基于深度几何学习的用于气动外形优化的自动参数化

ZhenWei * 和 Pascal Fua †洛桑
联邦理工学院，瑞士洛桑，*1015*

Michaël Bauerheim ‡*ISAE-SUPAERO*，
法国图卢兹，*31055*

arXiv:2305.02116v1 [cs.CV] 3 May 2023

我们提出了两种深度学习模型，可全自动完成气动外形优化中的外形参数化。两种模型均经过优化，能够通过深度几何学习进行参数化，将人工先验知识融入所学习的几何模式中，从而无需进一步手工设计。潜在空间模型（LSM）从包含多种几何形状的数据集中学习物体的低维潜在表示，而直接映射模型（DMM）则仅使用一种感兴趣的几何形状，即时构建参数化。我们还设计了一种新颖的正则化损失，可将体网格变形高效地整合到参数化模型中。模型通过移动顶点直接操控高维网格数据。LSM 和 DMM 均完全可微，因此能够实现基于梯度的端到端流程设计，并以即插即用的方式部署代理模型或伴随求解器。我们针对二维翼型进行了外形优化实验，并讨论了这两种模型各自适用的场景。代码将发布于`https://github.com/kfxw/CFD_Mesh_Parameterization`。

I. 符号表

C_d = 阻力系数 f_Θ = 带权重的潜在空间模型 Θ g_Φ = 带权重的直接映射模型 Φ h = 计算流体力学评估模块 L = 深度几何训练的损失函数 L_{reg} = 正则化损失函数 L_{cons} = 形状优化期间使用的几何约束 $\hat{M} = \{\hat{V}, \hat{E}\}$ = 模板网格及其顶点、边 $M = \{\hat{V} + \Delta V, \hat{E}\}$ = 由 f_Θ 或 g_Φ 生成的变形后的计算流体力学网格 S = 待参数化的目标几何形状 $\mathbf{z}$ = 潜在空间模型的潜向量

II. 引言

GEOMETRY 参数化和操纵是气动外形优化问题的核心。然而，有效且高效的参数化通常需要大量人工干预，阻碍了形状优化的完全自动化。这是由多种原因造成的。首先，网格参数化和超参数高度依赖于所研究的对象，需要几何先验知识和逐案分析。例如，确定自由形式变形（FFD） [1–3] 和非均匀有理B样条（NURBS） [4] 方法中的控制点数量与位置，以及类别/形状函数变换（CST） [5] 中的多项式基函数数量，对性能至关重要。其次，传统方法仅对物体表面进行参数化，这会导致计算网格与原始表面分离，从而需要耗时的重新网格化或额外的网格

*博士生，计算机视觉实验室，计算机与通信科学学院，美国航空航天学会会员
†教授，计算机视觉实验室，计算机与通信科学学院
‡副教授，空气动力学、能源与推进系

变形算法 [6–10] 会增加计算时间，并需要额外调整超参数。第三，传统方法处理高维问题的能力较弱。通常会采用降维方法来缓解维数灾难 [11]，但这也会引入新的问题。例如，适当正交分解（POD）方法 [12–16] 通常需要结合针对特定任务的手工工程设计，才能从潜向量重构几何形状。主动子空间方法 [17–23] 利用代理模型的梯度，但其近似误差上界会随着维数增加而增大。生成拓扑映射（GTM）方法 [24] 则面临需要手动调整的径向基函数数量呈指数级增长的问题。第四，现有用于自动化参数化的降维方法 [12–17, 24] 都没有被设计为可微分的，因此无法无缝集成到基于梯度的框架中，例如涉及深度学习或伴随计算流体力学求解器的框架。

近年来，多项研究强调了在外形参数化 [25–27] 和降维 [28]中采用深度学习技术的重要性。然而，这些方法也存在与传统方法类似的局限性，包括在模型设计或数据处理中需要几何先验、相对于设计变量不可微，以及依赖传统参数化方法。

本研究的主要贡献是一种新颖的外形参数化方法，它：(i) 消除了对手工设计参数的需求；(ii) 纳入计算网格变形，以对整个 CFD 网格进行参数化；(iii) 能直接处理高维网格数据，最大限度地提升几何操控的自由度；(iv) 完全可微，因此能够轻松应用于用于形状优化或不确定性量化研究的基于梯度的框架。我们首先从计算机视觉研究中汲取灵感；相关研究已证明，隐式表示 [29] 能够消除显式外形参数化，并构建连续网格表示模型。我们提出并研究了两种模型：潜在空间模型（LSM）和直接映射模型（DMM）。这两种模型都将目标对象的几何信息编码为相对于固定形状模板的变形，并将参数化的设计变量解码为完整的 CFD 网格。两种模型采用不同的训练策略，并使用数量各异的训练数据，因此各自具有独特的属性，适用于不同的任务。此外，我们设计了一种新颖的正则化损失函数，使其充当隐式优化器，引导 LSM 和 DMM 适当地变形 CFD 网格，从而保持网格质量，以供后续数值模拟使用。

本文其余部分的结构如下。第三节将详细介绍这两个模型，包括其结构、训练和推理。具体而言，1.3 节将阐述新型正则化损失函数的公式，第三节 D 部分将讨论 LSM 和 DMM 的适用场景。第四节中，我们将展示 LSM 和 DMM 与可微代理模型及伴随求解器相结合，用于二维翼型形状优化的应用。

III. 方法

所提出的模型利用深度几何学习，实现灵活的计算流体力学（CFD）网格参数化。这些模型旨在对目标形状进行编码，然后对基于固定形状模板构建的给定 CFD 网格进行变形，以重建目标几何形状。流程仅将从目标表面采样的点作为输入，随后通过模型推理生成完整的 CFD 网格。LSM 和 DMM 的流程分别如图 1 和图 2 所示。

为了形式化这一过程，我们考虑一个二维模板翼型，它包含两组采样点：表面上的 $\hat{V}^S = \{\hat{\mathrm{v}}_1^S, \hat{\mathrm{v}}_2^S, ..., \hat{\mathrm{v}}_n^S\}$，以及来自其周围 CFD 计算域的 $\hat{V}^V = \{\hat{\mathrm{v}}_1^V, \hat{\mathrm{v}}_2^V, ..., \hat{\mathrm{v}}_m^V\}$。采样数量可以任意设定。在变形连续坐标空间中，相同的顶点可表示为 $V = \hat{V} + \Delta V$，其中 $\Delta V = \{\delta \mathrm{v}1, \delta \mathrm{v}_2, ...\}$ 是顶点的位移向量。在训练期间，我们计算从待参数化目标翼型表面采样的 O 点之间的差异，这些点记为 $S = \{\mathrm{s}_1, \mathrm{s}_2, ..., \mathrm{s}_o\}$，并将其与 $\hat{V}^S$ 一同作为监督损失；同时使用 $\hat{V}^V$ 进行无监督优化，以计算正则化损失。在推理阶段，根据用户定义的 CFD 网格 $\hat{M} = \{\hat{V}^S, \hat{V}^V, \hat{E}\}$ 对 $\hat{V}^S$和 $\hat{V}^V$进行重新采样，其中 $\hat{E}$定义了连接所有顶点的边。LSM 和 DMM 均执行网格变形，并在网格拓扑固定的情况下推理出变形后的计算流体力学网格$M = \{\hat{V}^S + \Delta V^S, \hat{V}^V + \Delta V^V, \hat{E}\}$。

A. 潜在空间模型（LSM）

LSM 依赖于自动解码器结构 [29, 30]，并与潜在空间一起，在收集到的属于同一类别（例如二维翼型）的几何形状上进行联合训练。它将构建在模板翼型上的 CFD 网格映射到

