arXiv:2603.01080v1 [physics.flu-dyn] 1 Mar 2026

利用图神经网络在复杂网格上实现湍流反应流的超分辨率

Priyabrat Dash[a], *, KonduriAditya[a], Christos E.Frouzakis[b], MathisBode [c]

[a]*FLAME*实验室，印度科学研究所计算与数据科学系，班加罗尔，*560012*，印度[b]*CAPS*实验室，苏黎世联邦理工学院机械与过程工程系，*8092* 苏黎世，瑞士[c]于利希超级计算中心，于利希研究中心有限公司，于利希，*52425*，德国

摘要

最先进的深度学习模型已广泛用于从湍流的粗粒化数据中重建小尺度结构。然而，这些模型的应用主要局限于结构化均匀网格，因此难以应用于与复杂几何形状相关的数据；这类数据通常是在非均匀结构化网格或非结构化网格上进行模拟的。基于图神经网络（GNN）的机器学习（ML）模型以处理非结构化数据的能力著称，为此提供了一种颇具前景的替代方案。本研究利用具有消息传递层的图神经网络固有的灵活性，开发了一种方法，用于根据复杂网格上的低分辨率数据重建未解析的小尺度结构。我们通过两个案例验证了所提出方法的准确性：在非均匀结构化网格上的反应通道流，以及采用非结构网格的氢燃料内燃机。基于视觉一致性、统计指标和累积误差降低对结果进行评估，表明该方法能够有效地准确重建精细尺度特征。总体而言，本研究为整合数据驱动的小尺度重建与亚网格尺度建模提供了一条途径，从而提高复杂网格上粗粒化模拟的准确性。

关键词：图神经网络、湍流反应流、直接数值模拟、复杂网格

*通讯作者

新颖性与重要性声明

本研究提出一种采用消息传递层的新颖图神经网络框架，用于复杂网格上三维湍流反应流数据的无插值超分辨率。通过梯度剖面与联合概率密度函数进行的严格评估证实，该框架能够提供高保真亚网格尺度建模所需的重构精度。该方法在与内燃机等实际燃烧器相关的复杂网格上原生处理模拟数据，从而避免重采样误差，以保留关键的精细尺度特征。因此，该方法有助于推进数据驱动模型的发展，以精细化模拟数据与实验数据，从而更好地提取物理洞见。

1. 引言

湍流呈现出复杂、混沌的结构，跨越广泛的时空尺度，给预测性数值模拟带来挑战。直接数值模拟（DNS）通过解析所有具有动力学意义的湍流尺度来应对这一挑战。然而，在高雷诺数、几何形状复杂的计算域以及反应流中，此类计算的计算成本高得难以承受。因此，人们开始探索如何从成本相对较低的数值模拟中恢复未解析的流动结构。基于人工智能（AI）的超分辨率已被证明是许多科学领域中的实用工具，应用范围涵盖图像处理 [1] 至天体物理学 [2]。其基本思路是利用基于高保真数据训练的人工神经网络，为粗糙数据补充缺失特征。这也带来了许多在流体力学领域的直接应用，尤其是在湍流和燃烧方面：可定量改善含噪实验数据 [3],可开发非侵入式替代方案，以取代本质上具有侵入性的测量技术 [4], 基于降阶模型（ROM）（具体而言，即大涡模拟（LES））的数值模拟可进行局部细化，以模拟或理解受最小尺度强烈影响的物理效应；

电子邮件：priyabratd@iisc.ac.in（Priyabrat Dash）

还可便捷地生成初始条件和湍流入口 [5, 6],，并能实现对火焰前沿的完整解析 [7] 。这种方法适用范围广泛，因此有必要更详细地考察其现有不足，例如三维重建问题、对火焰前沿进行系统且准确处理的问题，以及复杂网格等技术挑战。本文朝这一方向迈出一步，展示了将基于机器学习的超分辨率准确应用于复杂网格上的反应流，且无需插值；所用模型基于图神经网络（GNN） [8]。

