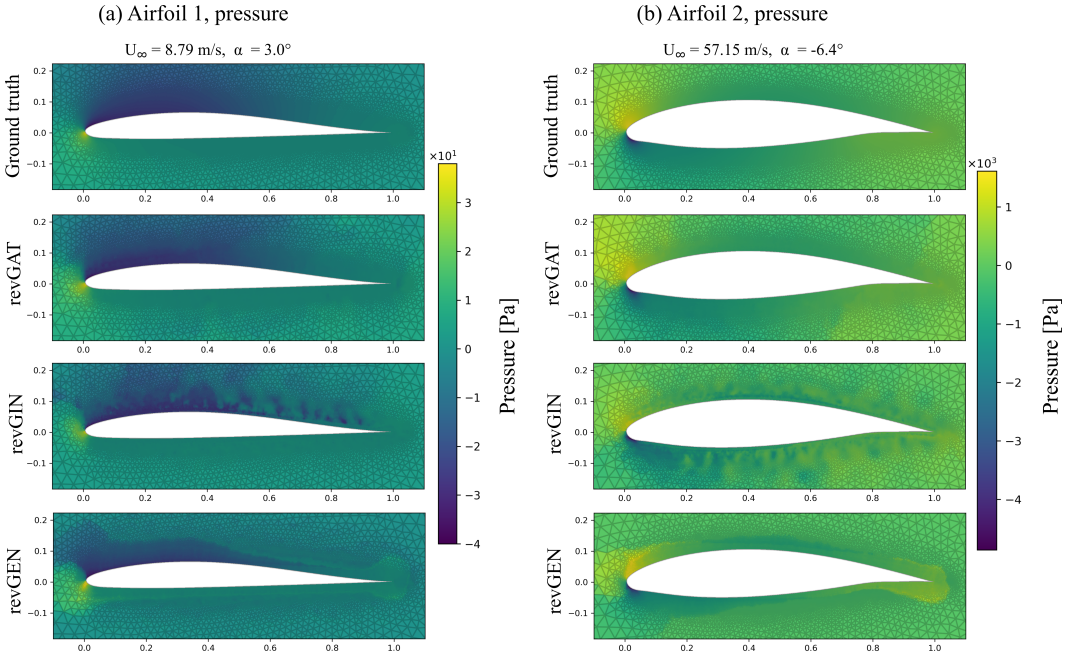


图 11：revGAT、revGIN 和 revGEN 模型在不同来流配置下，对两个未见过的任意翼型几何形状周围压力场的重建结果。每种情况下均显示真实值以供比较。从定性结果来看，revGAT 模型呈现的伪影较少。