标题

采用几何编码和深度学习策略预测超临界翼型的

邓志文[a,*]、王静[b,*]、刘洪生[a]、谢海润[c]、李博凯[a]、张苗[c]、贾廷萌[a]、张毅[a]、王子栋[a]和董彬[d1]

[a] 华为技术有限公司

中国深圳 518129

[b]上海交通大学航空航天学院，中国上海，200240

[c] 上海飞机设计研究院，上海 200436，中国，[d]北京大学机器学习研究中心，北京 100871，中国[*]这些作者对本研究的贡献相同

[1] 通讯作者：电子邮箱：dongbin@math.pku.edu.cn

摘要

为缩短超临界翼型的设计周期，必须快速、准确地求解各种流动条件下超临界翼型周围可压缩流的雷诺平均纳维–斯托克斯方程。尽管深度学习方法能够有效预测流场，但仍需提高敏感区域附近预测结果的准确度，以及其在工程应用中对大规模数据集的泛化能力。本研究设计了一种改进的基于视觉Transformer的编码器—解码器网络，用于预测超临界翼型上的跨声速流动。此外，还设计了四种方法，利用不同的信息点对几何输入进行编码，并比较了这些方法的性能。统计结果表明，这些方法能够准确预测完整流场，平均绝对误差约为 1e-4。为提高激波区域附近的准确度，研究将多级小波变换和梯度分布损失引入损失函数，使通常出现在激波区域附近的最大误差降低了 50%。此外，通过迁移学习在大规模数据集上对模型进行预训练，并在小规模数据集上微调，以提升模型在工程应用中的泛化能力。不同预训练模型所产生的结果表明，迁移学习能够在缩短训练时间的同时实现相当的准确度。

关键词： 跨声速流预测；超临界翼型；几何编码；深度学习。

1. 引言

超临界翼型是现代民用飞机的关键设计部件 [1] ，对其巡航效率、阻力发散和失速行为等空气动力特性有着显著影响。因此，现代民用飞机超临界翼型工业设计过程中的空气动力分析与优化需要反复进行大量数值模拟[2]。雷诺平均纳维–斯托克斯（RANS）建模[3] 是此类模拟的主流工具，但反复迭代计算时应用RANS模型耗时较长。因此，为缩短超临界翼型的设计周期，需要一种能够快速且准确地预测此类翼型周围流场的方法。

近年来，深度学习方法已成为 RANS 模型的一种有前景的替代方案，可快速预测流场 [4] ，并在翼型研究中引起了广泛关注 [5–9]。这些深度学习方法分为两类。第一类将传统的计算流体力学（CFD）求解器与人工智能（AI）方法相结合，能够快速生成高质量的解 [4,5,10]。例如，Singh 等人 [5] 通过基于伴随方法的数据同化和基于人工智能的特征映射，引入了用于预测翼型周围分离流的湍流建模。他们获得的翼型周围平均流场比基准湍流模型得到的结果更符合实验测量。然而，由于该方法涉及迭代过程，其计算时间较长。第二类是数据驱动方法。例如，Liu 等人 [11]设计了一种用于预测跨声速抖振流的混合深度神经网络降阶模型（ROM）。该 ROM 由卷积神经网络（CNN）和卷积长短期记忆神经网络组成，他们利用该模型映射前后时间步的流场。结果表明，由于插值损失，误差会随时间推移而增大，在激波和边界层区域尤为明显。通过使用图神经网络（GNN）提取基于结构网格的流场数据，这一问题得到了缓解 [12–14], ，因为图神经网络框架能够恰当地处理包含边和点的任意网格。Pfaff 等人 [13] 开发了一种名为 MeshGraphNets 的基于图神经网络的框架，用于确定无黏

翼型周围的流场其速度比 CFD 模拟快一至两个数量级。尽管具有这些优势，图神经网络技术尚未成熟，并受到图表示理论、硬件需求以及分布式求解应用的限制[15]。

另一种有望减轻插值损失的方法是网格变换 [],，即将网格从笛卡尔坐标转换为曲线坐标。Wang等人采用网格变换，并使用变分自编码器（VAE）框架和多层感知器（MLP）框架来预测超临界翼型周围的稳态流场 [2]。VAE有效捕获了流场的代表性潜在特征，而MLP则建立了翼型形状与潜在特征之间的关系。平均绝对误差和最大预测误差分别小于0.001和0.02。此外，Chen和Thuerey [15] 利用网格变换技术确定边界层附近的流动细节，并采用U-Net架构获取多种翼型在一系列流动条件下的稳态流场。其结果的平均绝对误差约为6e-4。然而，尽管卷积神经网络已被证明能够有效预测复杂流动，但其对敏感区域的预测准确度以及对更大规模数据集的泛化能力仍有待进一步提升。

视觉变换器（ViT）利用自注意力机制整合大量全局信息并建立长距离关系，近年来已成为计算机视觉领域中广受欢迎的框架。在大规模数据集上预训练的 ViT，在速度—精度权衡方面优于卷积神经网络。因此，本研究设计了一种先进的基于 ViT 的编码器—解码器，用于建立几何信息与物理流场之间的复杂映射。此外，该模型通过在大规模数据集上进行迁移学习，并在小规模数据集上进行微调，以提高其在自由来流条件及涉及新型几何形状的场景中的准确度和泛化能力。

在大多数现有模型中，所有像素都接受同等程度的训练，即不强调局部敏感区域，因此这些模型可能难以捕捉激波附近的显著变化。为克服这一局限性，本研究设计了四种方法，用不同的信息点对几何输入进行编码，这些信息点能够有效表示特征输入，或

强调边界层和激波附近的区域。此外，还基于小波变换或梯度分布开发了一种独特的损失函数，并利用该函数训练模型，以提高其在激波区域附近的预测精度。

本文其余部分安排如下：第 2 节介绍数值方法和深度学习方法。第 3 节展示对比结果并进行讨论。第 4 节给出结论。

2. 方法

2.1. 概述

本研究旨在利用深度神经网络，推断不同自由来流条件下多种超临界翼型周围可压缩流的雷诺平均纳维–斯托克斯解。**图 1**展示了基于深度学习的稳态流场预测策略流程，该问题可视为经典的回归学习任务。给定自由来流条件 I 和几何信息 $\mathcal{G}$，可通过以下四个步骤，使用基于神经网络的模型 f 推断输出流场 $\mathcal{Y}$，即 $\mathcal{Y} = f(\mathcal{G},\mathrm{I})$。

1. 数据生成。 生成了一个包含 500 个超临界翼型的数据集，每个翼型在马赫数为 $Ma = 0.73$ 时约有 50 个攻角。每个样本均包含几何形状、网格和真实流场的信息（第 2.2 节）。

2. 数据预处理与后处理。 如**图 1**所示，输入为翼型的几何信息和自由来流条件，即马赫数、攻角和雷诺数（Re）。通过网格变换来利用结构化网格。具体而言，采用局部单叶变换，将原始物理空间坐标转换为具有曲线坐标线的曲线坐标 [18]，，使曲线坐标中的网格均匀且结构化。同样，曲线坐标空间中的物理流场量通过逆变换重新映射到物理空间坐标。网格变换后，采用多种方法对几何信息进行编码，以选取适用于神经网络的有效特征输入。网格变换和几何信息编码的详细内容见第 2.2 节。

3. 基于人工智能的预测模型。开发了一种改进的基于 ViT 的编码器—解码器架构，用于预测流场。网络的原始输入为几何信息和来流条件，输出为结构化流场的物理量（u 方向速度、v 方向速度和压力）。引入了多种基于小波变换和梯度分布的损失函数，以提高预测精度，尤其是在

激波 附近的区域。训练好的模型预计能够快速预测每个网格单元中的速度和压力分布。

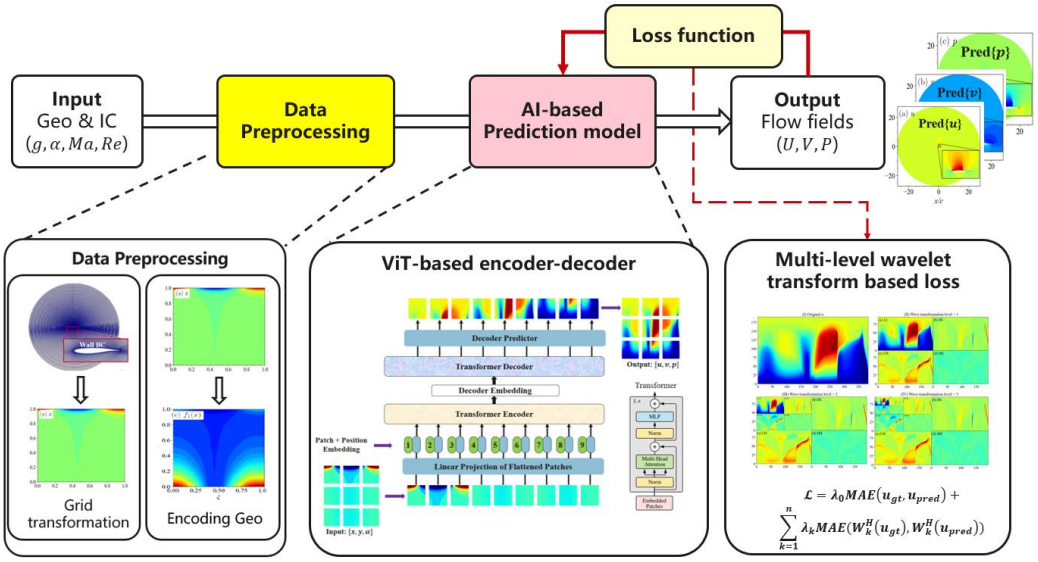


图 1 基于深度学习的流场预测方法流程

2.2. 数据生成

几何信息： 研究对象为应用于工程设计的超临界翼型。为确保几何形状的多样性和可用性，数据生成过程中设置了两项约束：前缘半径必须至少为 0.007，且翼型的最大厚度必须在一定范围内。

网格信息：如**图 2**所示，计算域为半径为 ~30c 的结构化 O 型网格，其中 c = 1.0 为翼型的弦长。翼型表面法向的网格尺寸取决于边界层厚度，在边界层内网格尺寸相当小。网格无关性验证结果表明，翼型周向有 385 个点，法向有 193 个点。

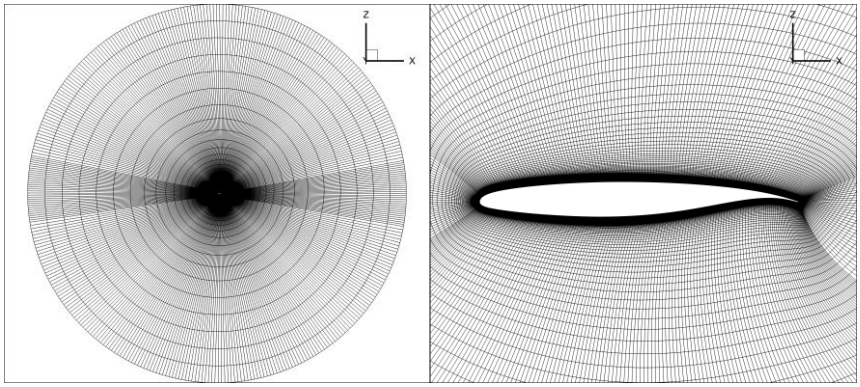


Fig. 2 翼型表面邻近结构化网格的轮廓及放大图 .