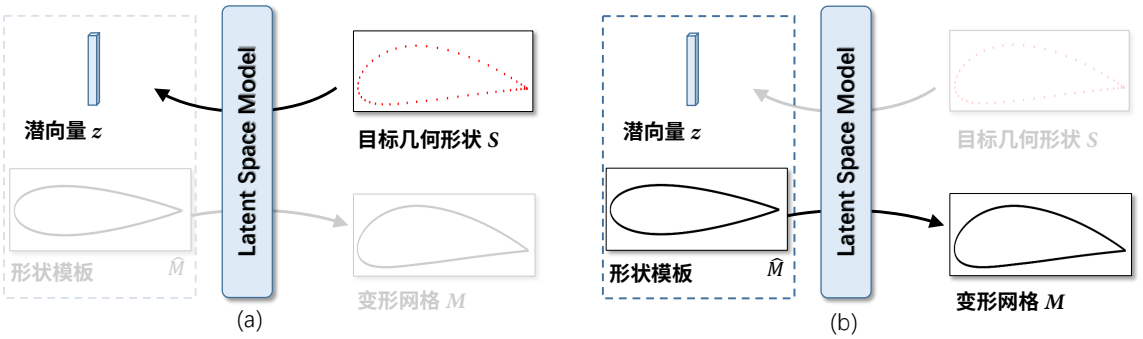

图1 LSM 的框架。首先将目标几何形状编码为一个潜向量，如(a)所示；然后将其解码为形状模板的变形结果，如(b)所示。潜向量v用于参数化目标几何形状。

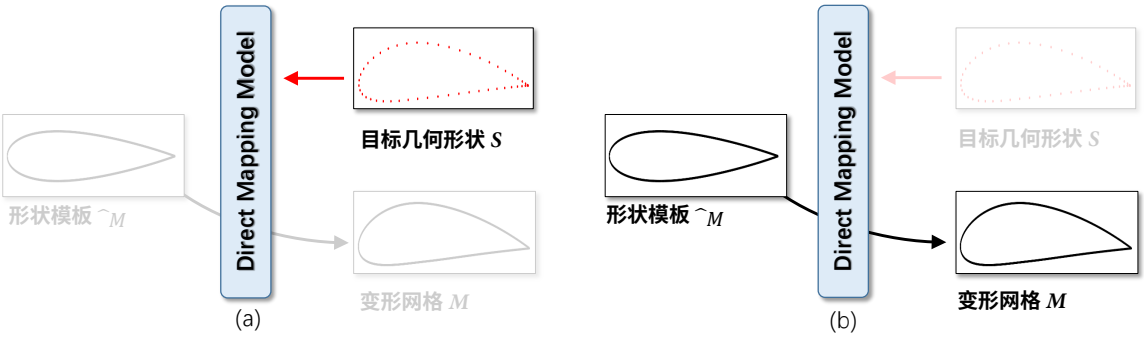

图2 DMM 的框架。DMM 首先按照公式6学习拟合目标几何形状，如(a)所示。随后，模型通过变形形状模板来重建相同的几何形状，如(b)所示。DMM 的可训练权重 Φ 用于参数化目标几何形状。

以潜向量为条件，该潜向量将目标几何信息参数化为

$$f_\Theta : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D \,, \qquad \delta \mathbf{v} = f_\Theta(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{v}}) \,, \tag{1}$$

其中， D 是 CFD 网格的数据维度， $d \ll D$， 而$\mathbf{z} \in \mathbb{R}^d$ 是低维潜参数化。 Θ表示控制 LSM f的权重。

在训练期间，收集了一个包含 T 个翼型的训练数据集 $S_1, \ldots, S_T$，其中仅包含采样的表面点。使用自动解码方法 [29, 30] 来优化权重 Θ 以及用于参数化每个训练数据$\mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_T$的潜向量。训练目标写作

$$\Theta^*, \mathbf{Z}^* = \underset{\Theta, \mathbf{z}_1, \ldots, \mathbf{z}_T}{\operatorname{argmin}} \sum_{t=1}^{T} \mathcal{L}(f_\Theta(\mathbf{z}_t, \hat{\mathbf{v}}^S), f_\Theta(\mathbf{z}_t, \hat{\mathbf{v}}^V), S_t) \,, \tag{2}$$

其中，L 是一个损失函数：当 $f_\Theta(\mathbf{z}_t$、$\hat{}\mathbf{v}^S)$ 生成的变形翼型在几何上与 S_t 完全相同时，该函数值较小；而当 $f_\Theta(\mathbf{z}_t$、$\hat{}\mathbf{v}^V)$ 生成的 CFD 网格 M 具有令人满意的质量时，该函数值也较小。因此，最优的 $\mathbf{z}_t^*$ 对应于 S_t 的低维参数化。

我们使用 Chamfer距离 [31]，（记为 $\mathrm{L}_{CD}(V^S, S)$）来衡量几何差异，并使用正则化损失（记为 $\mathrm{L}^{reg}(V^V)$）来保持计算网格的质量。此外，我们对 $\mathbf{z}$ 的范数施加约束，以确保学习到的潜在空间具有平滑性。因此，总体训练目标可写为

$$\mathcal{L}(V^S, V^V, S) = \mathcal{L}_{CD}(V^S, S) + w_{reg}\mathcal{L}_{reg}(V^V) + w_{\mathbf{z}}||\mathbf{z}||^2 \,, \tag{3}$$

其中，w_{reg} 和 $w_{\mathbf{z}}$ 为平衡权重。

在推理时，给定目标几何形状 S 和冻结的权重 Θ^*，通过优化以下问题获得潜向量参数化向量 $\mathbf{z}^*$：

$$\mathbf{z}^* = \underset{\mathbf{z}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{L}(f_\Theta(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{v}}^S), f_\Theta(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{v}}^V), S) \ . \tag{4}$$

然后，通过再次将 $\mathbf{z}^*$ 输入模型，得到输出 CFD 网格，形式为 $M = \{\{ f_\Theta(\mathbf{z}^*, \hat{\mathbf{v}}^S), f_\Theta(\mathbf{z}^*, \hat{\mathbf{v}}^T)\}, \hat{E}$。

B. 直接映射模型（DMM）

DMM 是一种前馈神经网络，专用于将模板翼型映射到单个目标，其形式为

$$\begin{aligned} g_\Phi : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^D \ , \\ \delta\mathbf{v} = g_\Phi(\hat{\mathbf{v}}) \ , \end{aligned} \tag{5}$$

与 LSM 不同，LSM 使用自动解码器模型和 T 专属潜向量，对同一类别的 T 形状进行参数化；DMM 则需要 T 个神经网络 g_{Φ_1}，g_{Φ_2}、……、g_{Φ_T}，用于 T 模板到目标的几何形状映射。在 DMM 中，几何信息嵌入模型本身，模型权重对目标几何形状进行参数化，而不生成作为设计变量的显式向量。然而，DMM 不需要训练过程，也不要求大量数据。在推理过程中，Φ 会被随机初始化，然后针对目标翼型 S 进行优化，以求解以下问题。

$$\Phi^* = \underset{\Phi}{\operatorname{argmin}} \mathcal{L}(g_\Phi(\hat{\mathbf{v}}^S), g_\Phi(\hat{\mathbf{v}}^V), S) \ . \tag{6}$$

DMM 的损失函 数与 LSM 的损失函数类似，但不包含对潜在空间的约束，其表达式为 s

$$\mathcal{L}(V^S, V^V, S) = \mathcal{L}_{CD}(V^S, S) + w_{reg}\mathcal{L}_{reg}(V^V). \tag{7}$$