当前，流体动力学超分辨率模型的发展涵盖了多种深度学习技术，包括卷积神经网络（CNNs） [10], 生成对抗网络（GANs）[11], 物理信息神经网络（PINNs） [12],Transformer [13], 以及去噪扩散概率模型（DDPMs） [14]。这些方法在提升不同场景下流体模拟的分辨率方面展现出巨大潜力。采用逐像素损失训练的卷积神经网络尤其擅长捕捉局部空间特征，在重建湍流数据方面表现出色。除卷积神经网络外，生成对抗网络因能够生成高度逼真的高分辨率输出而备受关注。然而，尽管这些模型生成的结果在视觉上颇具吸引力，却往往无法保持流体行为的物理一致性，因为它们主要优化的是与训练数据的统计相似性，而非底层物理定律。物理信息神经网络（PINNs） [12] 通过将物理方程融入其架构来解决这一局限，从而确保生成的高分辨率数值模拟遵循流体力学的基本原理。尽管前景可期，但在高度湍流中，当简化方程不足以捕捉流体相互作用的全部复杂性时，物理信息神经网络仍可能难以应对，尤其是在涉及多个相互作用尺度的情况下。增强型超分辨率生成对抗网络的物理信息扩展（PIESRGANs）结合对抗损失与基于物理的损失，用于非反应和反应湍流中的亚网格建模 [15, 16]。事实证明，该方法能够有效重建湍流精细结构，而传统监督方法往往无法胜任这一任务。对抗训练过程显著增强了模型在分布外条件下的泛化能力，例如更高雷诺数下的流动 [17]。此框架的通用性随后在高压缩比直接数值模拟数据压缩 [18] 和大规模应用 [19]中得到验证。此外，物理引导的自监督模型 [20] 在捕捉耗散谱和结构函数等统计特性方面也取得了令人鼓舞的成果，而这些特性对于亚网格尺度建模不可或缺。近期，Transformer 和去噪扩散概率模型（DDPMs）已成为捕捉数据中长程依赖关系的有力工具 [13, 14],，但其极高的计算需求使其难以应用于许多典型流体动力学问题。

传统机器学习模型在流体模拟中处理非结构网格数据时往往表现不佳，因为它们通常假设使用均匀网格。这一限制妨碍了它们捕捉空间关系以及推广到复杂几何形状和网格的能力。图神经网络将传统神经网络架构扩展到图上运行，使其能够处理复杂的关系信息。图卷积（或消息传递）通过汇总邻近节点的信息来更新节点表示，是许多图神经网络模型的基础。图注意力机制等进一步改进 [21]会为邻居分配可学习的权重，以优先关注重要邻居；而图自编码器 [22]则支持以无监督或有监督的方式学习紧凑表示。GraphSAGE [23]采用邻域采样，以高效处理大规模图。Point-Net [24], 虽然严格来说并非图神经网络，但具备类似能力，可处理无序点云数据，因此也适用于基于图的任务。这些技术共同构成了一个稳健的框架，能够应对流体模拟中非结构化数据带来的挑战。

Battaglia 等人 [9]提出了图神经网络（GNN）的标准化表述，并概述了此类架构的关键设计原则。此后，图神经网络被广泛用于加速多个领域的计算模拟，包括分子动力学 [25], 、刚体动力学 [26], 和连续介质力学 [27], ，涵盖欧拉形式和拉格朗日形式。一项开创性工作是 Mesh-GraphNet [27], ，这是一种通用且可扩展的基于网格的模型，能够预测多种物理系统的动力学。该模型采用自回归的编码器-处理器-解码器架构，分别对欧拉域中的流动和拉格朗日域中的变形进行有效建模。在此基础上，多尺度图神经网络 [28] 引入了一种层次化方法，通过逐步对图进行下采样和上采样，在多个尺度上处理信息，类似于 U-Net 架构。该模型显著提高了推理速度，并增强了长推演时长下的稳定性；这对于自回归模拟至关重要。

图神经网络也被用于非均匀网格上的流体模拟数据处理任务，例如可解释压缩和超分辨率。Barwey 等人[29] 提出了一种多尺度图自编码器，能够有效捕捉相干结构在可解释潜在空间中的演化。该模型的精简版本 [30]采用了同步层，并用于对基于伽辽金的方法得到的快照进行可学习上采样，类似于

style id='1'>p 加密，即提高基函数的多项式次数以改善分辨率。研究通过两个案例展示了该方法的有效性：泰勒–格林涡和后向台阶，并评估了模型的几何外推能力。尽管基于图神经网络的超分辨率已应用于非反应流，但将其扩展到复杂网格上的湍流反应流会带来与火焰前沿相关的额外挑战。在粗网格上，反应区会被人为加厚，导致温度和组分梯度模糊，并可能扭曲湍流与化学反应之间的耦合。因此，面向反应流的超分辨率策略必须同时恢复小尺度流动结构和火焰结构。本研究旨在开发一种基于图神经网络的框架，用于重建复杂网格上湍流反应流的未解析特征，目标是恢复完整的热化学和流体动力学标量场，包括火焰前沿两侧精确的组分和温度分布。本文的主要贡献如下：