流动信息：RANS模拟采用剪切应力输运湍流模型，并使用开源代码 CFL3D 求解。采用守恒律单调迎风中心格式确定单元界面处的状态变量插值，采用 Roe格式进行空间离散化，并采用下三角-上三角对称高斯-赛德尔方法进行时间推进。**图 3**展示了通过CFD模拟和实验测试获得的RAE2822翼型压力分布。可以看出，CFD模拟结果准确，流场等值线表明网格设置能够捕捉主要流动结构。

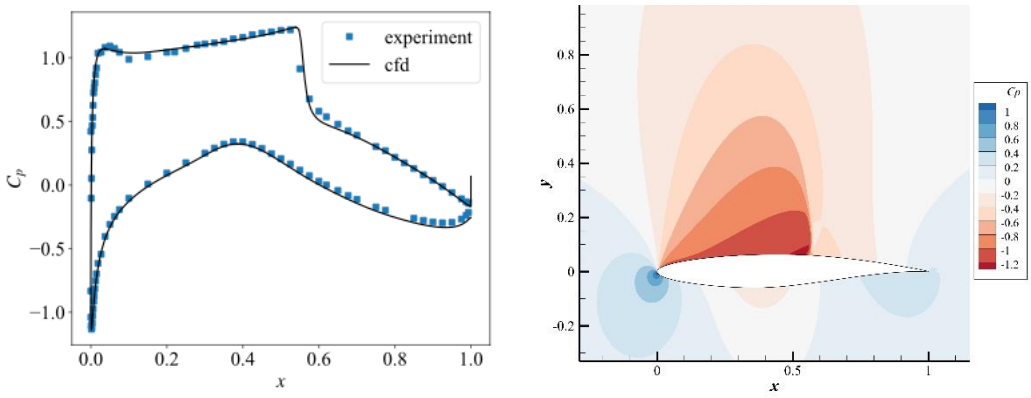


图 3 通过计算流体力学模拟和实验获得的 RAE2822翼型压力分布。

2.3. 几何信息的编码

由于对翼型周围的边界层进行了网格加密，以保留流动细节，因此各区域的网格尺寸有所不同。这种数据结构无法由基于CNN或基于Transformer的神经网络处理，因为这类网络要求输入均匀且结构化。因此，

为了向这些网络提供适用的输入并保留流动信息，需进行单值变换，将几何信息和流动信息从笛卡尔坐标$(x,\ y)$转换为曲线坐标$(\xi,\ \eta)$。通过以下变换，可从原始物理坐标$(\xi,\ \eta)$得到曲线坐标下的均匀结构化数据$(x,\ y)$：[19,20]:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_{i,j} = \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix}_{i,0} + \int \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} \tag{1}$$

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix}^{-1} \tag{3}$$

其中

$$\xi = \frac{(i-1)}{(i_{max}-1)}, \qquad \eta = \frac{(j-1)}{(j_{max}-1)}; \tag{4}$$

i、j 是网格在不同方向上的索引；i_{max}、j_{max} 是这些方向上的节点数，因此，i、j 可分别视为沿贴体曲线方向和垂直于贴体曲线的方向；$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix}_i$，0为翼型轮廓；$\boldsymbol{T}$ 是这两个坐标系之间的变换矩阵。根据式（4），曲线坐标（ξ，η）可重新缩放到均匀的实数域 $[0,1] \times [0,1]$ 。

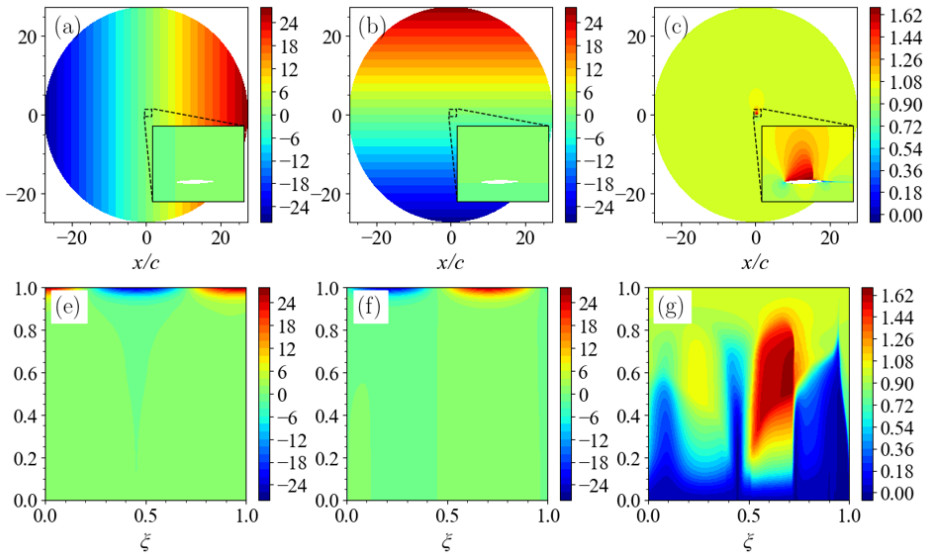


图 4 等值线　网格变换前各种物理量的图（(a) x 图，(b) y 图，以及 (c) u 映射）以及网格变换后（(d) x 映射、(e) y 映射和 (f) u 映射）。

网格变换前后各种物理量的等值线图分别见**图 4**(a)–(b) 和**图 4(**d)–(e)。均匀网格很好地保留了边界层附近的详细流动信息。然而，网格变形会导致笛卡尔坐标与曲线坐标之间出现失真。为解决这一问题，变换矩阵$\boldsymbol{T}$中的四个元素等变形信息 被编码到输入中。

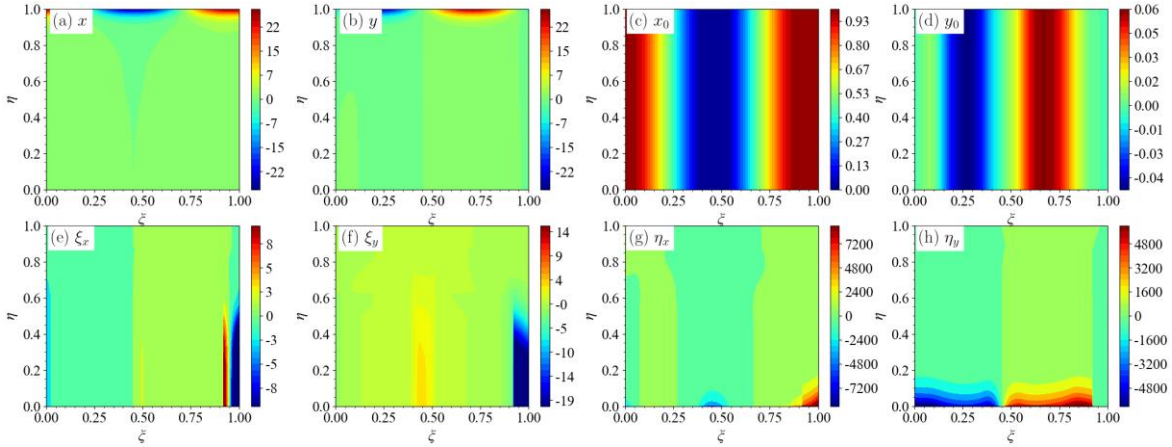


图 5 C　等值线图展示网格变换后的各种物理量：(a) x 图，(b) y 图，(c) x_0 图，(d) y_0 图，(e) ξ_x 图，(f) ξ_y 图，(g) η_x 图，以及 (h) η_y 图。

参照 [16], ，本文实现了三种编码方法，如表 1 所列：方法 A，直接对 (x, y) 进行编码，以保留最原始的网格信息；方法 B，对变换矩阵和翼型轮廓 $(x_{i,0}, y_{i,0}, \xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y)$ 进行编码；方法 C，对原始物理坐标和翼型轮廓 $(x_{i,0}, y_{i,0}, x, y)$ 进行编码，以着重考察翼型轮廓的影响。等值线图见**图 5**。为提高翼型周围流场所占比例并降低远场流所占比例，针对方法 D 设计了以下滤波器：

$$M = e^{(-\sigma)},\ f_M(x) = M \cdot x,\ f_M(y) = M \cdot y \tag{5}$$

其中，M 是滤波器的函数，σ 是与翼型表面的距离。如**图 6**所示，使用该滤波器获得的近场流比例大于未使用该滤波器时获得的比例。

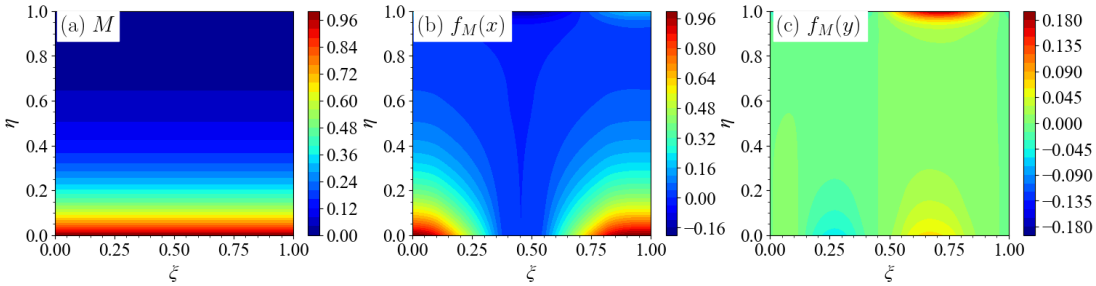


图 6 (a) 滤波器 M 的等值线图；(b) 经滤波 $f_M(x)$ 后的 x 图；以及 (c) 经滤波 $f_M(y)$ 后的 y 图。

Ta表 1 基于神经网络的模型输入编码所用的四种方法

方法	几何信息 $\mathcal{G}$	来流条件 I	通道数，C
A	x, y	AoA	3
B	x_i,0, y_i,0, $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$	AoA	7
C	$x_{i,}{}^0, y_{i,}0, x, y$	AoA	5
D	$M \cdot x, M \cdot y$	AoA	3

2.4. 神经网络架构

用于建立映射关系的深度神经网络模型基于改进的 ViT[17] 编码器—解码器，其架构如**图 7**所示。ViT 采用 Transformer[22] 架构，由 Dosovitskiy 等人 [17] 开发，在自然语言处理和计算机视觉领域取得了出色的成果。

在该架构中，输入特征 $\mathcal{X} \in \mathrm{R}^{H\times W\times C_{in}}$ 首先通过 $Patchify(\mathcal{X}^{H\times W\times C_{in}})$ 操作重塑为一系列二维展平图块 $\mathcal{X}_\mathrm{p} \in \mathrm{R}^{N_p\times (P^2\cdot C_{in})}$，其中 (H, W) 是曲线坐标下的网格分辨率，C_{in} 是输入通道数，(P, P) 是每个图块的分辨率，图块数为 $N_p = HW/P^2$。通过可训练线性投影重构展平图块，以获得恒定的潜向量维度 D，并将位置嵌入线性添加到图块序列中，以保留位置信息。随后，编码器提取有效的潜在特征，解码器则将这些特征转换为流场量。编码器和解码器均包含由注意力 [21] 构成的 Transformer 机制

机制和前馈神经网络。每个 Transformer 编码器均采用交替排列的多头自注意力[21]和多层感知器[21] 模块，并分别在每个模块之前和之后应用层归一化和残差连接。编码器的输出输入到解码器中；解码器采用与编码器相同的架构，其输出则输入到一个 MLP 模块。随后，执行“$Unpatchify$”操作（即“ $Patchify$ ”操作的逆操作），得到最终输出 $\mathcal{Y}$ ，其大小为$H \times W \times C_{out}$。

由于原始 ViT 不适用于回归任务，因此引入以下两项修改以预测流场：首先，移除分块与位置嵌入中的分类标记。其次，使用架构与编码器类似的解码器，取代原始 MLP。采用开源代码 MindSpore 设计并实现基于 ViT 的编码器—解码器。骨干模型可轻松替换为其他神经网络，例如 U-Net [22]。各种模型的性能评估（附录$\boldsymbol{A}$）表明，基于 ViT 的编码器 — 解码器是最佳基线模型。

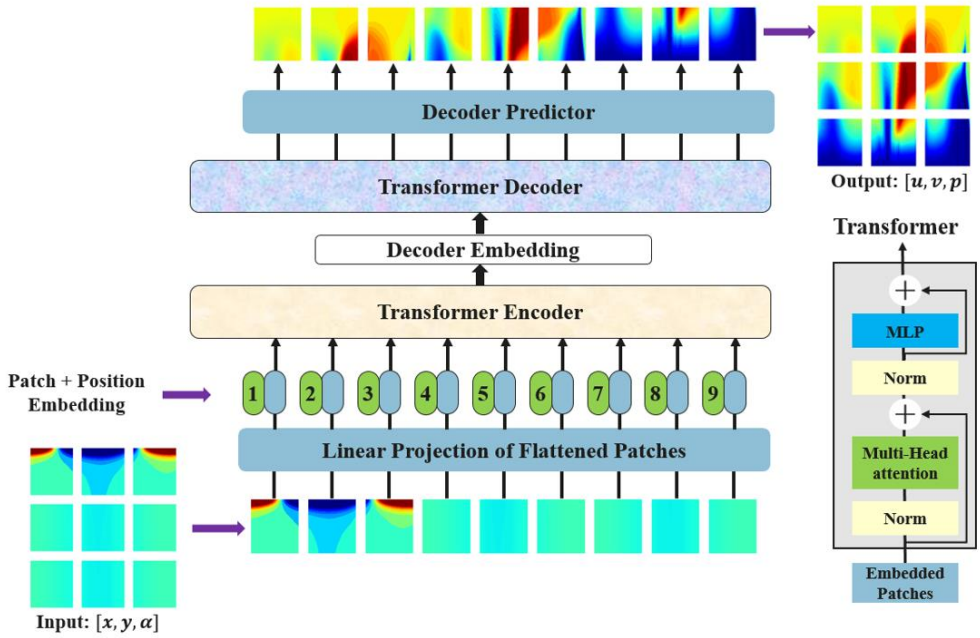


图 7 改进后的基于 ViT 的编码器—解码器架构示意图

2.5. 损失函数

测量　绝对误差（平均绝对误差）通常用于训练神经网络，以预测

翼型上的流场[2,15]。因此， l_1 方程(6)中描述的损失函数被用作本研究的基准损失函数，其中 N_s 表示样本数量。

$$l_1 = \frac{1}{N_s}\sum_{\{i=1\}}^{N_s} MAE(\mathcal{Y}_i^{gt}, \mathcal{Y}_i^{pred}) = \frac{1}{N_s}\sum_{\{i=1\}}^{N_s} \left|\mathcal{Y}_i^{gt} - \mathcal{Y}_i^{pred}\right| \tag{6}$$