C. 保持质量的网格变形正则化

正则化损失可确保所有采样点 $\hat{V}^V$ 都随翼型几何形状的变化而相应移动，从而维持基于模板翼型构建的用户定义 CFD 网格所固有的计算网格质量。这种质量通过定量指标体现，例如网格单元的偏斜度、正交性和纵横比，以及网格表示底层物理现象的能力 [32]。为此，我们将计算网格视为连续二维弹性材料的离散采样，其边界由固定计算边界（通常为入口/出口边界片）和可变形的翼型表面构成。非刚性失真会改变网格单元内部的角度和边长比例，从而导致网格质量下降。计算边界变形可能导致边界条件错误，并妨碍生成的网格在下游软件中的应用。为了解决这些问题，我们将正则化损失定义为两项之和，即 L_{dist} 和 L^{def}，以尽量减小整个网格中的非刚性失真以及固定边界片的变形：

$$\mathcal{L}_{reg} = \mathcal{L}_{dist} + \mathcal{L}_{def} \ . \tag{8}$$

为构造 L_{dist}，我们定义能量函数 $\mathbb{E}$，将总非刚性畸变量化为无穷小应变张量的 Frobenius 范数平方，其表达式为

$$\begin{aligned} \mathbb{E} &:= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{|V^V|} \left\| \nabla\delta\mathbf{v}_i^V + (\nabla\delta\mathbf{v}_i^V)^T \right\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{|V^V|} \left\{ \left\| \frac{\partial\delta v_{x,i}^V}{\partial x} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial\delta v_{x,i}^V}{\partial y} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial\delta v_{y,i}^V}{\partial x} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial\delta v_{y,i}^V}{\partial y} \right\|^2 \right\} \ , \end{aligned} \tag{9}$$

其中，单个顶点 $\delta\mathbf{v}_i^V = (\delta v_{x,i}^V, \delta v_{y,i}^V) \in \mathbb{R}^2$ 的位移。随后，我们研究以下公式。

$$-\sum_{i=1}^{|V^V|} \left\{ \frac{\partial^2\delta v_{x,i}^V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\delta v_{x,i}^V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\delta v_{y,i}^V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\delta v_{y,i}^V}{\partial y^2} \right\} \ . \tag{10}$$

由于 $\delta \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i - \hat{\mathbf{v}}_i$ 且 $\partial^2 \hat{\mathbf{v}}_i / \partial x^2 = \partial^2 \hat{\mathbf{v}}_i / \partial y^2 = 0$，公式10可以改写为

$$F := -\sum_{i=1}^{|V^V|} \left\{ \frac{\partial^2 v^V_{x,i}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^V_{x,i}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v^V_{y,i}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^V_{y,i}}{\partial y^2} \right\} \quad . \tag{11}$$

$F = 0$ 当 $\forall i$ 时 $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}$，这是 $\mathbb{E}$ 的欧拉-拉格朗日方程，也是用户定义的模板 CFD 网格在 $\mathbb{E}$的能量景观上为驻点的充要条件。随后定义 L_{dist}，以使生成的计算网格中的局部网格单元结构与模板中的结构相似，从而避免生成存在严重问题的网格，例如负体积网格单元和严重的非正交问题。模板网格中嵌入的理想网格属性，包括网格单元纵横比、偏斜度和正交性，也会尽可能得到保留。L_{dist} 定义为

$$\mathcal{L}_{dist} := \sum_{i=1}^{|V^V|} \left\{ \left\| \frac{\partial^2 v^V_{x,i}}{\partial x^2} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial^2 v^V_{x,i}}{\partial y^2} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial^2 v^V_{y,i}}{\partial x^2} \right\|^2 + \left\| \frac{\partial^2 v^V_{y,i}}{\partial y^2} \right\|^2 \right\} \quad . \tag{12}$$

得益于 LSM 和 DMM 的完全可微性，可通过自动微分轻松解析计算偏微分方程项。

L^{def} 用于衡量边界附近的变形，其表达式为

$$\mathcal{L}_{def} := \sum_{j=1}^{|V^{fix}|} \left\| \delta \mathbf{v}^{fix} \right\|^2 \quad , \tag{13}$$

其中，$V^{fix} = \{\mathbf{v}_1^{fix}, \mathbf{v}_2^{fix}, \ldots\ldots, \mathbf{v}_k^{fix}\}$ 是位于计算边界（即入口/出口边界片）上或附近以及任何其他指定固定边界片上的一组采样点，并且是 V^V的子集。

D. 关于 LSM 和 DMM 的讨论

1. LSM 和 *DMM* 的共同点

LSM 和 DMM 学习坐标空间之间的连续映射。V^S 和 V^V 的采样策略可以独立于任何特定的 CFD 网格，也可以使用 CFD 网格进行采样，同时泛化到连续空间中的任何其他离散采样。这样，在优化 Θ 或 Φ后，无需进行任何适配，两种模型便可使用各种 CFD 网格进行推理。图 3 展示了两种模型使用不同模板网格进行推理后的重建结果。

与此同时，L^{reg} 将网格变形整合到参数化模型中，无需额外的后处理模块。它无需引入需要调优的敏感超参数，也无需手动配置。此外，与基于径向基函数的方法和弹簧类比方法相比，L^{reg} 无需针对顶点求解庞大的线性方程组。它的计算效率也高于基于反距离加权的方法。设 N^* 和 M^* 分别为特定 CFD 网格的几何表面和计算网格的顶点数量。采样的 V^V 数量为 M，并且 $M << M^*$。L^{reg} 在训练期间的复杂度为 O(M)，在推理期间则为零；而基于反距离加权的方法在每次变形时的复杂度为 O(N^*M^*)。

2. LSM 的独特属性

LSM 和 DMM 由于采用了不同的优化策略，因此具有不同的属性。

与 LSM 网络共同训练的潜在空间嵌入了来自训练数据的丰富几何信息。LSM 生成的新颖形状在训练集定义的设计空间中进行插值，并继承几何先验。轻微扰动现有翼型的$\mathbf{z}$ 后，可以得到另一个新颖翼型，而非任何非翼型形状。这一属性有两大优势。首先，LSM 可以用作新颖的数据采样器。图 4 展示了 LSM 使用 [33] 中提出的无采样方法，从现有翼型中探索得到的新颖形状。其次，使用 LSM 进行形状优化时，我们可以减少显式几何约束的数量，同时确保优化结果有效，例如保持表面光滑度、物体尺度以及训练数据中常见的特殊结构。