- 我们构建了一种基于图神经网络的框架，该框架采用消息传递层，可在非均匀结构网格上对三维湍流反应流数据进行无需插值的超分辨率重建。
- 对于非结构网格，我们以类似于谱元法中*p*-加密的方式构建超分辨率方法：将粗网格解表示在更高阶网格上，并由图神经网络直接在目标高分辨率自由度处推断未解析内容。
- 我们在两个应用中评估了该框架：一个是在非均匀结构化网格上的反应通道流，另一个是在非结构网格上的、具有实际应用意义的贫氢内燃机配置。

本文其余部分的组织如下。第2节介绍图生成和深度学习框架。第3节描述数据集，其中包括非均匀结构网格和非结构网格。第4节展示并讨论结果，第5节总结主要发现和未来研究方向。

2. 图生成与深度学习方法

基于深度学习的超分辨率框架接收一个粗网格场 $\mathcal{I}_{LR}$，并预测相应的高分辨率重建结果 $\mathcal{I}_{SR}$。训练期间，通过对高分辨率参考场 $\mathcal{I}_{HR}$ 进行下采样或滤波来构建配对数据，以获得 $\mathcal{I}_{LR}$。随后，通过最小化定义在$\mathcal{I}_{SR}$ 与 $\mathcal{I}_{HR}$之间差异上的损失函数来优化网络。推理期间，仅提供 $\mathcal{I}_{LR}$，并使用训练好的模型生成 $\mathcal{I}_{SR}$，而无需访问 $\mathcal{I}_{HR}$。在实践中，为了应对训练和推理期间的内存限制，通常会将三维场划分为更小的子域。

使用结构化均匀网格时，这些子域适用于卷积神经网络（CNN），因为卷积神经网络无需对节点的空间信息进行编码。对于复杂网格，必须将各个子域的数据从结构化四维张量数据重新表述为图表示，其中包含节点、边及相应特征，以供图神经网络（GNN）处理。接下来，我们将介绍非均匀网格和非结构网格数据集的生成过程，以及网络架构和训练设置的详细信息。所提出框架的示意图如图 1 所示。

2.1. 结构化非均匀网格数据

对于结构化非均匀网格数据，$\mathcal{I}_{HR} \in \mathbb{R}^{N_s \times N_x \times N_y \times N_z}$，其中$N_s$,$N_x$,$N_y$,$N_z$ 分别表示各空间方向上的变量数和节点/单元数。在本研究中，通过对每个池化区域内的变量取算术平均值进行平均池化，对 $\mathcal{I}_{HR}$ 进行滤波，从而生成低分辨率数据$\mathcal{I}_{LR}$。随后使用成对的 $\mathcal{I}_{HR}$ 和 $\mathcal{I}_{LR}$ 训练超分辨率模型。使用标准插值方案可将 $\mathcal{I}_{LR}$ 上采样至原始分辨率，所得结果记为 $\mathcal{I}_{Int}$。对于非均匀结构化网格，我们采用了三线性插值。尽管 $\mathcal{I}_{Int}$ 与 $\mathcal{I}_{HR}$具有相同的分辨率，但在下采样过程中被滤除的小尺度结构无法恢复。按照文献 [15]中的方法，$\mathcal{I}_{Int}$ 可作为超分辨率预上采样模式的输入。