上述损失函数在整个流场中都能取得令人满意的结果，因为它对流场中的所有网格节点都赋予了相同的注意力机制。然而，流场不同区域的物理量变化程度各异，因此必须赋予不同的重要性权重。例如，与远场区域相比，边界层附近的速度和压力变化更大，这意味着速度和压力在前者区域比在后者区域更重要。超临界翼型周围的流场通常涉及激波或激波与边界层相互作用，并呈现剧烈变化。很少有研究者尝试提高这些局部区域的预测精度。因此，在本研究中，剧烈变化被视为流场的高频信号，并将两个损失函数纳入 l_1 损失函数中，即多级小波变换（l_{wt}）和梯度分布（l_{grad}）的损失函数。

2.5.1 多级小波变换

为定义 l_{wt}，采用二维离散小波变换（DWT）[23] 来学习高频分量，如式（7）所示”

$$l_{wt,k} = \frac{1}{N_s}\sum_{\{i=1\}}^{N_s} \left|\psi^H(\psi_{k-1}^L(\mathcal{Y}_i^{gt})) - \psi^H(\psi_{k-1}^L(\mathcal{Y}_i^{pred}))\right| \tag{7}$$

其中， ψ 表示离散小波变换。$l_{wt,\ k}$ 表示第 k层小波变换的损失，其中 k 表示离散小波变换操作的次数。经过离散小波变换后，可得到四个子带：低频分量（LL），以及水平方向（HL）、垂直方向（LH ）和对角线方向（HH ）的高频分量。因此， ψ^H 表示离散小波变换后的高频分量，ψ_{k-1}^L 表示经过 k 次离散小波变换后得到的低频分量。|.| 表示差异的范数；本研究同时考虑了$l_{1,\ norm}$ 和$l_{2,\ norm}$ 。采用四个卷积滤波器实现二维离散小波变换操作[24]。以哈尔小波[25] 为例，与四个子带对应的四个卷积滤波器为

$$f_{LL}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix},\ f_{LH}=\begin{bmatrix}-1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix},\ f_{HL}=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix},\ f_{HH}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix}, \tag{8}$$

流向速度u的离散小波变换前三级等值线图如**图 8**(II)、(III)和(IV)所示。激波的频率反映在 HL 分量中，而边界层的细节反映在 LH 分量中。与HL 和 LH 分量相比， HH 分量的数值较小，且其物理表征不明确。随着离散小波变换层级的增加，流场中的高频信号能够得到更好的捕捉和解析。

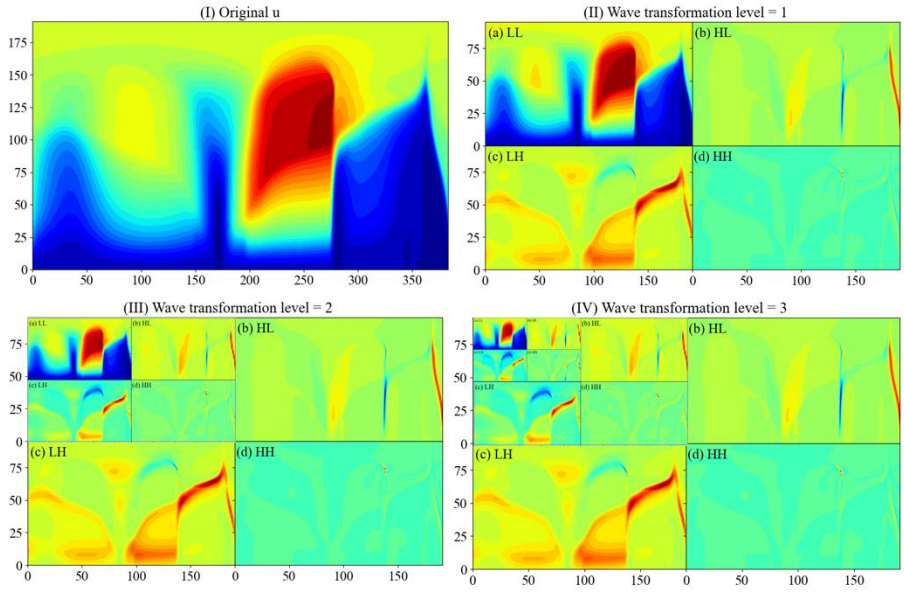


图 8 使用不同级别的小波变换获得的不同子带的等值线图

变换

实施离散小波变换后，结合 l_{wt} 得到总损失函数的最终形式，如下所示:

$$l_{total,wt}=\lambda_0 l_1+\sum_{k=1}^{n_k}\lambda_k l_{wt,k} \tag{9}$$

其中， n_k 表示耦合层级的数量， λ_0 和 λ_k 分别表示第 k 层的l_1 损失和小波变换损失的权重系数。这些系数是可训练的，可通过多任务损失优化[26], 进行学习，如式（10）所示，其中 $loss_i$表示 i_{th} 损失项， λ_i 表示相应的权重系数。采用$l_{total,\ wt}$ 训练的基于 ViT 的编码器—解码器的流程如**图 9**所示。

$$l_{total,wt} = \sum_{i=0}^{n} \left(\frac{loss_i}{2\lambda_i^2} + \log(1+\lambda_i^2)\right) \tag{10}$$

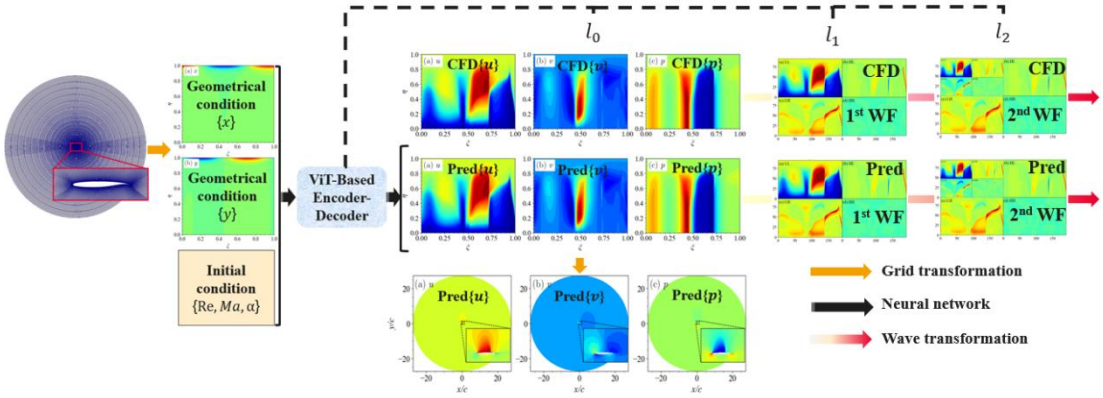


图 9 使用 l_{total}训练的wt基于 ViT 的编码器—解码器流程。

2.5.2 梯度分布

项 l_{grad} 表示为:

$$l_{grad} = \frac{1}{N_s} \sum_{\{i=1\}}^{N_s} |g(y_i^{gt}) - g(y_i^{pred})| \tag{11}$$

其中， g 表示（ξ, η）空间中的梯度。 ξ 和η 方向上的梯度可通过中心差分法获得。例如，流向速度的表达式如下:

$$u_\xi(i,j) = \frac{u(i+1,j) - u(i-1,j)}{2}, u_\eta(i,j) = \frac{u(i,j+1) - u(i,j-1)}{2} \tag{12}$$

其中， u_ξ 和 u_η 分别表示 ξ 和η 方向上的速度梯度。 u_ξ 和 u_η 的等值线图见**图 10**。可以看出， u_ξ 和u_η 的空间分布与离散小波变换的HL和LH分量相似，这表明梯度损失能够从流场中提取高频信息。总损失函数表示为式（13）。权重系数可采用与式（10）相同的方式进行训练，使用$l_{total,\ grad}$ 训练的基于 ViT 的编码器—解码器的流程如**图 11**所示。

$$l_{total,wt} = \lambda_0 l_1 + \lambda_g l_{grad} \tag{13}$$

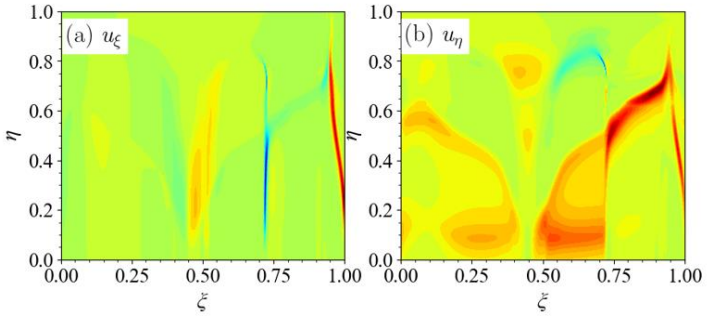


图 10 ξ 和η 方向上的速度梯度等值线图。

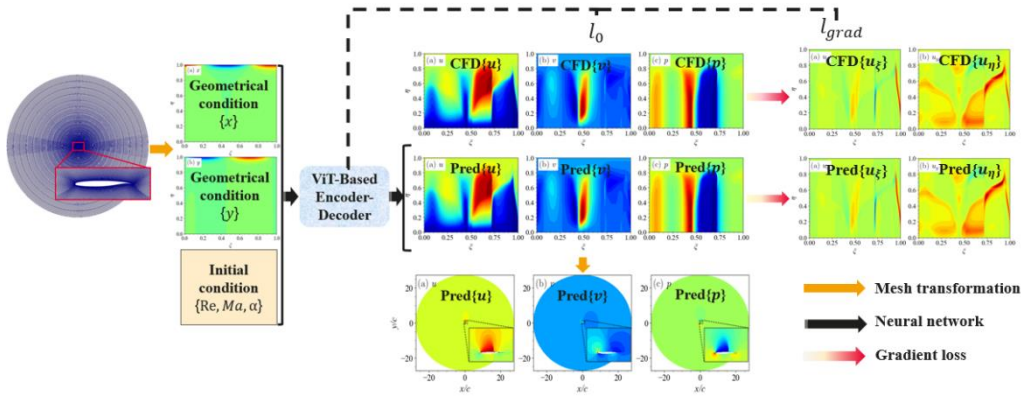


图 11 使用$l_{total,\ grad}$训练的基于 ViT 的编码器—解码器的流程。

2.6 评估指标

以下三个误差指标用于评估模型性能 .

(1) l_{1_avg}：每个样本中各流场的输出数据与原始数据之差，定义为

$$l_{1_avg} = \frac{1}{N_{test}} \sum_{\{i=1\}}^{N_{test}} MAE(y_i^{gt}, y_i^{pred}) \tag{14}$$

(2) $l_{1_\text{最大}_avg}$：平均 l_{1_max} 误差，定义为

$$l_{1_\max_avg} = \frac{1}{N_{test}} \sum_{\{i=1\}}^{N_{test}} l_{1_max,i} = \frac{1}{N_{test}} \sum_{\{i=1\}}^{N_{test}} MAXE(y_i^{gt}, y_i^{pred}) \tag{15}$$

(3) $l_{1_max_max}$：测试样本的最大 l_{1_max} 误差，定义为

$$l_{1_max_max} = MAXE\{MAXE(y_i^{gt}, y_i^{pred}) \mid i = 1, \ldots, N_{test}\} \tag{16}$$

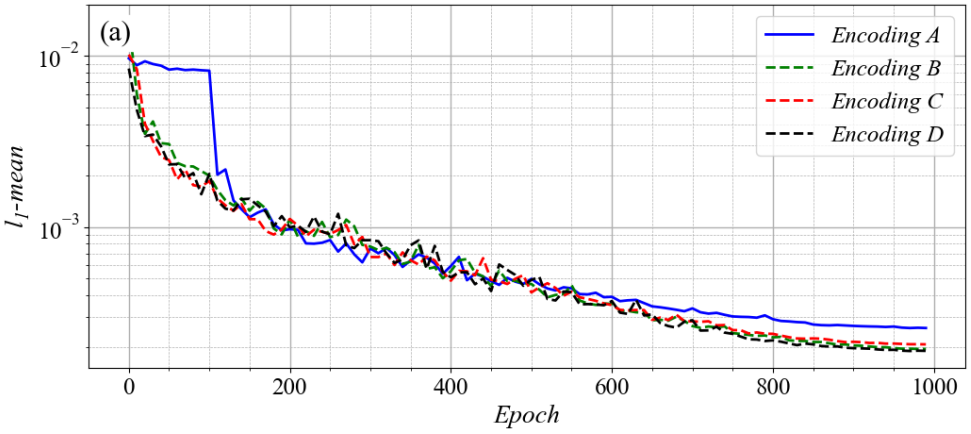
其中 MAE 分别为平均绝对误差和最大绝对误差。

3. 结果与讨论

评估所提出的方法在一系列流动条件下估算各种翼型周围速度场和压力场的能力。首先，根据不同编码方法提取有效输入特征的能力，对其性能进行比较。随后，采用不同的损失函数来提高预测精度，尤其是对激波的预测精度。

3.1. 编码方法比较

表1中列出的四种编码方法用于获取有效的几何信息。基于这些编码方法的 ViT 编码器–解码器的测试 l_{1_avg} 误差和 $l_{1_\max_avg}$ 误差随训练轮次变化的曲线如**图12**所示。 l_{1_avg}、$l_{1_\text{最大}avg}$和 $l_{1_max_max}$ 的收敛值汇总于**表2**。测试误差在前400个训练轮次中迅速下降，随后从第400轮到第800轮稳步下降。编码方法A的初始下降曲线较小，这是因为初始学习率足够小，可防止训练发散。经过~1，000个训练轮次后，测试误差 l_{1_avg} 和 $l_{1_\max_avg}$ 分别收敛至~10^{-4} 和~10^{-2}的量级。