LSM 是 Wei 等人提出的模型 [34] 的升级版本，其结构和正则化损失均经过简化，从而减少了训练和推理过程中的计算时间与内存消耗。

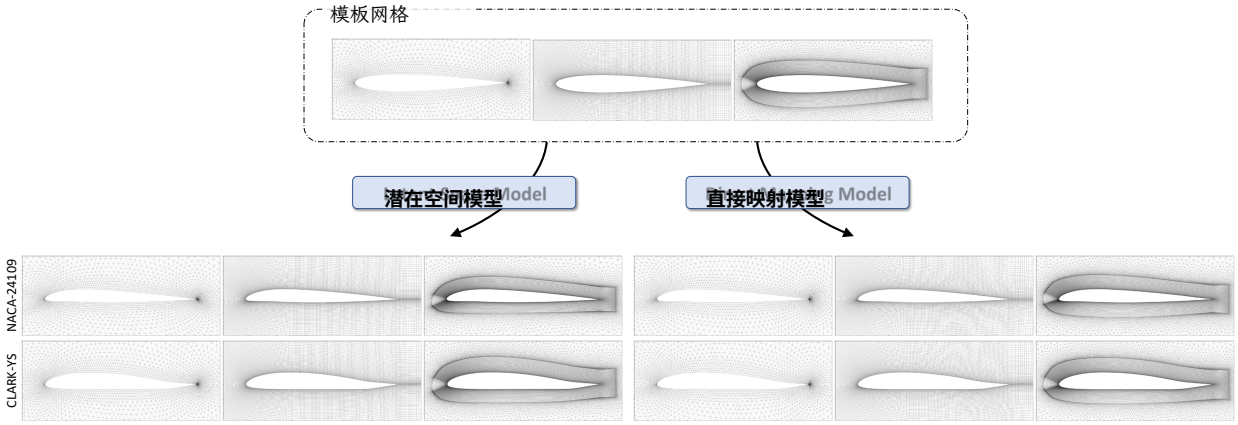

图 3：优化后的 LSM 和 DMM 均能准确推断各种模板 CFD 网格，无需进行任何适配。

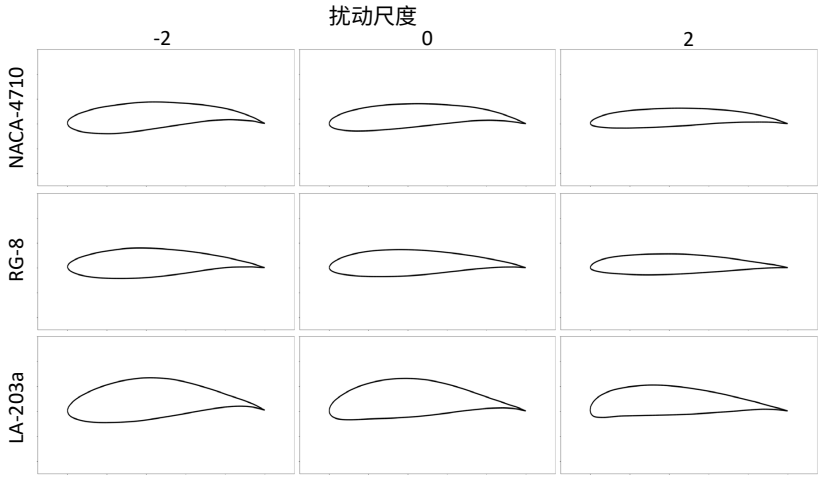

图 4 使用*Shen* 等人 [33]提出的采样方法，对已有翼型的潜在参数化向量进行扰动，从 LSM 学得的潜在空间中采样得到的新型翼型。

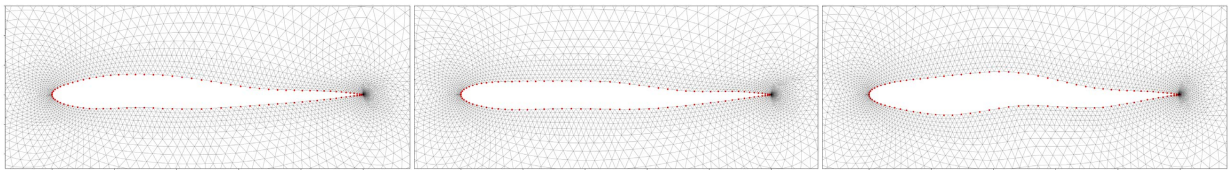

图 5 DMM 对随机变形翼型进行参数化后的重构结果。目标的真实几何形状以红点表示。

3. DMM 的独特属性

DMM 是一种轻量级模型，适用于针对特定目标几何形状开展案例研究。它无需训练数据集，而训练数据集并非总是可用。对于二维翼型案例，优化 DMM 需要 $4-6s$。同时，DMM 对单个对象的几何信息进行编码，因此具有更大的几何自由度，并能够将模板形状变形为各种几何形状。图 5 展示了 DMM 如何从模板翼型 NACA-0012 重建并参数化随机扭曲的形状。将 DMM 用作参数化模型，形状优化便能探索并设计新颖结构。

E. 实现

LSM 和 DMM 使用 Pytorch 深度学习框架 [35] 实现。LSM 是一个具有 256 维潜在空间的四层多层感知机（MLP）网络。每个潜在 MLP 层的激活函数是 ReLU [36] 和 SIREN [37]，的加权和，可实现精确的形状变形并计算二阶偏导数。LSM 使用 2648 个翼型进行训练，其中包括从 UIUC 翼型数据集 [38] 收集的 1442 个来自不同翼型系列的数据，其余翼型则是随机生成的 NACA 四位数或五位数翼型。训练使用 Adam 优化器 [39]，初始学习率为 10^{-4}，训练 20 轮次，耗时 $175s$。推理期间，使用 Adam 优化器对潜向量 **z**进行优化，最多迭代 1000 次。

DMM 使用与 LSM 类似的网络结构，但只有两个潜在层。在推理过程中，Adam 优化器通过 600 次迭代求解 Eq.6。

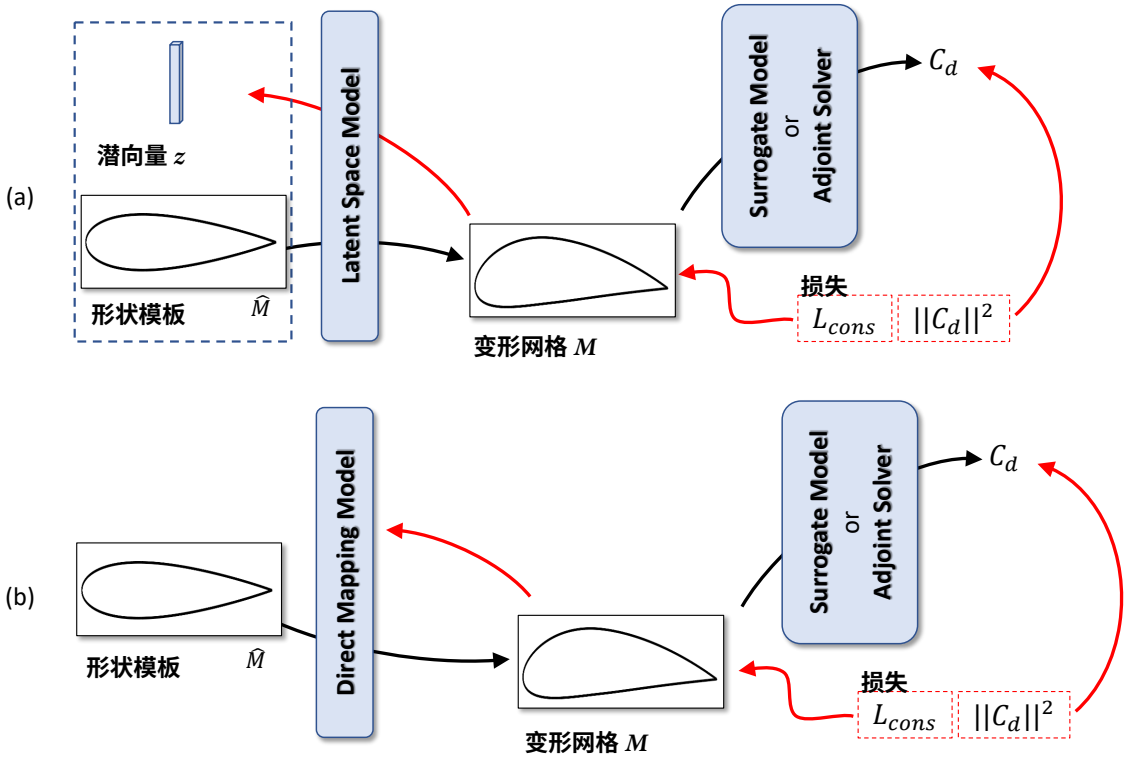

图 6 使用 (a) LSM 和 (b) DMM 的形状优化框架。代理模型或伴随求解器附加在推理得到的网格之后。红色路径表示流程中的梯度流。

F. 形状优化的全可微框架

本文使用 LSM 和 DMM 参数化模型，以基于梯度的求解为例，解决 ADODG 案例 1 优化问题。目标是在零攻角条件下的跨声速流动（Ma=0.85）中，最小化 NACA-0012 翼型的阻力系数。

要执行气动外形优化，我们需要将 LSM 或 DMM 与下游评估模块（记作 h）耦合，该模块可以是可微代理模型（例如 GCNN 网络 [40]）或伴随求解器（例如 SU2 [41]），用于评估当前设计的性能。例如，阻力的评估可以写成

$$C_d = h(M)\,, \tag{14}$$

其中，$M = \{\{\hat{V}^S + \Delta V^S, \hat{V}^V + \Delta V^V\}, \hat{E}\}$ 由 f_Θ 或 g_Φ 推断得到。几何约束 L_{cons} 可以直接根据 M 计算，然后应用于 M。整体流程如图 6 所示。形状优化目标表示为

$$\text{for LSM:}\quad \mathbf{z}^* = \underset{\mathbf{z}}{\operatorname{argmin}} \left(||C_d||^2 + \mathcal{L}_{cons}(M(\hat{V} + f_\Theta(\hat{M}, \mathbf{z}))) \right)\,, \tag{15}$$

$$\text{for DMM:}\quad \Phi^* = \underset{\Phi}{\operatorname{argmin}} \left(||C_d||^2 + \mathcal{L}_{cons}(M(\hat{V} + g_\Phi(\hat{M}, \mathbf{z}))) \right)\,. \tag{16}$$