由于所用图形处理器的内存限制，分别从 $\mathcal{I}_{HR}$ 和 $\mathcal{I}_{Int}$中提取大小为$N_s \times 32^3$ 的子域。这些子域被展平，以确保与 PyTorch-Geometric 框架 [31], 兼容，并分别记为 $\mathbf{\Phi}^i$ 和$\hat{}\mathbf{\Phi}^i$，其中每个子域的维数为$N_n \times N_s$，N_n 和i分别表示子域中的节点数和子域索引。每个子域 $\mathbf{\Phi}^i$进一步分解为

$$\mathbf{\Phi}^i = \{\boldsymbol{\phi}^i_1, \boldsymbol{\phi}^i_2, \ldots, \boldsymbol{\phi}^i_{N_n}\}^T \tag{1}$$

其中在每个节点处

$$\boldsymbol{\phi}^i_j = \{\boldsymbol{u}^i_j, T^i_j, p^i_j, \rho^i_j, \mathbf{Y}^i_j\} \tag{2}$$

表示归一化速度向量、温度、压力、密度和组分质量分数。对于$\hat{}\mathbf{\Phi}^i$ 数据也采用类似的记法。此外，子域i中节点的位置数据表示为

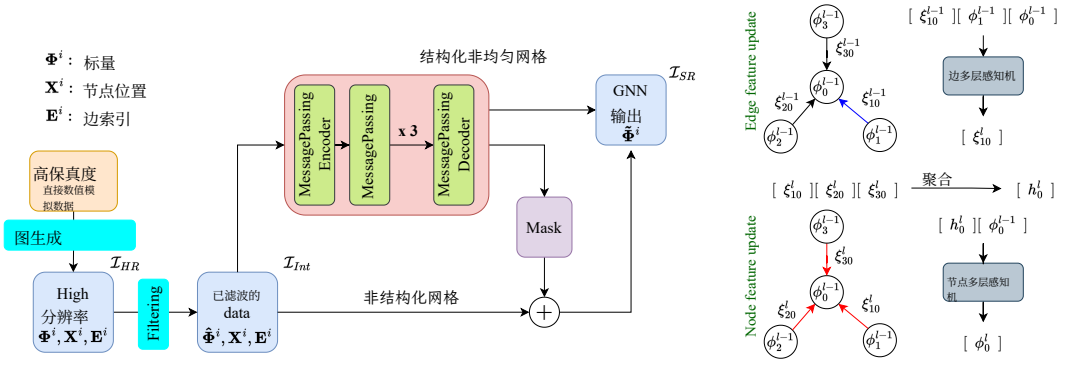

图 1：用于超分辨率的图神经网络框架示意图（左），以及消息传递层（右），展示了边特征更新、边特征聚合和节点特征更新。

表示为

$$\boldsymbol{X}^i = \{\boldsymbol{x}_1^i, \boldsymbol{x}_2^i, \ldots, \boldsymbol{x}_{N_n}^i\}^T, \tag{3}$$

这在高分辨率和插值两种情况下均保持一致。通过考虑沿主轴方向的节点一跳邻居，为每个节点定义一个邻域，因此每个节点最多有 7 个邻居（包括自连接）。根据节点在子域中的位置，邻居数量可在 4 个（角节点）到 7 个（内部节点）之间变化。子域i 中节点j的邻居集合表示为 $\mathcal{N}^i(j)$，图的邻接关系由有序对表示

$$\boldsymbol{E}^i = \{(j,k) \,|\, \{j,k\} \in \boldsymbol{\Phi}^i,\ k \in \mathcal{N}^i(j)\}. \tag{4}$$

因此，每个子域都表示为一个图 $\mathcal{G}^i = (V^i, \boldsymbol{E}^i)$，其中节点$V^i$ = （$\hat{\boldsymbol{\Phi}}^i, \boldsymbol{\Phi}^i$）对应于训练所用的输入和输出特征。按照 PyTorch-Geometric 框架，有向边特征初始化为

$$\boldsymbol{\xi}_{jk}^i = \{\boldsymbol{\phi}_j^i - \boldsymbol{\phi}_k^i,\ \boldsymbol{x}_j^i - \boldsymbol{x}_k^i,\ \|\boldsymbol{x}_j^i - \boldsymbol{x}_k^i\|_2^2\}, \tag{5}$$

概括相连节点之间在标量、相对位置以及欧几里得距离上的差异。

2.2. 非结构网格数据

针对非结构网格数据的图数据集生成需要明确定义单元之间的邻域映射。在本工作中，我们关注从谱元求解器获得的数据集（细节见下一节），其中三维域采用协调六面体单元进行离散，每个单元内沿每个方向使用八个高斯-勒让德-洛巴托求积点，用于所选的p = 7阶拉格朗日多项式近似。每个谱元被视为一个图，单元节点作为图节点，其“单元内”邻居定义局部连通性。