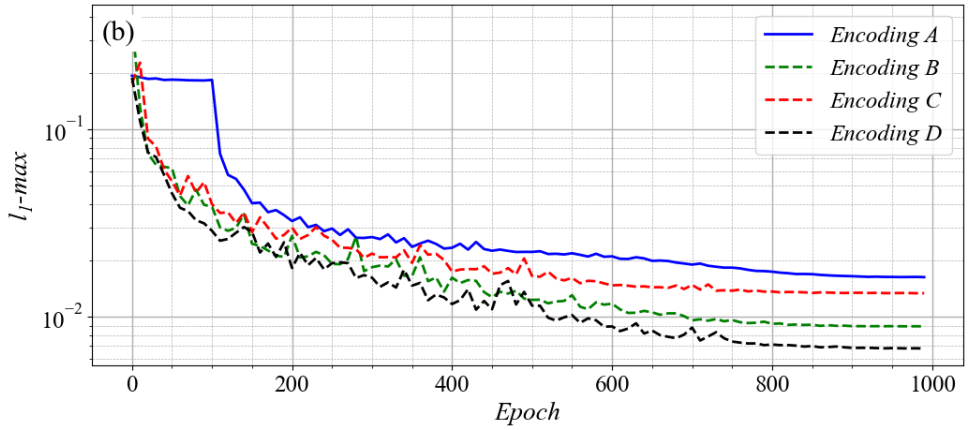


图12 各种编码方法的测试误差（a） l_{1_avg} 和（b）$l_{1_\max_avg}$ 曲线**表2**使用各种编码方法的基于 ViT 的编码器—解码器的l_{1_avg}、 $l_{1_max_avg}$和 $l_{1_max_max}$ 比较

方法	l_{1_avg}	$l_{1_max_avg}$	$l_{1_max_max}$
A	0.000258	0.0163	0.0981
B	0.000210	0.01750	0.0956
C	0.000206	0.01341	0.08231
D	0.000187	0.0071	0.0687

采用各种编码方法预测得到的流场中， l_{1_avg} 和$l_{1_\text{最大}}$误差的分布统计如**图13**所示。**图13**(a)显示，大多数样本的 l_{1_avg} 误差小于4e-4，其中方法A的表现最差（即误差最大）。方法D的表现最佳（即$l_{1_\text{最大}}$误差最小）。在**图13**(b)中可以观察到两个明显的峰值，代表激波的出现。总体而言，方法D以最小误差捕捉激波区域：其$l_{1_\text{最大_平均}}$误差和最大误差$l_{1\ \text{最大最大}}$分别比其他方法小58%和40%。

此外，与方法 A 相比，方法 B 和 C 的 l_{1_avg} 误差较小，而$l_{1_\text{最大_平均}}$误差略大。这表明，考虑额外的几何信息（例如雅可比矩阵或翼型轮廓）可以提高整体流场的准确度，但无法降低若干局部区域中的最大误差。方法 D 达到

最小$l_{1_\text{最大_平均}}$误差，这得益于近场流范围的扩大，从而帮助神经网络学习边界层和激波附近差异最大的区域。

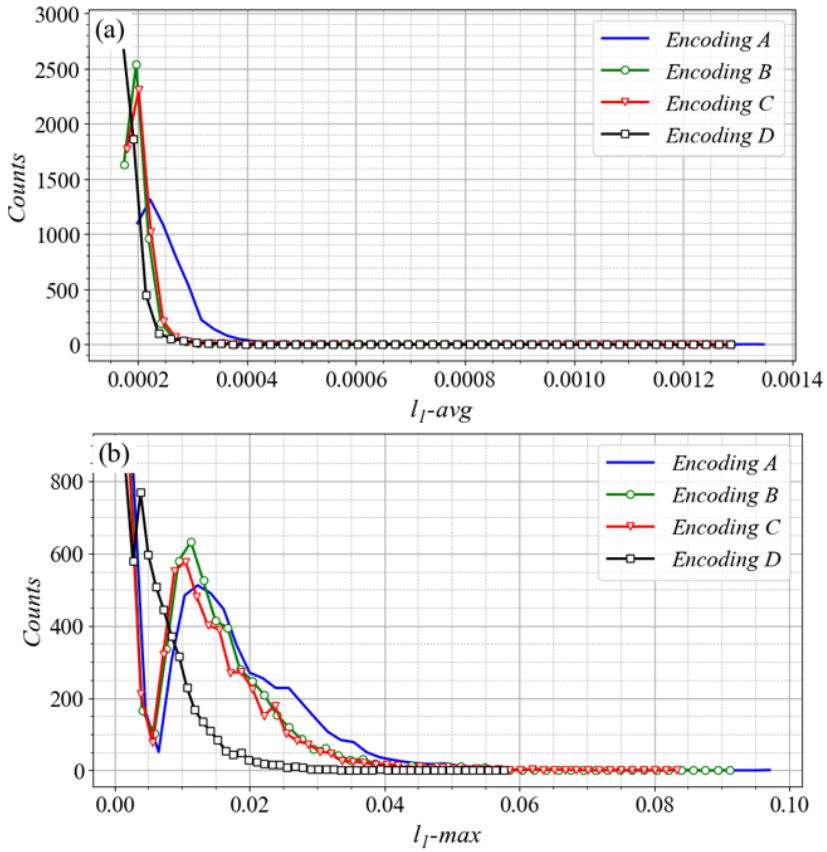


图 13 预测沿表面流场中（a） l_{1_avg} 和（b）$l_{1_\max_avg}$ 的分布统计

随机选取了四个测试样本，其中三个包含激波现象，以展示模型的性能。图 14–19 展示了采用不同编码方法（A、C 和 D）预测的流场，以及相对于真实值的对应 l_1 误差。由于方法 B 预测的流场与方法 C 的预测结果相当，因此未予展示。没有激波的流场彼此相似，且几乎所有区域的预测结果都相近。含有激波的流场，其预测等值线图样与计算流体力学结果一致，但激波附近可以观察到明显差异。这是合理的，因为神经网络比起高频信号，更容易捕捉低频信号。总体而言，流

场 所有方法预测的结果都与真实数据一致。

与采用方法 A 和 C 得到的结果相比，方法 D 的结果与计算流体力学结果更加吻合，并且能够更准确地捕捉激波附近的详细流动结构。因此，方法 D 的 $l_{1_\text{最大}}$ 误差最小，这表明有效的特征选择能够提高高频区域的预测精度。方法 D 的通道数与方法 A 相同，这表明方法 D 不会产生额外的计算成本。