来自代理模型或伴随求解器的梯度，以及约束，将反向传播至 LSM 的潜在编码或 DMM 的权重。随后，通过应用优化器更新可学习参数，从而调整输出形状。

IV. 实验与结果

我们按照 ADODG 案例 1 中的设置，研究所提出模型在二维翼型优化案例中的有效性。优化目标是在零攻角下，降低 NACA-0012 在跨声速无黏流（Ma=0.85）中的阻力系数。为展示所提出模型完全可微的优势，我们采用不同方法评估翼型的阻力系数，并计算计算流体力学相对于几何形状的梯度（即表面灵敏度或不确定性）。具体而言，我们分别使用 GCNN [40]代理模型和 SU2 的伴随求解器[41], 。在本文其余部分，我们使用 *LSM + SU2* 等术语表示一对参数化模型和评估模型。

A. 评估模块

1. GCNN 代理模型

GCNN 以翼型的连通轮廓为输入，并根据顶点和边提取几何特征。它通过两种方式预测阻力系数。$C_d{}^{int}$ 通过预测各顶点的气压值，并计算气压在翼型表面上的积分得出；$C_d{}^{direct}$ 则通过直接预测整体阻力系数得出。最小化目标是将这两种预测值相加，即 $C_d = C_d{}^{int} + C_d{}^{direct}$。

GCNN 网络结构由 5 个图卷积块组成，每个块包含 3 个卷积层。每层之后均使用批归一化 [42]，并采用指数线性单元 [43]作为激活函数。模型使用 Adam 优化器进行训练，学习率为 5×10^{-4}，共训练 900 轮。

2. SU2 伴随求解器

我们使用 SU2 的连续伴随求解器，根据模拟结果，沿表面的顶点法线方向计算阻力最小化目标的敏感度尺度。为避免欧拉方程的非唯一性问题[14, 44], ，我们采用重启策略进行流场初始化 [45]。在优化过程中，我们以适中的学习率逐步调整连续迭代间翼型的几何形状，以确保参数化模型的优化结果收敛至令人满意的最小值。由于求解伴随方程所需时间远超评估代理模型的时间，我们通过定期更新伴随结果，并在多次迭代中重复使用 SU2 梯度来加快这一过程。若出现数值不稳定性，即使满足最小残差准则，只要 SU2 梯度的范数过大，我们也会将其舍弃。

B. 几何约束

总体几何约束可以通用地表示为以下各项的加权和：P 任务特定约束、Q 参数化模型特定约束和 R 评估模型特定约束：L_{cons} $\sum_{i=1}^{P} w_{T\,i} C_{T\,i} + \sum_{j=1}^{Q} w_{M\,j} C_{M\,j} + \sum_{k=1}^{R} w_{E\,k} C_{E\,k}$ C_T C_M ,,,,,,，其中由优化目标定义，由定义。

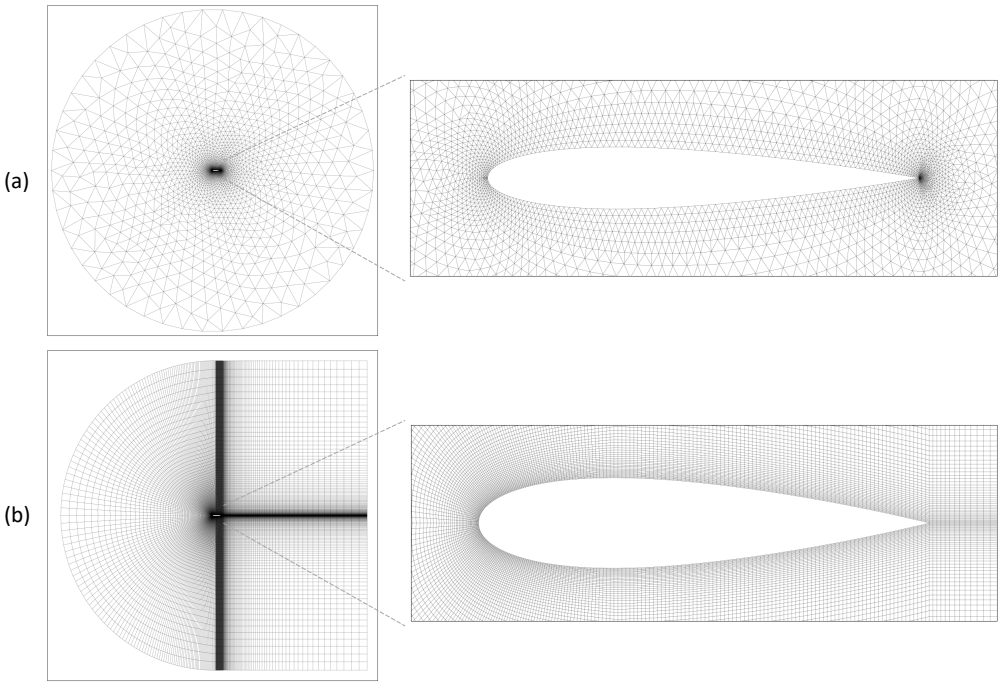

图7　两个模板　用于基于伴随求解器的形状优化实验所采用的网格：(a) *TM-A* 和 (b) *TM-B*。两个网格均为基于 NACA-0012 构建。

由参数化模型确定，C_E 由评估模块确定。$w_{T,i}$、$w_{M,j}$ 和 $w_{E,k}$ 是相应约束的权重。

1. 特定任务约束

我们将 ADODG 案例 1 的几何约束记为边界约束 $C_{T,1}$，它限制翼型厚度不得低于其初始值，写作

$$C_{T,1} = \frac{1}{|V^S|} \sum_{i=1}^{|V^S|} \left\| \max(|v_{y,i}^{S,opt}| - |v_{y,i}^{S,init}|, 0) \right\|^2 \quad , \tag{17}$$

其中 $v_{y,i}^{S,opt}$ 和 $v_{y,i}^{S,init}$ 分别是优化后的翼型和初始翼型的表面顶点坐标 y.

2. 参数化模型特定约束

对于 LSM，我们对潜在编码**z**的范数定义约束，即 $C_{M,1}$，以确保优化后的$\mathbf{z}^*$ 落在从训练数据中学习到的潜在分布内，并使生成的翼型有效，写作

$$C_{M,1} = ||\mathbf{z}||_F^2 \quad . \tag{18}$$

对于 DMM，我们固定前缘 $\mathbf{v}_{leanding}^S$ 和后缘 $\mathbf{v}_{trailing}^S$，并约束 x 坐标，以保持归一化弦长和弦向位置。我们分别将这些约束表示为 $C_{M,2}$ 和 $C_{M,3}$，其表达式为

$$C_{M,2} = \left\| \mathbf{v}_{leanding}^S - [0,0] \right\|^2 + \left\| \mathbf{v}_{trailing}^S - [1,0] \right\|^2 \quad , \tag{19}$$

$$C_{M,3} = \sum_{i}^{|V^S|} \left\| \max(0 - \mathbf{v}_{x,i}^S, 0) + \max(\mathbf{v}_{x,i}^S - 1, 0) \right\|^2 \quad . \tag{20}$$

表 1 在 ADODG 案例 I 基准测试中，与采用手工和半自动参数化的既有形状优化方法进行定量比较。阻力系数以计数为单位报告。（1 计数 $= 10^{-4}$）