通过仅选取角节点（即每个方向两个节点），可获得单元的低分辨率表示，从而实现下采样将标量从七阶（p = 7）降至一阶（p = 1）单元。随后使用反距离加权将数值插值回p = 7空间。每个方向有八个节点时，每个谱元包含 512 个节点。训练时，将从计算域中采样的N_b = 768个单元拼接起来构成一个图。每个节点有N_s = 14 个变量，$\boldsymbol{\Phi}^i$和$\mathbf{X}^i$在本例中的维度分别为（$N_b \times 512$）×14 和（$N_b \times 512$）×3。需要强调的是，对于非结构化网格，本研究中的上采样率约为 8×，这对湍流反应流而言颇具挑战。尽管该数据提取策略是在谱元法的背景下开发的，但也可扩展到其他非结构离散方法，例如有限体积法。在这类方法中，图节点可表示单元中心，而边则可通过面邻接或基于模板的连通性来定义。

2.3. 图神经网络（GNN）细节

所采用的模型[1] 基于编码器-处理器-解码器架构，如 Pfaff 等人 [27]所述。在基于图的深度学习模型范式中，每一层都可以表述为消息传递（MP）层。在本工作中，我们使用针对我们的数据集定制的专用 MP 版本。该模型包含五个 MP 层，其中第一层充当编码器，最后一层充当解码器。在每一层中，来自上一层的边特征（$\boldsymbol{\xi}^{i,l-1}_{jk}$）首先通过多层感知机（$\mathrm{MLP}_e^l$）的$l^{\text{th}}$层，得到更新后的边特征 $\boldsymbol{\xi}^{i,l}_{jk}$。对于初始层（$l$ = 0），边特征按式 (5) 所述进行初始化。边特征更新过程由

$$\boldsymbol{\xi}_{jk}^{i,l} = \mathrm{MLP}_e^l(\boldsymbol{\xi}_{jk}^{i,l-1}, \boldsymbol{\phi}_j^{i,l-1}, \boldsymbol{\phi}_k^{i,l-1}). \tag{6}$$

随后，与节点相连的所有边所对应的边特征将使用一种av电影

[1]论文录用后将提供简化版图神经网络。

置换不变函数对与某个节点相连的所有边所对应的边特征进行聚合。这里，我们采用均值作为聚合函数，

$$\boldsymbol{h}_j^{i,l} = \frac{1}{|\mathcal{N}(j)|} \sum_{k \in \mathcal{N}(j)} \boldsymbol{\xi}_{jk}^{i,l}. \tag{7}$$

随后将聚合后的边特征与节点特征拼接，并输入节点多层感知机的l^{th}层（记为 $\text{MLP}_{\boldsymbol{\phi}}^{l}$），以生成更新后的节点特征，

$$\boldsymbol{\phi}_j^{i,l} = \text{MLP}_{\boldsymbol{\phi}}^{l}(\boldsymbol{h}_j^{i,l}, \boldsymbol{\phi}_j^{i,l-1}). \tag{8}$$

多层感知机的输入和输出维数由边特征和节点特征的维数决定，而所有多层感知机的中间特征数均固定为 128，如 [27, 30] 所示。选择指数线性单元（ELU）激活函数，是因为它在实数空间中具有非线性，且激活值的均值接近于零，这有助于高效学习科学数据集中的复杂关系。

与数据生成过程类似，将网络应用于插值数据以生成超分辨率输出（$\tilde{\boldsymbol{\Phi}}^i$）时，针对所考虑的两种网格类型，处理方式有所不同。对于非均匀结构网格，子域之间互不重叠，因此每个节点位置都属于唯一的一个子域。因此，给定模型参数（θ），上采样过程可表示为

$$\tilde{\boldsymbol{\Phi}}^i = \text{GNN}(\hat{\boldsymbol{\Phi}}^i, \boldsymbol{X}^i, \boldsymbol{E}^i; \theta), \tag{9}$$