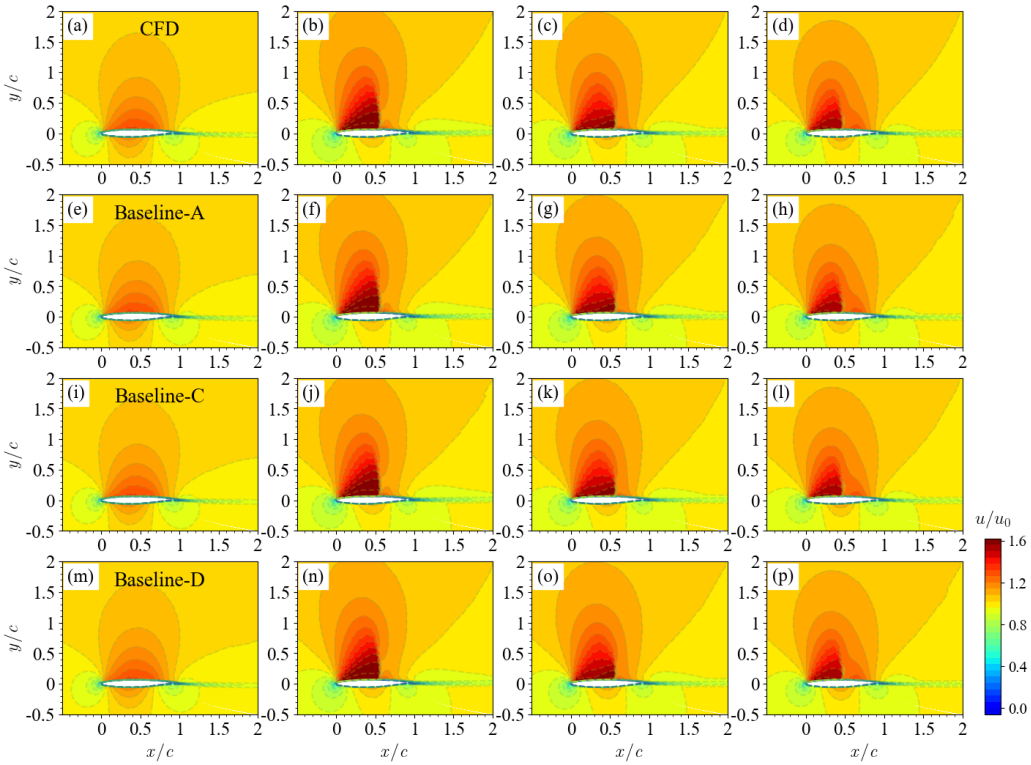


图 14采用 (a)–(d) 计算流体力学方法确定的不同翼型的无量纲流向速度等值线图

（真实值）；（e）–（h）编码方法A；（i）–（l）编码方法 C；以及（m）–（p）编码方法 D。

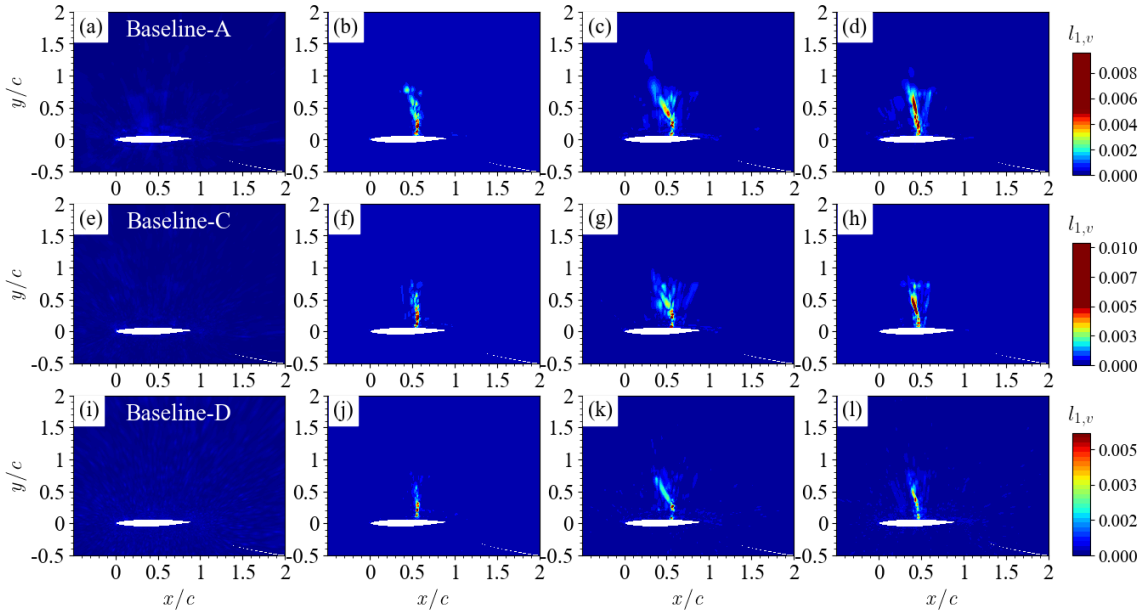


图 15 等值线 使用 (a)–(d) 确定的各种翼型流向速度的 l_1 误差图等值线图

编码方法A； （e）–（h）编码方法 C；以及（i）–（l）编码方法 D。

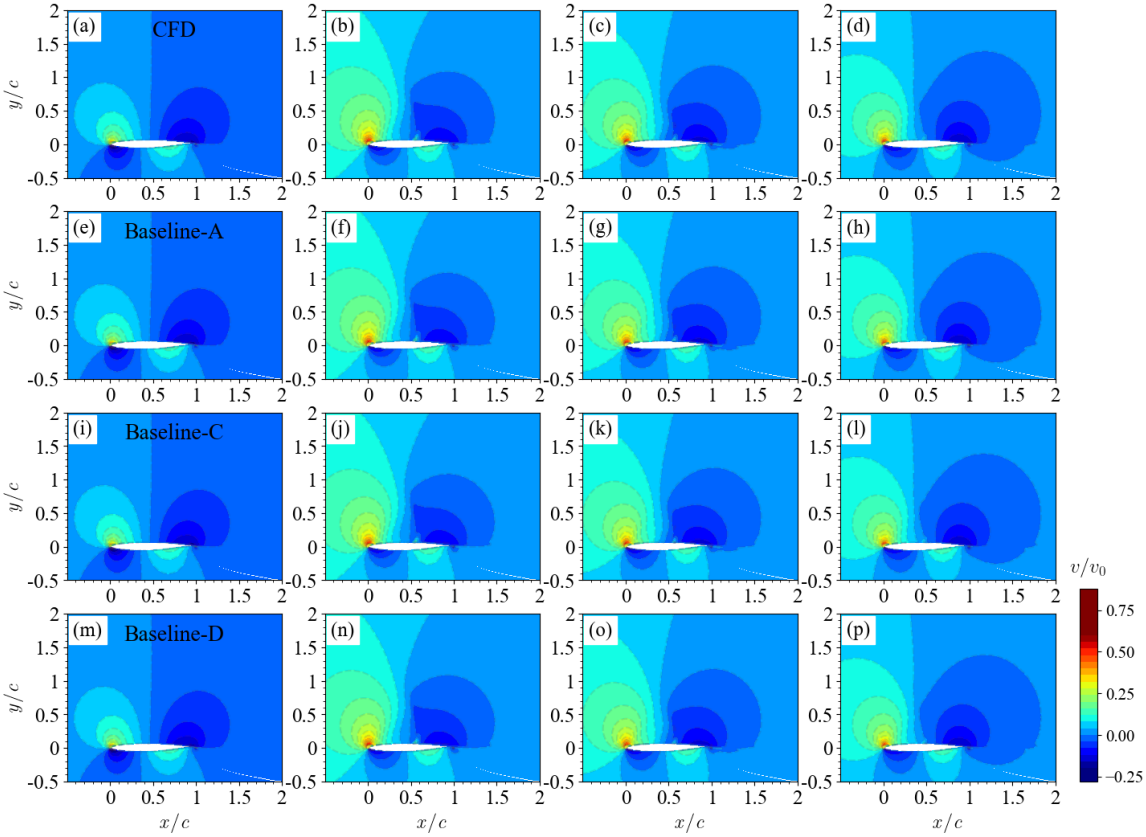


图 16 等值线 使用 (a)–(d) 计算流体力学确定的各种翼型无量纲法向速度等值线图

（真实值）； （e）–（h）编码方法A； （i）–（l）编码方法 C；以及（m）–（p）编码方法D .

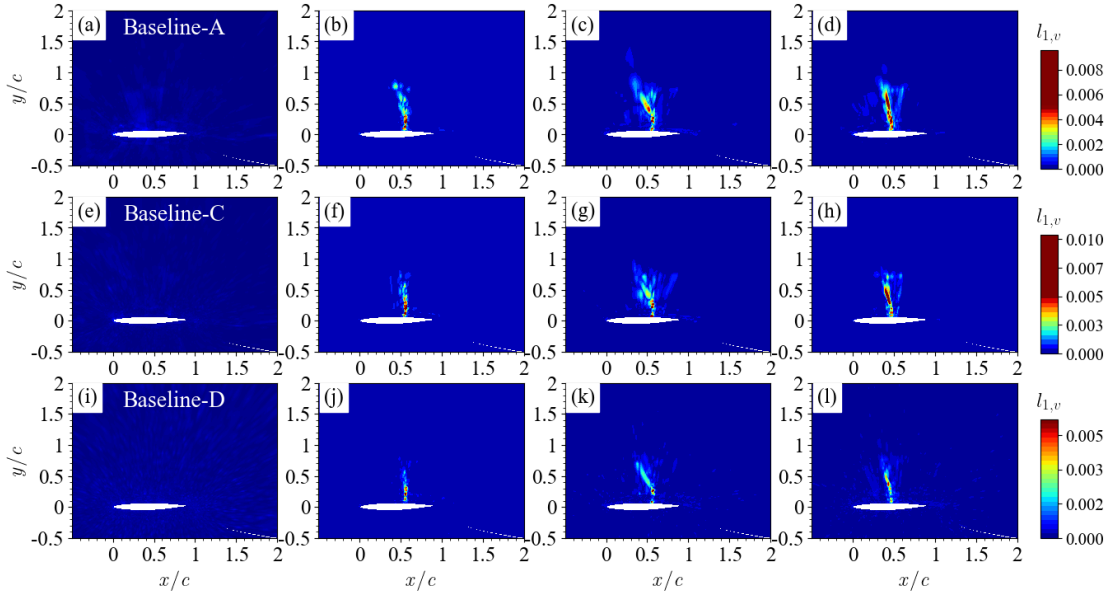


图17 等值线 图，展示使用（a）–（d）编码确定的各种翼型的法向速度 l_1 误差分布方法A；（e）–（h）编码方法 C；以及（i）–（l）编码方法D。

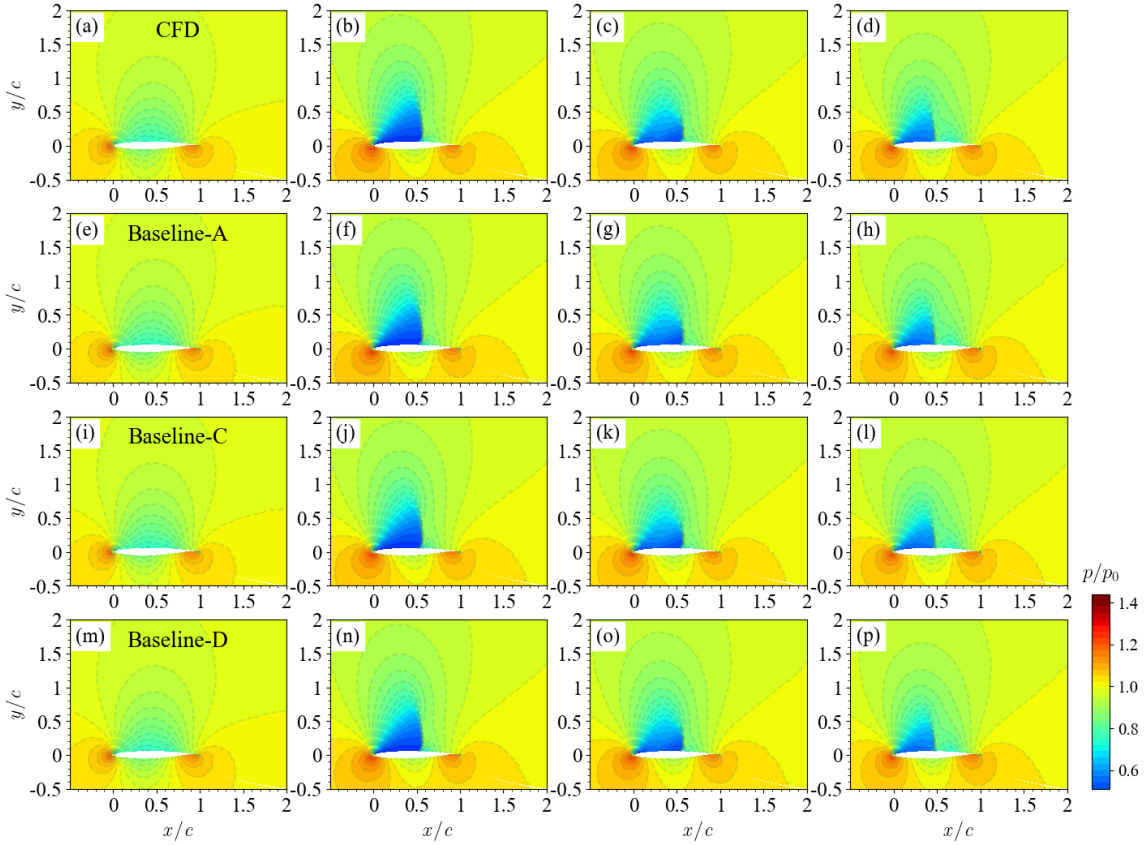


图18 等值线 图，展示使用（a）–（d）计算流体力学（真实值）；（e）–（h）编码方法A；（i）–（l）编码方法 C；以及（m）–（p）编码方法D确定的各种翼型的无量纲压力。

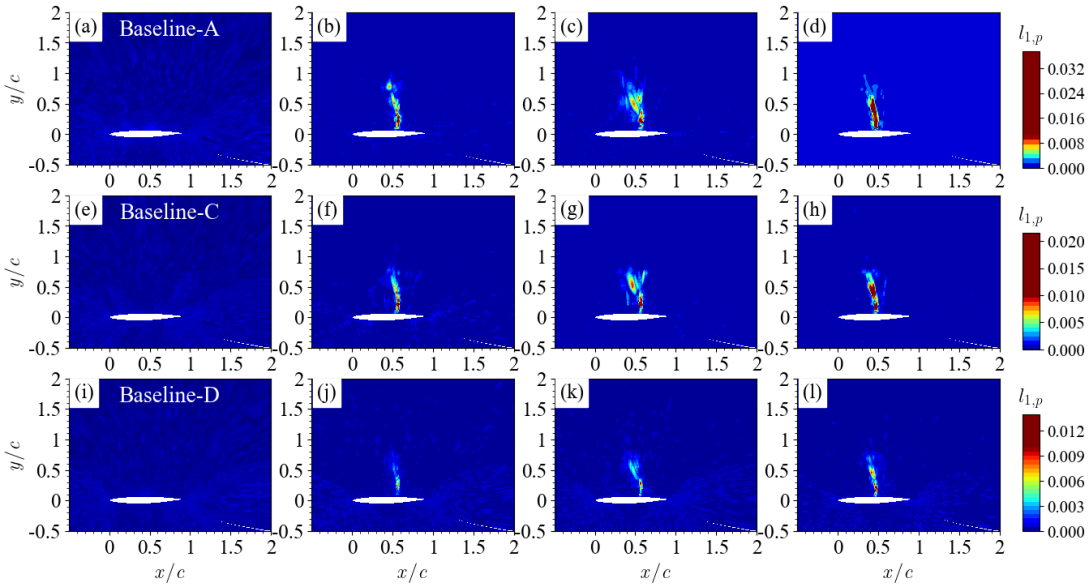


图19 等值线图 l_1 采用(a)–(d)编码方法A、不同翼型压力误差图

；(e)–(h)编码方法 C；以及(i)–(l)编码方法 D。

3.2. 损失函数的比较

尽管采用不同编码方法的策略能够有效预测整体流场，但激波区域附近的准确度仍有待提高。本节将评估第 2.5 节中介绍的两种损失函数。

采用不同编码方法时，各种损失函数的 l_{1_avg}、 $l_{1_\text{最大}_avg}$ 和 $l_{1_max_max}$ 误差如**表 3**所示。加入梯度损失或小波损失后，四种编码方法的误差均有所降低。正如预期，$l_{1_\text{最大}_avg}$ 误差的降幅最大，因为这种最大误差能够有效捕捉激波区域。改进后的损失函数使方法 A、B 和 C 的 $l_{1_\text{最大}_avg}$ 误差降低了 50%，使方法 D 的该误差降低了 30%。这表明，改进后的损失函数提高了整体流场及若干局部区域的预测精度，尤其是在涉及激波现象的情况下。

$l_{1_max_max}$的降低程度（即所有样本中的最大误差）在方法 A、B、C 和 D 之间有所不同，这表明神经网络能够对单个离群值赋予适当的注意力。

表 3 各种损失函数的比较

方法	损失函数	l_{1_avg}		$l_{1_max_avg}$		$l_{1_max_max}$	
A	l_1	0.000258	-	0.0163		0.0981	
	$l_1 + l_{grad}$	0.000186	27.9%	0.0083	49.1%	0.0884	9.9%
	$l_1 + l_{wt}$	0.000194	24.8%	0.0080	50.9%	0.0770	21.5%
B	l_1	0.000210	-	0.01750		0.0956	
	$l_1 + l_{grad}$	0.000169	19.5%	0.00636	63.7%	0.0338	64.6%
	$l_1 + l_{wt}$	0.000180	14.3%	0.00517	70.5%	0.0410	57.1%
C	l_1	0.000206	-	0.01341		0.08231	
	$l_1 + l_{grad}$	0.000167	18.9%	0.00538	59.9%	0.0569	30.9%
	$l_1 + l_{wt}$	0.000187	9.2%	0.00592	55.9%	0.0321	61.0%
D	l_1	0.000187	-	0.00714		0.0687	

$l_1 + l_{grad}$	0.000162	13.6%	0.00384	46.2%	0.0475	30.8%
$l_1 + l_{wt}$	0.000171	8.8%	0.00430	39.7%	0.0612	10.8%

为探究不同损失函数的影响，我们进一步考察预测流场，并以方法 B 为基准（因为方法 B 的差异最大）。总体而言，提高小波变换的阶数会增加计算成本，其代价可能超过损失最小化带来的收益。因此，本研究仅采用一阶（小波损失 1）、二阶（小波损失 2）和三阶（小波损失 3）小波变换。图 20 展示了各种损失函数对应的 l_{1_avg} 和 $l_{1_\max_avg}$ 误差随训练轮次的变化情况。添加梯度损失或小波损失后，$l_{1_\max_avg}$ 误差降低了一个数量级；其中，二阶小波变换损失效果最显著，因为其 $l_{1_\max_avg}$误差最低。