模型	初始 C_d	已优化 C_d
He 等人 [45]	470.36	7.60
He 等人 [45]	470.36	15.54
He 等人 [45]	470.36	23.53
Masters 等人 [46]	469.60	25.00
Bisson 和 Nadarajah [47]	464.20	26.20
He 等人 [45]	470.36	34.33
Carrier 等人 [48]	471.20	36.70
Lee 等人 [49]	457.33	42.24
He 等人 [45]	470.36	50.49
DMM + SU2	466.11	69.32
张等人 [50]	481.28	73.08
普尔等人 [51]	469.42	83.80
勒杜等人 [44]	471.30	84.50
加里皮等人 [52]	481.60	141.70
DMM + GCNN	466.11	278.23
LSM + SU2	466.11	283.93
法比亚诺和马夫里普利斯 [53]	466.96	297.02
LSM + GCNN	466.11	354.91

3. 评估模块特定约束

由于 SU2 沿表面法向方向计算敏感度尺度，将此梯度应用于网格模型会导致表面顶点重新分布，进而使与其直接相连的体网格单元出现非正交性。为解决这一问题，我们定义一个约束$C_{E,\,1}$，使水平移动逐渐衰减，具体如下。

$$C_{E,1} = \sum_{i}^{|V^S|} \left\| \delta \mathbf{v}_{x,i}^{S} \right\|^2 \quad . \tag{21}$$

GCNN 不需要任何额外约束。

4. 计算网格上的约束

将两个模型与伴随求解器结合使用时，我们再次将正则化损失用作计算网格质量的约束，具体为$C_{M,\,4} = \mathrm{L}^{reg}$。

总之，LSM ＋GCNN 使用 $\{C_T,1,C_M,1\}$，LSM ＋SU2 使用 $\{C_T,1,C_M,1,C_E,1\}$，DMM ＋GCNN 使用 $\{C_T,1,C_M,2,C_M,3\}$，DMM ＋SU2 使用 $\{C_T,1,C_M,2,C_M,3,C_E,1\}$。

C. 形状优化结果

使用 SU2 进行优化时，我们通过在大多数迭代中使用粗模板网格*TM-A* * 来加速这一过程。当阻力系数不再下降时，我们会在最后几次迭代中切换到细模板网格*TM-B* †。图 7 展示了这些模板网格。*TM-A* 由 5233 个顶点和 10126 个三角形组成，而*TM-B* 由 58120 个顶点和 57600 个四边形单元组成。使用 GCNN 进行优化时，模板网格的选择并不重要，因为 GCNN 只需要翼型轮廓作为输入。

*https://github.com/su2code/Tutorials/blob/master/design/Inviscid_2D_Unconstrained_NACA0012/mesh_NACA0012_ inv.su2

†http://www.wolfdynamics.com/tutorials.html?id=148

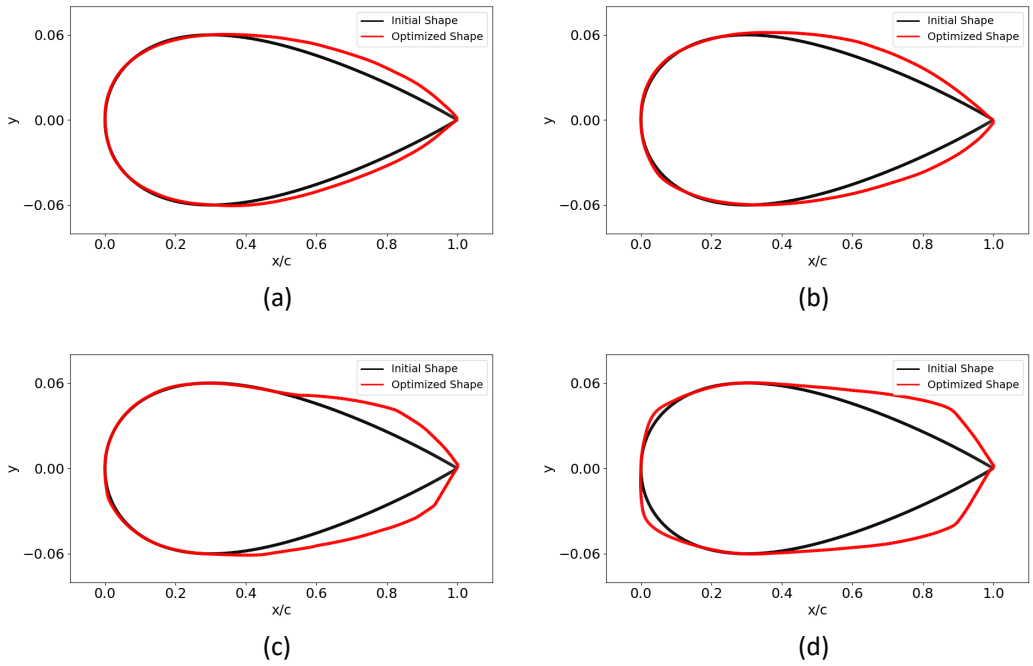

图 8 (a) ***LSM + GCNN*****、(b)** ***LSM + SU2*****、(c)** ***DMM + GCNN*** **和 (d)** ***DMM + SU2*** **的形状优化结果。初始 NACA-0012 翼型和优化后的形状分别以黑色和红色表示。**

与此同时，我们引入了一种重新参数化机制，以防止灾难性的网格错误导致优化迭代提前终止。当$C_{M,4}$变大，或模拟与伴随求解均未能满足残差准则时，我们从当前翼型表面 $f_\Theta(\mathbf{z}, \hat{\mathbf{v}}^S)$ 或 $g_\Phi(\hat{\mathbf{v}}^S)$ S' 中采样点，并使用公式 4 或公式 6 更新 LSM 的$\mathbf{z}$ 或 DMM 的 Φ。随后，优化将在重新参数化后的模型上继续进行。

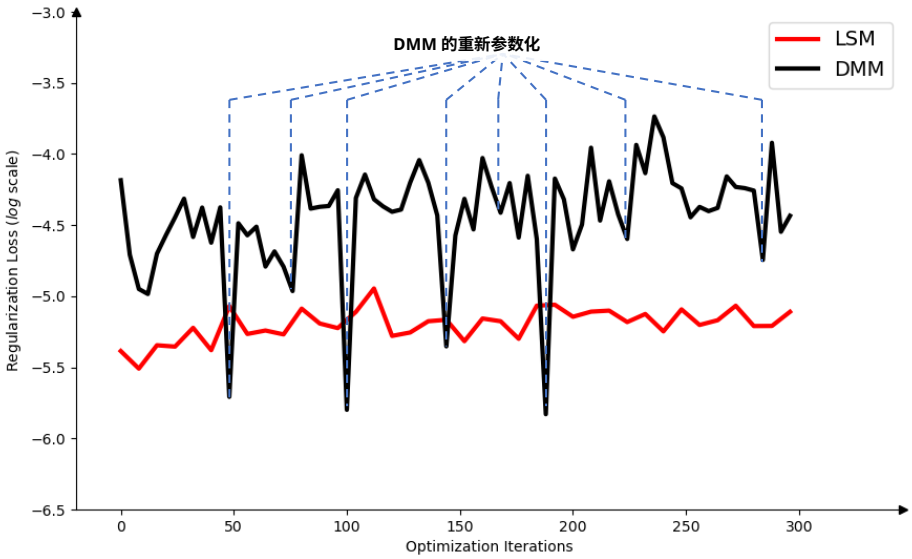

图 9 'LSM+SU2' 和 'DMM+SU2' 设置的正则化损失对比。LSM 能以更好的质量变形计算网格，且较少触发重新参数化。

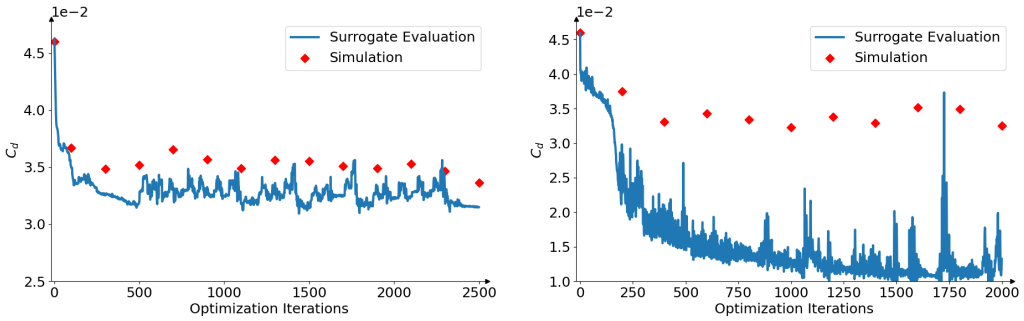

图 10 当翼型变形程度更大、超出训练数据的分布时，GCNN 的评估结果与模拟结果之间的差距会更加显著；结合 (a) LSM 和 (b) DMM 时均如此。GCNN 仅依赖固定训练集时，泛化能力有限。