这理想情况下有助于在更大的尺度上传播信息，使大多数节点拥有最多五跳邻居。

另一方面，用于非结构网格数据的图神经网络按元素逐一处理 [30]。在一个单元内有两类节点：一类同时属于 $p = 1(\mathcal{I}_{LR})$ 和 $p = 7(\mathcal{I}_{HR}, \mathcal{I}_{Int}$，以及 $\mathcal{I}_{SR})$，另一类仅存在于 $p = 7$ 单元中。此处，超分辨率模型只应预测不属于 $\mathcal{I}_{LR}$ 的节点处的值。为此，引入掩码变量 $\boldsymbol{M}^i$，对上采样方程作如下修改

$$\tilde{\boldsymbol{\Phi}}^i = \hat{\boldsymbol{\Phi}}^i + \boldsymbol{M}^i \odot \text{GNN}(\hat{\boldsymbol{\Phi}}^i, \boldsymbol{X}^i, \boldsymbol{E}^i; \theta), \tag{10}$$

此处，$\odot$ 表示逐元素乘法，$\boldsymbol{M}^i$ 在第一类节点（位于单元顶点处）上设为零，在其他位置设为一。

2.4. 卷积神经网络（*CNN*）基线

为了建立一个有意义的参照，用于评估所提出的基于图神经网络的框架的性能，我们还针对结构化网格情况加入了一个基线卷积神经网络。这样选择是经过深思熟虑的，因为卷积模型和补丁注意力模型本质上都假设网格是结构化且间距均匀的，因此不适用于许多实际数值模拟中遇到的不规则网格。为确保比较公平，卷积神经网络的设计与图神经网络在复杂度上相匹配，具有相同的五层深度和128个中间通道，从而隔离网络架构而非模型容量的影响。该基线的工作流程包括几个步骤：首先将非均匀网格上的数据映射到具有相同网格点数量的均匀网格上；卷积神经网络完全在这一均匀空间中训练和评估；然后将预测输出映射回原始分辨率，以进行后处理和分析。训练过程中观察到，在几乎所有超参数扫描中，该情况下的验证损失都在750个训练轮次时停滞不前。

2.5. 训练

训练过程采用 PyTorch[32]，提供的分布式数据并行框架实现，从而兼容多节点、多图形处理器架构。损失函数定义为标量场的均方误差（MSE），并针对每个 N_n 个子域分别计算：

$$\mathcal{L}^i = \frac{1}{N_n} \|\hat{\boldsymbol{\Phi}}^i - \boldsymbol{\Phi}^i\|_2^2. \tag{11}$$

模型使用约 90% 的子域进行训练，其余 10% 用于验证，以监控泛化能力并防止过拟合。初始学习率设为 6×10^{-4}，每当损失在 100 个训练轮次的时间窗口内停滞时，就手动减半。训练和推理均在于利希超级计算中心的计算系统上进行，使用的节点配备了四个 NVIDIA GH200 超级芯片或四个 NVIDIA A100 GPU。GH200 超级芯片搭载 Hopper GPU，每个配备 96 GB HBM3 内存。A100 GPU 每个配备 40 GB HBM2 内存。数据集的详细信息将在下一节介绍。

3. 数据集

表1：概述案例 1 和案例之间差异的表格 2.

	案例 1	案例 2
Mesh	结构化非-均匀的	非结构化
几何	典型	真实规模
求解器	可压缩	低马赫数
每个实例的节点数	6306万	37.8亿
每个节点的自由度	29	14
演示	比较 采用卷积神经网络作为基础模型 line	分布外外推 。