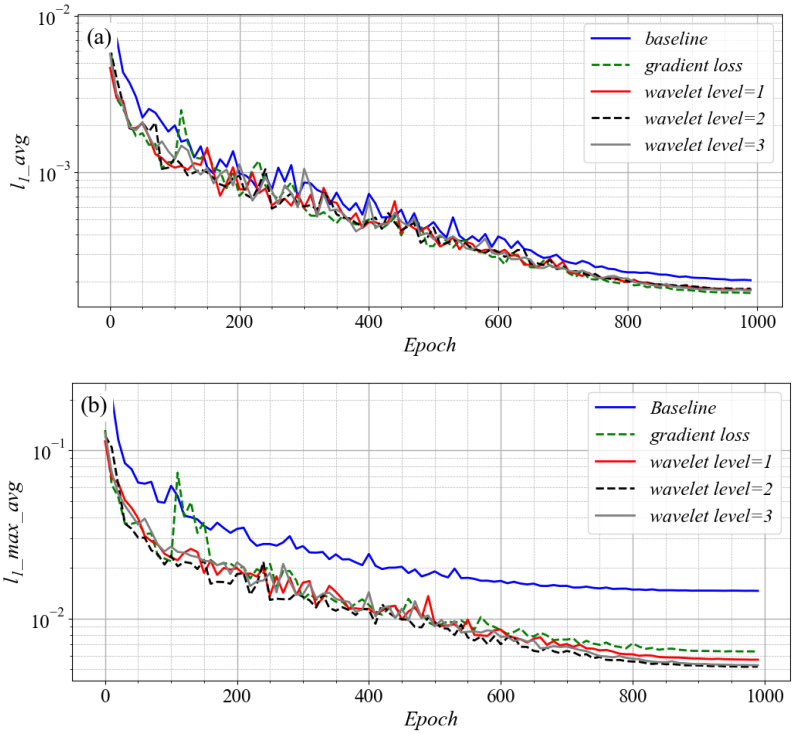


图 20 (a) 使用各种损失函数时，不同损失函数相对于训练轮次的 l_{1_avg} 误差和 (b) $l_{1_\max_avg}$ 误差

分布统计显示了使用不同损失函数预测的流场的 $l_{1_\text{最大}}$ 误差，见**图21**。基线中大多数样本的 $l_{1\ \text{最大}}$ 误差_根据激波现象分布在两个区间（[0, 0.0035], [0.0075， 0.03]）内。加入梯度损失或小波损失后，误差减小，大多数值位于区间 [0, 0.0065] 内。此外，由于小波损失的 l_{1_avg} 误差和 $l_{1_\max_avg}$ 误差更低，其效果略优于梯度损失。

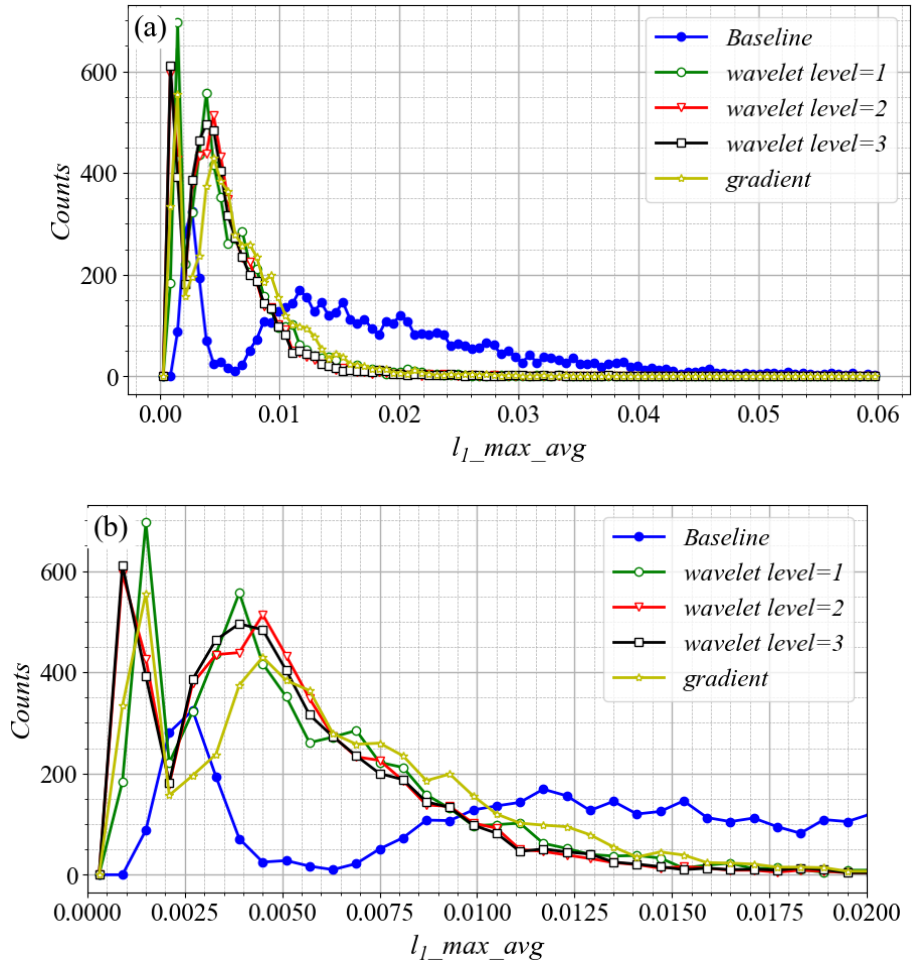


图21 （a）预测流场的 $l_{1_\max_avg}$ 误差分布统计总体图和（b）局部放大图（密度，通用分箱）

随机选取四个测试样本，以展示不同损失函数的性能。采用不同编码方法（A、C 和 D ）预测的流场及其相对于真实值的误差，分别见**图 22–27**。可以看出，即使对于

包含激波的复杂流动场景，速度场和压力场的细节也得到了准确预测。无激波流场的预测精度令人满意。对于含有激波的流场，与计算流体力学结果相比，激波附近区域仍存在差异。然而，加入梯度损失或小波损失后，最大值 l_1 误差从 0.04 降至 0.02 或 0.01；这表明，与不采用这些损失函数相比，采用其中任一种损失函数都能更精确地捕捉激波区域。总体而言，在损失函数中引入流场的高频分量，可降低若干局部区域的最大误差，例如降低激波附近速度和压力预测的最大误差。

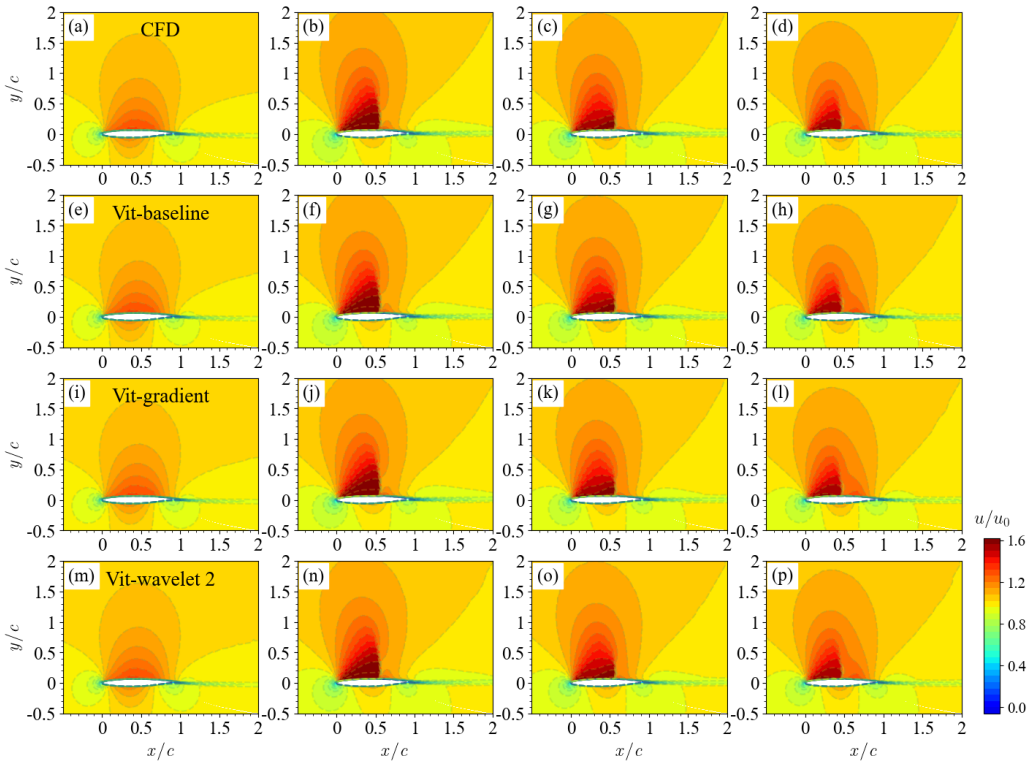


图 22 采用以下方法确定的不同翼型的无量纲流向速度等值线图：(a)–(d) 计算流体力学；(e)–(h) 使用 l_1 损失训练的 ViT 模型；(i)–(l) 使用梯度损失训练的 ViT 模型；以及 (m)–(p) 使用二级小波损失训练的 ViT 模型。

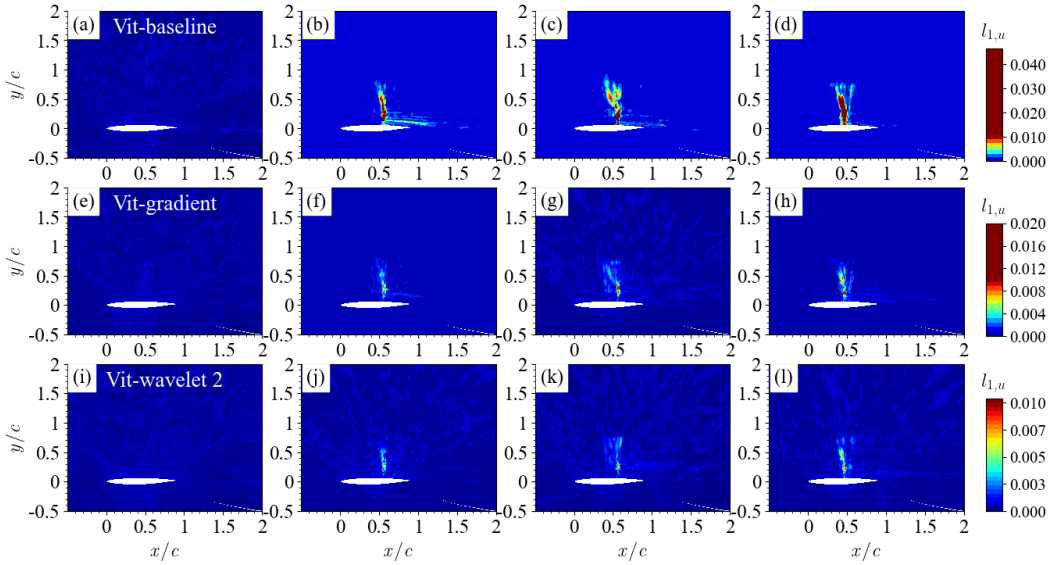


图 23 使用 (a)–(d) 计算流体力学确定的各种翼型流向速度 l_1 误差图等值线图；

（e）–（h）使用 l_1 损失训练的ViT模型；（i）–（l）使用梯度损失训练的ViT模型；以及（m）–（p）使用二级小波损失训练的ViT模型。

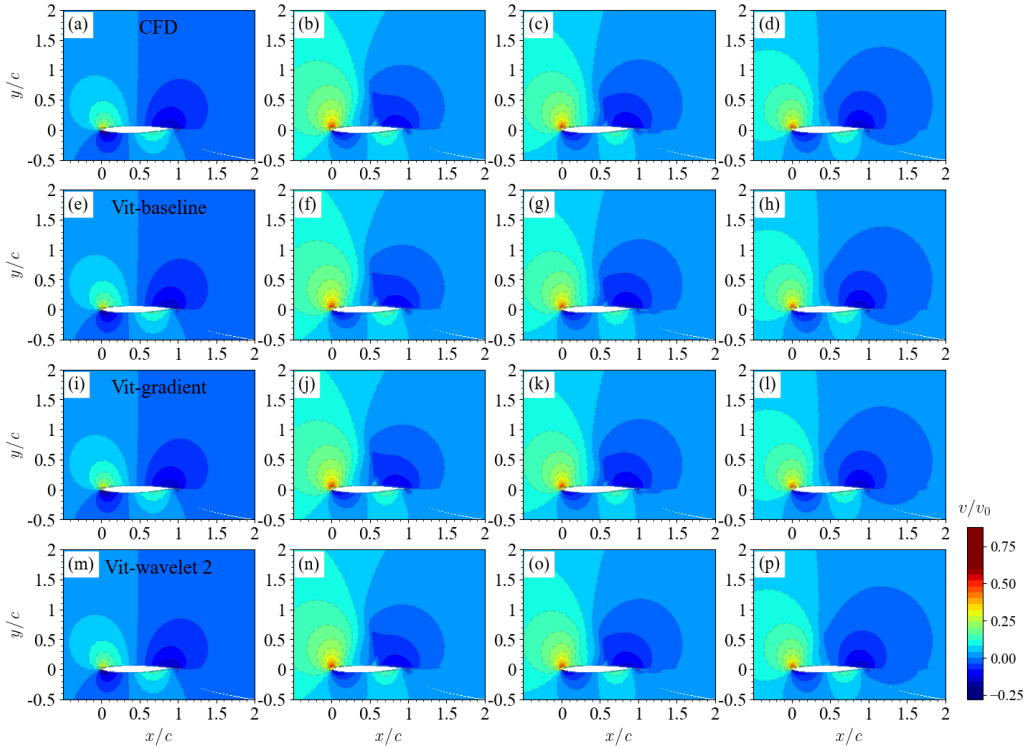


图 24 使用 (a)–(d) 计算流体力学确定的各种翼型无量纲法向速度等值线图；

(e)–(h) 使用 l_1 损失训练的 ViT 模型；(i)–(l) 使用梯度损失训练的 ViT 模型；以及 (m)–(p) 使用二级小波损失训练的 ViT 模型。