优化后的 NACA-0012 翼型如图 8 所示。四种情况下的阻力系数均显著降低，表明所提出的参数化方法与两种评估模型结合使用时均有效。表 1 中的定量结果表明，所提出的自动参数化模型与以往的手工设计和半自动参数化方法表现相当。不过，不同案例的结果有所差异。具体而言，DMM 产生的变形幅度大于 LSM，这与我们在第 III.D 节中的讨论一致：LSM 的潜在空间对训练数据集的分布进行参数化，而 *DMM + SU2* 获得的最优结果并不遵循 NACA 翼型和 UIUC 翼型数据集的分布。LSM 提供了更简单的几何约束，并能实现更好的计算网格变形。如图 9 所示，*LSM + SU2*的正则化损失值低于*DMM + SU2*，且优化过程中未触发重新参数化。

就评估模型而言，由于 GCNN 的泛化能力有限，SU2 的表现始终优于 GCNN 模型。这一局限源于 GCNN 的训练集仅包含来自现有翼型的流体数据。在这种情况下，优化后的翼型会成为分布外数据，导致评估结果与实际气动性能之间存在较大差距，如图 10 所示。这种现象使其不适合在后期阶段指导优化过程。然而，SU2 所需的计算时间远多于 GCNN。两者各进行 100 次迭代时，使用 GCNN 模型耗时 $9s$，而使用 SU2 在粗模板网格*TM-A*上耗时 $2253s$ 。

V. 结论

本文提出了两种深度学习模型，可实现气动外形优化中外形参数化的全自动化。这两种模型无需人工干预，即可直接操作高维网格数据。通过学习坐标空间的连续映射，模型能够同时变形物体表面和任意类型的计算网格。在二维翼型优化问题中，我们的流程取得了与基于手工和半自动参数化方法的现有方案相当的结果。然而，由于本文主要关注参数化模型，流程中的其他模块尚未达到最优。作为一项持续开展的研究，我们将继续通过构建更好的代理模型并研究适用于变形的网格，提升整体性能。同时，我们还将继续探索三维物体研究，并应用深度几何学习技术来处理更复杂的几何形状。

致谢

本研究部分由瑞士国家科学基金会和法国“未来投资计划”资助：ANR-17-EURE-0005。Z. Wei 获得由图卢兹航空航天工程研究生院资助的TSAE奖学金。M. Bauerheim 获得法国军备总局通过国防创新局（AID）DECAP项目提供的支持。

参考文献

[1] Sederberg, T., and Parry, S., “实体几何模型的自由形变”，ACM SIGGRAPH，第20卷，第4期，1986年。[2] Lamousin, H. J., and Jr., W. N. W., “基于非均匀有理B样条的自由形变”，《计算机图形学与应用》，第14卷，第6期，1994年，第59–65页。https://doi.org/10.1109/38.329096。[3] Kenway, G., Kennedy, G., and Martins, J. R. R. A., “一种无需CAD的高保真气动结构优化方法”，第13届美国航空航天学会/国际多学科分析与优化学会多学科分析与优化会议，美国得克萨斯州沃思堡，2010年9月13–15日。https://doi.org/10.2514/6.2010-9231。[4] Toal, D. J. J., Bressloff, N. W., Keane, A. J., and Holden, C. M. E., “利用适当正交分解进行几何筛选以实现气动设计优化”，《美国航空航天学会期刊》，第48卷，第5期，2010年，第916–928页。[5] Kulfan, B. M., “通用参数化几何表示方法”，《航空器学报》，第45卷，第1期，2008年，第142–158页。https://doi.org/10.2514/1.29958。[6] de Boer, A., van der Schoot, M., and Bijl, H., “基于径向基函数插值的网格变形”，《计算机与结构》，第85卷，第11期，2007年，第784–795页。[7] Batina, J. T., “采用非结构化动态网格的非定常欧拉翼型计算”，AIAA 期刊，第28卷，第8期，1990年，第1381–1388页。https://doi.org/10.2514/3.25229。[8] Batina, J. T., “采用非结构化动态网格的非定常欧拉算法：复杂飞机气动分析”，AIAA 期刊，第29卷，第3期，1991年，第327–333页。https://doi.org/10.2514/3.10583。[9] Farhat, C., Degand, C., Koobus, B., and Lesoinne, M., 一种改进的动态非结构化流体网格弹簧类比方法，1998年。https://doi.org/10.2514/6.1998-2070。[10] Luke, E., Collins, E., and Blades, E., “一种采用显式插值的快速网格变形方法”，《计算物理学杂志》，第231卷，第2期，2012年，第586–601页。https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jcp.2011.09.021。[11] Bellman, R., 维数灾难，普林斯顿大学出版社，1961年。[12] Robinson, G. M., and Keane, A. J., “超临界翼型的简洁正交表示”，《航空器学报》，第38卷，第3期，2001年，第580–583页。https://doi.org/10.2514/2.2803。[13] Poole, D. J., Allen, C. B., and Rendall, T. C. S., “高效翼型设计变量的基于度量的数学推导”，《美国航空航天学会期刊》，第53卷，第5期，2015年，第1349–1361页。https: // doi.org/10.2514/1.J053427。[14] Masters, D. A., Taylor, N. J., Rendall, T. C. S., Allen, C. B., and Poole, D. J., “翼型外形参数化方法的几何比较”，《美国航空航天学会期刊》，第55卷，第5期，2017年，第1575–1589页。https://doi.org/10.2514/1.J054943。[15] Li, J., Bouhlel, M. A., and Martins, J. R. R. A., “用于快速翼型分析与优化的数据驱动方法”，《美国航空航天学会期刊》，第57卷，第2期，2019年，第581–596页。https://doi.org/10.2514/1.J057129。[16] Kedward, L., Allen, C. B., and Rendall, T., “迈向气动外形优化的通用模态设计变量”，AIAA 科技论坛，美国佛罗里达州奥兰多，2020年1月6–10日。https://doi.org/10.2514/6.2020-0543。[17] Constantine, P. G., Dow, E., and Wang, Q., “主动子空间方法：理论与实践——在克里金表面中的应用”，《SIAM科学计算杂志》，第36卷，第4期，2014年，第A1500–A1524页。https://doi.org/10.1137/130916138。[18] Li, J., Cai, J., and Qu, K., “基于代理模型并采用主动子空间方法的气动外形优化”，《结构与多学科优化》，第59卷，第2期，2019年，第403–419页。https://doi.org/10.1007/s00158-018-2073-5。[19] Lukaczyk, T. W., Constantine, P., Palacios, F., and Alonso, J. J., “用于形状优化的主动子空间”，第10届AIAA多学科设计优化会议，2014年。https://doi.org/10.2514/6.2014-1171。[20] Namura, N., Shimoyama, K., and Obayashi, S., “基于似然和梯度、采用坐标变换的克里金代理模型”，《全球优化杂志》，第68卷，第3期，2017年，第827–849页。https://doi.org/10.1007/s10898-017-0516-y。[21] Grey, Z. J., and Constantine, P. G., “翼型外形参数化的主动子空间”，AIAA 期刊，第56卷，第5期，2018年，第2003–2017页。https://doi.org/10.2514/1.J056054。