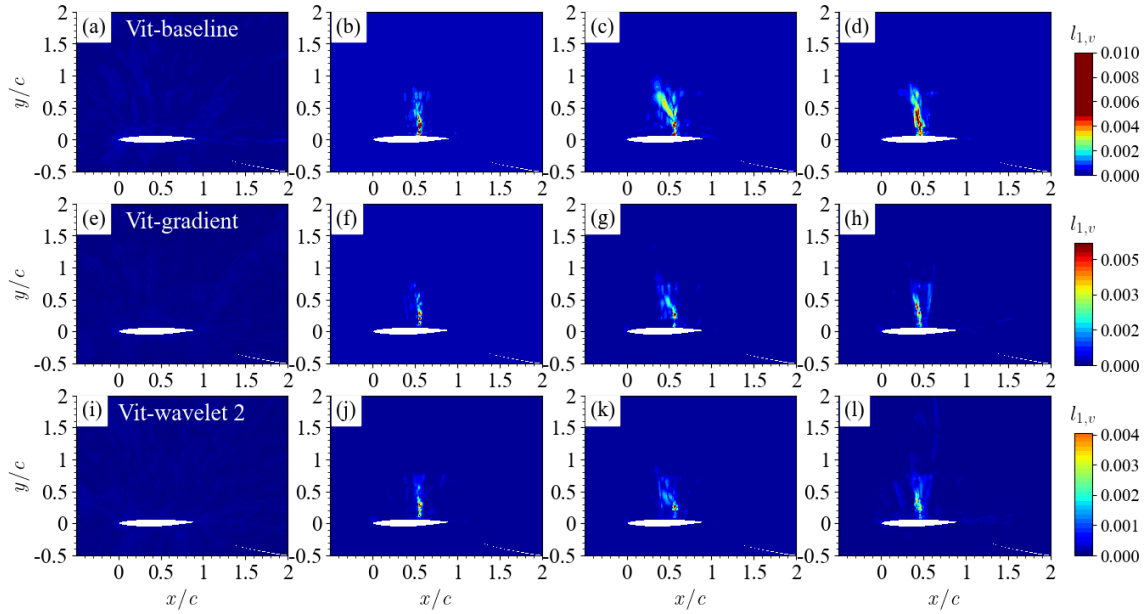


图 25 等值线 图：使用 (a)–(d) 计算流体力学确定的各种翼型的l_1 法向速度误差图；(e)–（h）使用l_1 损失训练的ViT模型；（i）–（l）使用梯度损失训练的ViT模型；以及（m）–（p）使用二级小波损失训练的ViT模型。

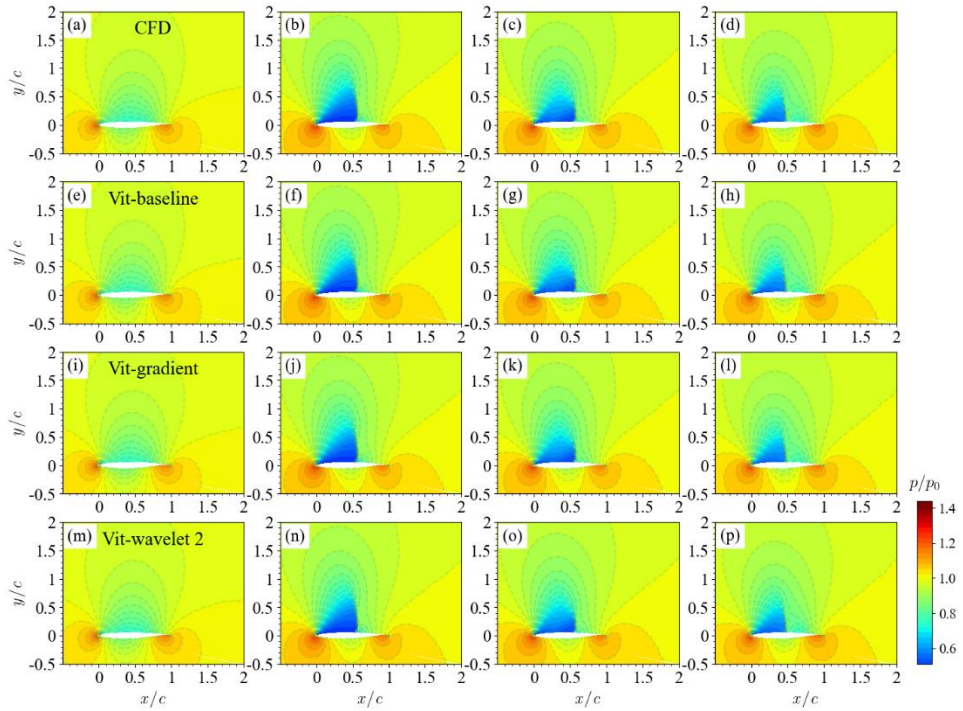


图 26 等值线　图：使用 (a)–(d) 计算流体力学确定的各种翼型的无量纲压力；(e)–(h) 使用 l_1 损失训练的 ViT 模型；(i)–(l) 使用梯度损失训练的 ViT 模型；(m)–(p) 使用二级小波损失训练的 ViT 模型。

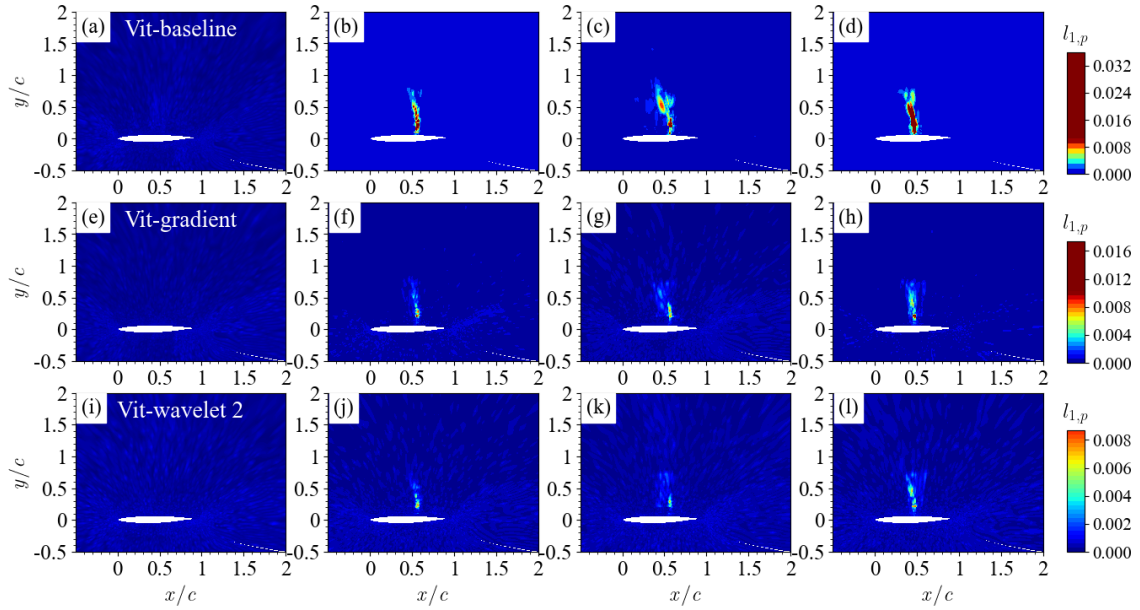


图27 采用 (a)–(d) 计算流体力学、(e)–(h) 使用 l_1 损失训练的 ViT 模型、(i)–(l) 使用梯度损失训练的 ViT 模型，以及 (m)–(p) 使用二级小波损失训练的 ViT 模型得到的各种翼型压力 l_1 误差图等值线图。

为展示流动细节，对预测的激波位置进行了比较。通常根据流向上的压力最大梯度来确定激波位置。如**图28**所示，计算流体力学（CFD）得出的结果与采用所开发策略得出的结果相似，表明该策略能够准确捕捉激波位置。**图29**展示了随机选取的样本沿翼型表面的压力系数（C_p）分布。不同流动构型的 C_p 值与计算流体力学（CFD）结果一致，说明本研究开发的策略能够准确捕捉局部流动。

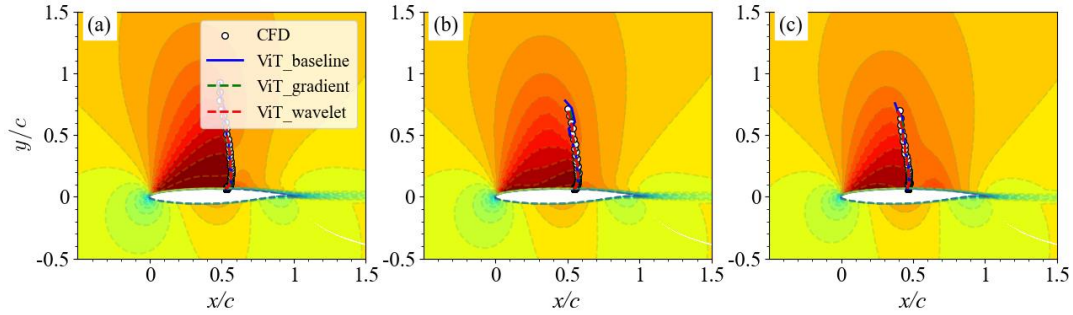


图28 采用计算流体力学确定的各种翼型的激波位置（白点）对比，

ViT b_ 基线（蓝色实线）、ViT_梯度（绿色虚线）和 ViT_小波（红色虚线）。

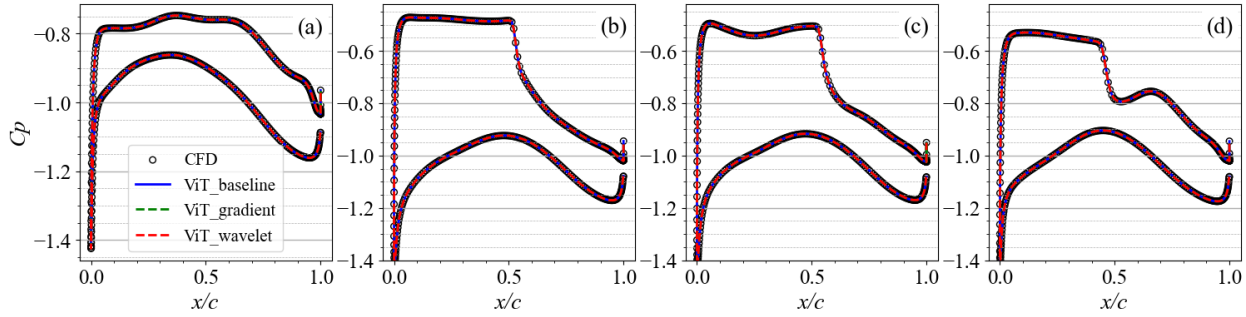


图29 使用计算流体力学（白色圆点）、ViT_基线（蓝色实线）、ViT_基线（绿色虚线）和 ViT_小波方法（红色虚线）确定的各种翼型的表面压力系数（C_p）。

在这些实验中，小波损失略优于梯度损失，不过使用这两种损失函数均能使最大误差相近程度地降低。这种相当的性能归因于两种损失函数都能帮助神经网络精确捕捉高频分量，其中包含激波信号。虽然小波变换引入了对角线高频分量，但与水平和垂直分量相比，它的作用微不足道。尽管激波附近的误差无法消除，所开发策略的激波预测精度仍高于此前报道的策略。在推理耗时方面，单个 Ascend 910 平台上运行的预训练模型可在 72 秒内获得 5,500 个流场，速度比传统求解器快数百倍。这些结果表明，所开发的策略能够快速、准确地预测超临界翼型周围的流场。

3.3. 工程应用中的迁移学习

设计新翼型时，必须模拟各种来流条件（例如攻角或马赫数值），以全面评估其性能。为提高模型的泛化能力，进而增强其在工程场景中的实用性，可采用迁移学习，在大规模数据集上对模型进行预训练，并在小规模数据集上对模型进行微调。预训练和微调数据集的配置见**表 4**。数据集的四种规模

用于预训练模型，以确定工程应用所需的最少训练样本数，同时权衡精度与耗时（即，与在较小数据集上进行预训练相比，在较大数据集上预训练可能会得到更准确的结果，但计算时间也会更长）。采用少样本迁移学习对模型参数进行微调，因为针对具有不同攻角的新翼型设计，此过程只需 0–5 个快照。利用微调后的模型，可以直接推断该翼型在其他来流条件下的流场。

表 4 预训练数据集和微调数据集的各种配置

预训练数据集	翼型索引	数量样本	微调数据集	推理数据集
Tiny	0–50	2,805	翼型索引：451–500 快照：[0, 1, 3, 5]	33 × 50 = 1,650
小	0–100	5,534		
中	0–250	13,756		
大	0–450	24,744		

迁移学习的结果如**表5**所示。当使用极小数据集对模型进行预训练时，至少需要三个快照才能达到4e-4的精度。相比之下，当使用小型、中型或大型数据集对模型进行预训练时，仅需一个快照即可保持1e-4的准确度。此外，通过使用五个快照进行迁移学习，l_{1_avg} 至少可减少50%。使用大型数据集预训练的模型无需微调即可在一定精度下预测流场。使用不同规模的数据集和不同数量快照进行微调所得到的结果如**图30**所示。微调所需的时间显著少于生成样本所需的时间。因此，微调技术在工程应用中具有特别重要的价值。**T**

able 5 Results of th预　trained model fine-tuned usi$^{ng\ var}$ i$^{ous\ num}$ b$^{ers}_{o}$ f 快照 hots

Pre-训练数据集	翼型索引	l_{1_avg} 推理数据集的			
		零样本	单样本	三样本	五样本

Tiny	0–50	0.002734	0.0012067	0.000644	0.000448
小	0–100	0.001831	0.0007356	0.0004237	0.000317
中	0–250	0.001077	0.000439	0.0002798	0.000224
大	0–450	0.000377	0.0002388	0.00020	0.000182
耗时 (s)		-	164	176	182

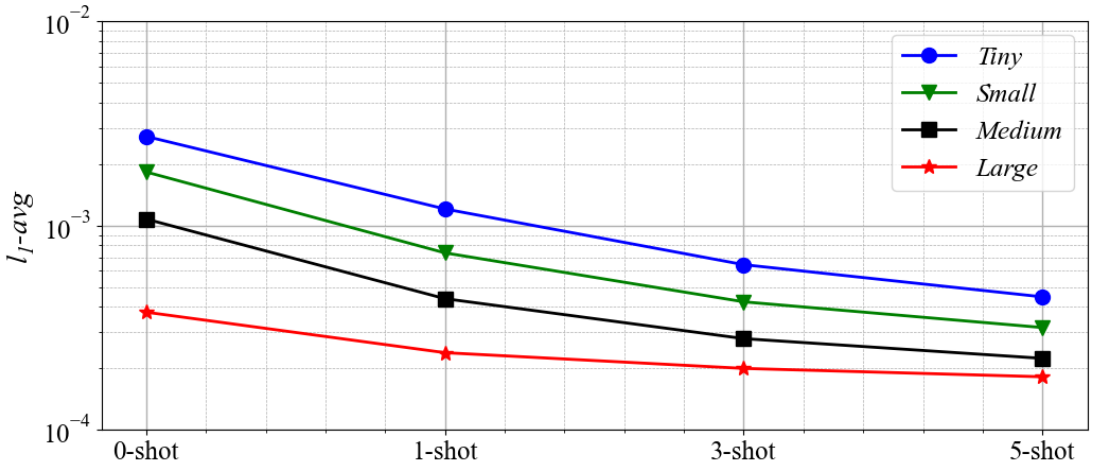


图30 比较　　使用不同规模和快照数量的数据集获得的微调结果比较

4. 结语

本文设计了一种先进的基于 ViT 的编码器—解码器网络，用于快速、准确地预测不同自由来流条件下超临界翼型周围的定常流场。为提高剧烈变化区域附近的准确度，采用各种信息点对几何输入进行编码，并通过梯度分布和多级小波变换对损失函数进行修改。应用迁移学习，以增强在小规模数据集上训练的模型在工程应用中的泛化能力：模型先在大规模数据集上训练，再在小规模数据集上进行微调。训练所用数据集包含约 500 个超临界翼型在 50 个攻角下的 27,000 多个流场，并采用雷诺平均纳维–斯托克斯建模进行模拟。由此得出以下结论。

1）采用四种方法对几何输入进行编码：方法 A 使用原始网格信息；方法 B 使用变换矩阵和翼型坐标；方法 C 使用原始网格信息和翼型坐标；方法 D 使用滤波后的原始网格信息。加入额外的几何信息（如变换矩阵或翼型坐标）能够提高整体流场的预测精度，但无法降低激波区域附近的最大误差。方法 D 中加入滤波器，扩大翼型表面附近流场所占的比例，使最小误差降低了 40%，表明了该方法的有效性。

2）引入梯度损失和多小波变换损失可提高预测精度，因为这两个损失函数能够捕捉与激波区域相关的高频分量。因此，使用这些损失函数可将平均最大误差降低近50%，并将激波附近的最大误差从0.04降至0.02或0.01。必须适当设置小波变换的阶数，以平衡计算成本与损失收益。在所考虑的情形中，二阶小波变换损失以最低误差实现了最佳性能。

3）少样本迁移学习（通过微调）能够达到与传统训练相当的准确度，同时大幅减少计算时间。当

模型在极小数据集上预训练时，至少需要使用三个快照才能达到 4e-4 的精度。相比之下，在小型、中型和大型数据集上预训练的模型只需一个快照即可达到 1e-4 的准确度。在大型数据集上预训练的模型无需微调，就能以一定精度预测流场。因此，该模型可直接应用于工程场景。

总体而言，该模型能够快速、准确地模拟超临界翼型上的稳态流动。未来的工作可致力于增强该策略对不同网格拓扑的泛化能力。

致谢

附录A

A.I. 使用各种骨干模型进行的消融实验

编码方法	骨干网络模型	Loss 函数	l_{1_avg}	$l_{1_max_avg}$	$l_{1_max_max}$
D	ViT	l_1	0.000187	0.0071	0.0687
	U-net	l_1	0.000284	0.0133	0.1519

基于 ViT 的编码器—解码器优于其他骨干模型。

A.II. 使用不同损失函数进行消融实验

编码方法	损失函数	l_{1_avg}	$l_{1_max_avg}$	$l_{1_max_max}$
D	l_2	0.000423	0.0142	0.0560
	l_1	0.000187	0.00714	0.0687
	$l_1 + \left\|l_{grad}\right\|_1$	0.000162	0.00384	0.0475

	$l_1 + \|l_{grad}\|_2$	0.000176	0.0038	0.0406
	$l_1 + \|l_{wavelet}\|_1$	0.000171	0.00430	0.0612
	$l_1 + \|l_{wavelet}\|_2$	0.000179	0.0054	0.0594

结果表明，不同范数会影响损失。由于 l_{1_avg} 和 $l_{1_max_avg}$的值较低，总损失的 l_1范数优于 l_2范数。然而，采用不同梯度范数或小波损失的损失值相近，这可能是因为两种损失都有助于神经网络聚焦于流场的高频分量，而高频分量在整个流场中所占比例较小。

A.III. 不同数据集的消融实验

编码	数据集			Loss	l_{1_avg}	$l_{1_max_avg}$	$l_{1_max_max}$
方法	翼型	攻角	Ma	函数			
D	50	50–55	-	$l_1 + l_{wt}$	0.000281	0.0138	0.1248
	500	50–55	-	$l_1 + l_{wt}$	0.000171	0.00430	0.0612
	200	60	5	$l_1 + l_{wt}$	0.000180	0.0063	0.124

随着翼型数量的增加，模型的准确度逐渐提高。此外，当三个不同因素同时发生变化时，该模型仍能预测流场，这体现了其泛化能力。

参考文献

[1] C.D. Harris, 《美国国家航空航天局超临界翼型：一系列相关翼型》，1990。[2] J. Wang, C. He, R. Li, H. Chen, C. Zhai, M. Zhang, 《基于变分自编码器深度学习框架的超临界翼型流场预测》，《流体物理学》33 (2021) 086108。https://doi.org/10.1063/5.0053979。[3] D.C. Wilcox 等, 《计算流体力学湍流建模》，DCW工业公司，拉加拿大，CA，1998。[4] S.L. Brunton, B.R. Noack, P. Koumoutsakos, 《流体力学机器学习》，《流体力学年度评论》52 (2020) 477–508。https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-010719-060214。[5] A.P. Singh, S. Medida, K. Duraisamy, 《机器学习增强的翼型湍流分离流预测建模》，（无日期）13。[6] S. Ahmed, K. Kamal, T.A.H. Ratlamwala, S. Mathavan, G. Hussain, M. Alkahtani, M.B.M. Alsultan, 《将机器学习作为RANS模拟替代方法的翼型气动分析》，《应用科学》12 (2022) 5194。https://doi.org/10.3390/app12105194。[7] W. Li, X. Gao, H. Liu, 《利用LSTM网络高效预测不同马赫数和攻角下的跨声速颤振边界》，《航空航天科学与技术》110 (2021) 106451。https://doi.org/10.1016/j.ast.2020.106451。[8] K. Li, J. Kou, W. Zhang, 《基于机器学习的多种翼型非定常气动降阶建模》，《航空航天科学与技术》119 (2021) 107173。https://doi.org/10.1016/j.ast.2021.107173。[9] V. Sekar, Q. Jiang, C. Shu, B.C. Khoo, 《使用深度学习方法快速预测翼型流场》，《流体物理学》31 (2019) 057103。[10] L. Zhu, W. Zhang, J. Kou, Y. Liu, 《翼型周围亚声速流湍流建模的机器学习方法》，《流体物理学》31 (2019) 015105。[11] Z. Liu, R. Han, M. Zhang, Y. Zhang, H. Zhou, G. Wang, G. Chen, 《用于跨声速抖振流预测的增强型混合深度神经网络降阶模型》，《航空航天科学与技术》126 (2022) 107636。https://doi.org/10.1016/j.ast.2022.107636。[12] A. Sanchez-Gonzalez, J. Godwin, T. Pfaff, R. Ying, J. Leskovec, P.W. Battaglia，学习

利用图网络模拟复杂物理，arXiv:2002。09405 [物理学，统计学]。（2020）。http://arxiv.org/abs/2002.09405（访问于2022年1月21日）。[13] T. Pfaff, M. Fortunato, A. Sanchez-Gonzalez, P.W. Battaglia，利用图网络学习基于网格的模拟，arXiv:2010。03409 [计算机科学]。（2021）。http://arxiv.org/abs/2010.03409（访问于2022年1月19日）。[14] E.J. Hall, S. Taverniers, M.A. Katsoulakis, D.M. Tartakovsky，GINNs：用于多尺度物理学的图信息神经网络，《计算物理学杂志》433 (2021) 110192。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110192。[15] L.-W. Chen, N. Thuerey，面向翼型上可压缩湍流的高精度深度学习推断，（无日期）37。[16] A. Nakayama，常规翼型和超临界翼型周围流动的特性，《流体力学杂志》160 (1985) 155–179。[17] A. Dosovitskiy, L. Beyer, A. Kolesnikov, D. Weissenborn, X. Zhai, T. Unterthiner, M. Dehghani, M. Minderer, G. Heigold, S. Gelly, J. Uszkoreit, N. Houlsby，一张图像胜过16×16个词：用于大规模图像识别的Transformer，arXiv:2010。11929 [计算机科学]。（2021）。http://arxiv.org/abs/2010.11929（访问于2022年3月25日）。[18] W.J. Gordon, C.A. Hall，曲线坐标系的构造及其在网格生成中的应用，《国际数值方法与工程杂志》7 (1973) 461–477。https://doi.org/10.1002/nme.1620070405。[19] R.D. Sandberg, V. Michelassi, R. Pichler, L. Chen, R. Johnstone，可压缩直接数值模拟低压涡轮——第一部分：方法，《涡轮机械杂志》137 (2015) 051011。[20] C.T. Jacobs, S.P. Jammy, N.D. Sandham, OpenSBLI：用于在多种计算机体系结构上自动推导并并行执行有限差分求解器的框架，《计算科学杂志》18 (2017) 12–23。[21] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A.N. Gomez, L. Kaiser, I. Polosukhin，注意力机制就是你所需的一切，arXiv:1706。03762 [计算机科学]。（2017）。http://arxiv.org/abs/1706.03762（访问于2022年4月14日）。

[22] O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox, 《U-Net：用于生物医学图像分割的卷积网络》，载于：N. Navab、J. Hornegger、W.M. Wells、A.F. Frangi（编），《医学图像计算与计算机辅助干预——MICCAI 2015》，Springer International Publishing，沙姆，2015：第234–241页。https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28.[23]T. Edwards, 《离散小波变换：理论与实现》，Universidad De。（1991）28–35。[24] P. Liu、H. Zhang、W. Lian、W. Zuo, 《多层小波卷积神经网络》，arXiv:1907.03128 [计算机科学、电气工程与系统科学]。（2019）。http://arxiv.org/abs/1907.03128（访问于2022年4月27日）。[25] P. Porwik、A. Lisowska, 《哈尔小波变换在数字图像处理中的应用：现状与成果》，《机器图形学与视觉》。13（2004）79–98。[26] A. Kendall、Y. Gal、R. Cipolla, 《利用不确定性对场景几何与语义损失进行加权的多任务学习》，（2018）。http://arxiv.org/abs/1705.07115（访问于2022年5月23日）。