[22] Bauerheim, M., Ndiaye, A., Constantine, P., Moreau, S., 和 Nicoud, F.，“方位热声模态的对称性破缺：不确定性量化视角”，《流体力学杂志》，第 789 卷，2016 年，第 534–566 页。https://doi.org/10.1017/jfm.2015.730.[23] Magri, L., Bauerheim, M., Nicoud, F., 和 Juniper, M. P.，“环形燃烧室中热声非线性特征值问题的稳定性分析。第二部分：不确定性量化”，《计算物理学杂志》，第 325 卷，2016 年，第 411–421 页。[24] Viswanath, A., Forrester, A. I. J., 和 Keane, A. J.，“气动设计优化中的降维”，《美国航空航天学会期刊》，第 49 卷，第 6 期，2011 年，第 1256–1266 页。[25] Li, J., Zhang, M., Martins, J. R. R. A., 和 Shu, C.，“基于深度学习几何滤波的高效气动外形优化”，《美国航空航天学会期刊》，第 58 卷，第 10 期，2020 年，第 4243–4259 页。https://doi.org/10.2514/1.J059254.[26] Li, J., 和 Zhang, M.，“关于气动外形优化中的深度学习几何滤波”，《航空航天科学与技术》，第 112 卷，2021 年，第 106603 页。[27] Li, R., 张, Y., 和 Chen, H.，“基于变分自编码器的超临界翼型物理可解释特征学习”，AIAA 期刊，第 60 卷，第 11 期，2022 年，第 6168–6182 页。https://doi.org/10.2514/1.J061673.[28] Glaws, A., King, R. N., Vijayakumar, G., 和 Ananthan, S.，“用于翼型设计的可逆神经网络”，AIAA 期刊，第 60 卷，第 5 期，2022 年，第 3035–3047 页。https://doi.org/10.2514/1.J060866.[29] Park, J. J., Florence, P., Straub, J., Newcombe, R. A., 和 Lovegrove, S.，“DeepSdf：用于形状表示的连续有符号距离函数学习”，计算机视觉与模式识别会议，2019 年。[30] Tan, S., 和 Mayrovouniotis, M. L.，“通过优化神经网络输入降低数据维度”，《AIChE 期刊》，第 41 卷，第 6 期，1995 年，第 1471–1480 页。[31] Barrow, H. G., Tenenbaum, J. M., Bolles, R. C., 和 Wolf, H. C.，“参数对应与倒角匹配：两种新的图像匹配技术”，国际人工智能联合会议，1977 年。[32] Knupp, P.，“关于网格质量的几点说明”，技术报告，桑迪亚国家实验室（SNL-NM），美国新墨西哥州阿尔伯克基，2007 年。[33] Shen, Y., 和 Zhou, B.，“GAN 中潜在语义的闭式分解”，计算机视觉与模式识别会议，2021 年。https://doi.org/10.1109/cvpr46437.2021.00158.[34] Wei, Z., Guillard, B., Fua, P., Chapin, V., 和 Bauerheim, M.，“CFD 网格的潜在表示及其在二维翼型空气动力学中的应用”，AIAA 期刊，2023 年。[35] Paszke, A., Gross, S., Massa, F., Lerer, A., Bradbury, J., Chanan, G., Killeen, T., Lin, Z., Gimelshein, N., Antiga, L., 等，“PyTorch：一种命令式、高性能深度学习库”，《神经信息处理系统进展》，第 32 卷，2019 年，第 8024–8035 页。[36] Fukushima, K.，“认知机：一种自组织多层神经网络”，《生物控制论》，第 20 卷，第 3–4 期，1975 年，第 121–136 页。[37] Sitzmann, V., Martel, J. N. P., Bergman, A. W., Lindell, D. B., 和 Wetzstein, G.，“采用周期性激活函数的隐式神经表示”，《神经信息处理系统进展》，第 33 卷，2020 年，第 7462–7473 页。[38] Selig, M.，UIUC 翼型数据网站，伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校航空航天工程系，1996 年。[39] Kingma, D. P., 和 Ba, J.，“Adam：一种随机优化方法”，国际学习表征会议，2015 年。[40] Baqué, P., Remelli, E., Fleuret, F., 和 Fua, P.，“测地卷积形状优化”，国际机器学习会议，2018 年。[41] Economon, T. D., Palacios, F., Copeland, S. R., Lukaczyk, T. W., 和 Alonso, J. J.，“SU2：用于多物理场仿真与设计的开源工具套件”，《美国航空航天学会期刊》，2016 年。https://doi.org/10.2514/1.J053813.[42] Ioffe, S., 和 Szegedy, C.，“批归一化：通过减少内部协变量偏移加速深度网络训练”，第 32 届国际机器学习会议论文集，第 37 卷，PMLR，2015 年，第 448–456 页。

[43] Clevert, D.-A.、Unterthiner, T. 和 Hochreiter, S.，《通过指数线性单元（ELU）实现快速且准确的深度网络学习》，国际学习表征会议，2016 年。[44] LeDoux, S. T.、Vassberg, J. C.、Young, D. P.、Fugal, S.、Kamenetskiy, D.、Huffman, W. P.、Melvin, R. G. 和 Smith, M. F.，《基于 AIAA 气动设计优化讨论组测试案例的研究》，AIAA 期刊，第 53 卷，第 7 期，2015 年，1910 1935 10 2514 1 053535 第 页 – 。https://doi.org/ . / .J 。[45] He, X.、Li, J.、Mader, C. A.、Yildirim, A. 和 Martins, J. R.，《稳健的气动外形优化——从圆到翼型》，《航空航天科学与技术》，第 87 卷，2019 年，第 48–61 页。https://doi.org/10.1016/j.ast.2019.01.051。[46] Masters, D. A.、Poole, D. J.、Taylor, N. J.、Rendall, T. 和 Allen, C. B.，《形状参数化对基准问题气动优化的影响》，16。https://doi.org/10.2514/6.2016-1544。[47] Bisson, F. 和 Nadarajah, S.，《基准问题的基于伴随方法的气动优化》，2015 年。https://doi.org/10. 2514/6.2015-1948。[48] Carrier, G.、Destarac, D.、Dumont, A.、Meheut, M.、Din, I. S. E.、Peter, J.、Khelil, S. B.、Brezillon, J. 和 Pestana, M.，《使用 elsA 软件进行基于梯度的气动优化》，2014 年。https://doi.org/10.2514/6.2014-0568。[49] Lee, C.、Koo, D.、Telidetzki, K.、Buckley, H.、Gagnon, H. 和 Zingg, D.，《使用 Jetstream 对基准问题进行气动外形优化》，第53届 AIAA 航空航天科学会议，2015 年。[50] Zhang, Y.、Han, Z.-H.、Shi, L. 和 Song, W.-P.，《用于基准气动设计问题的多轮代理模型优化》，2016 年。https://doi.org/10.2514/6.2016-1545。[51] Poole, D. J.、Allen, C. B. 和 Rendall, T.，《应用于 AIAA ADODG 测试案例的基于控制点的气动外形优化》，2015 年。https://doi.org/10.2514/6.2015-1947。[52] Gariepy, M.、Trepanier, J.-Y.、Petro, E.、Malouin, B.、Audet, C.、LeDigabel, S. 和 Tribes, C.，《使用远场阻力分解结果进行直接搜索翼型优化》，2015 年。https://doi.org/10.2514/6.2015-1720。[53] Fabiano, E. 和 Mavriplis, D. J.，《非结构网格上的基于伴随方法的气动设计》，2016 年。https://doi.org/10.2514/ 6.2016-1295。