3.1. 案例 *1*：反应通道流

第一个数据集 [33, 34]包含使用高阶有限差分代码生成的完全可压缩反应流的十二个时间瞬间，该流动通过直接数值模拟（DNS）获得，

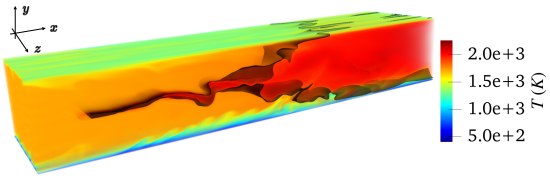

图 2：通道内温度的体绘制，火焰表面以黑色表示。

所用代码为 NTMIX-CHEMKIN [35]。本研究 [36] 旨在考察热燃烧产物稀释的预混甲烷/空气火焰中的火焰-壁面相互作用。计算域包含湍流入口，入口处速度和温度波动相互耦合；出口为非反射出口，z方向具有周期性。等温壁面的温度从入口混合物温度平滑变化至下壁面的 400 K 和上壁面的 1200 K。计算域的长宽比为 12:2:3，分辨率为 $1001 \times 251 \times 251$。$x$ 和z方向的网格间距均匀，而y 方向在壁面附近进行了加密，以捕捉壁面效应。化学动力学由基于 GRI 3.0 得到的 23组分205步反应解析简化机理描述。中平面上靠近入口处的一个圆柱形热点使通道内的三维湍流V形火焰得以稳定。数据集中的每个样本包含 29 个场（速度、温度、压力、密度和质量分数），其中每个节点上的标量值均为一个自由度（DoF）。图 2 展示了反应通道瞬时流场的概貌。模型训练了 5900 训练轮次；使用 16 个超级芯片时，每轮平均耗时 13.3 秒（计入输入/输出后，平均负载为每个超级芯片每轮 0.4110 亿自由度）。

3.2. 案例 *2*：稀燃氢内燃机

对于非结构网格案例，我们考虑一个数据集，该数据集来自达姆施塔特工业大学光学发动机中稀燃氢燃烧的先进直接数值模拟（DNS） [37]。计算域是一个单缸火花点火发动机，采用屋脊形四气门缸盖。发动机以 800 转/分钟运行，进气压力为 0.4 bar，当量比为 $\phi = 0.4237$ [38]。动力学由 [39] 的详细机理描述，该机理包含 9 种组分和 23 个反应。DNS 使用 nekCRF [40], 执行；它是一种基于 nekRS [41] 的谱元低马赫数反应流求解器，针对大规模并行异构架构进行了优化。图 3 展示了发动机几何结构内复杂流动环境的一个代表性快照。

模型使用点火开始后 8.8 曲轴转角度数时的状态进行训练，此时

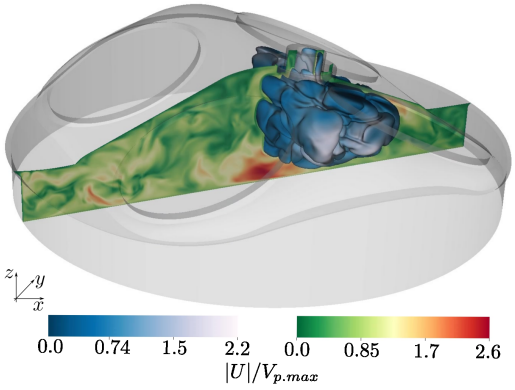

图 3：火焰前锋等值面叠加在发动机中平面上的归一化速度幅值分布图上。

点火核已形成传播前沿，且计算域中已燃区和未燃区所占比例均相当可观。计算域采用 738 万个六面体谱元进行离散，解由 7 阶多项式近似。每个节点包含 14 个标量，因此该流程预计需要处理约 529.2 亿个自由度，这对科学机器学习构成了巨大挑战。模型在此数据集上训练了 2750 个训练轮次。使用 64 个超级芯片，平均负载为每个超级芯片每个训练轮次 7.44 亿个自由度/秒（包括输入/输出），每个训练轮次的平均墙钟时间为 58.6 秒。两种情况的差异总结于表1。

4. 结果

为分析案例 1 中的图神经网络超分辨率（SR）框架，我们选取了一个未用于训练过程的检查点。推理过程在几个关键方面与训练过程不同。首先，除了前文所述的 32^3 子域外，我们还在各个方向上为计算域增加了一个单元厚的缓冲区域。训练期间， 32^3 子域中的每个节点最多可有七个邻居（每个空间方向上两个，另加一个自连接）。然而，根据节点在子域中的位置，有些节点只有四个、五个或六个邻居，这可能会在推理时引入窗函数伪影。为减轻这一影响，我们在完整模拟域（$1001 \times 251 \times 251$）的各个方向上填充一层节点，将其扩展至 $1003 \times 253 \times 253$。这样，我们便可在推理时使用 34^3 子域，并仅保留内部节点，确保每个保留节点始终有七个邻居。此外，我们还采用适当的填充方式，以保持边界条件的一致性。在完整检查点层面，沿z方向采用周期填充，而沿

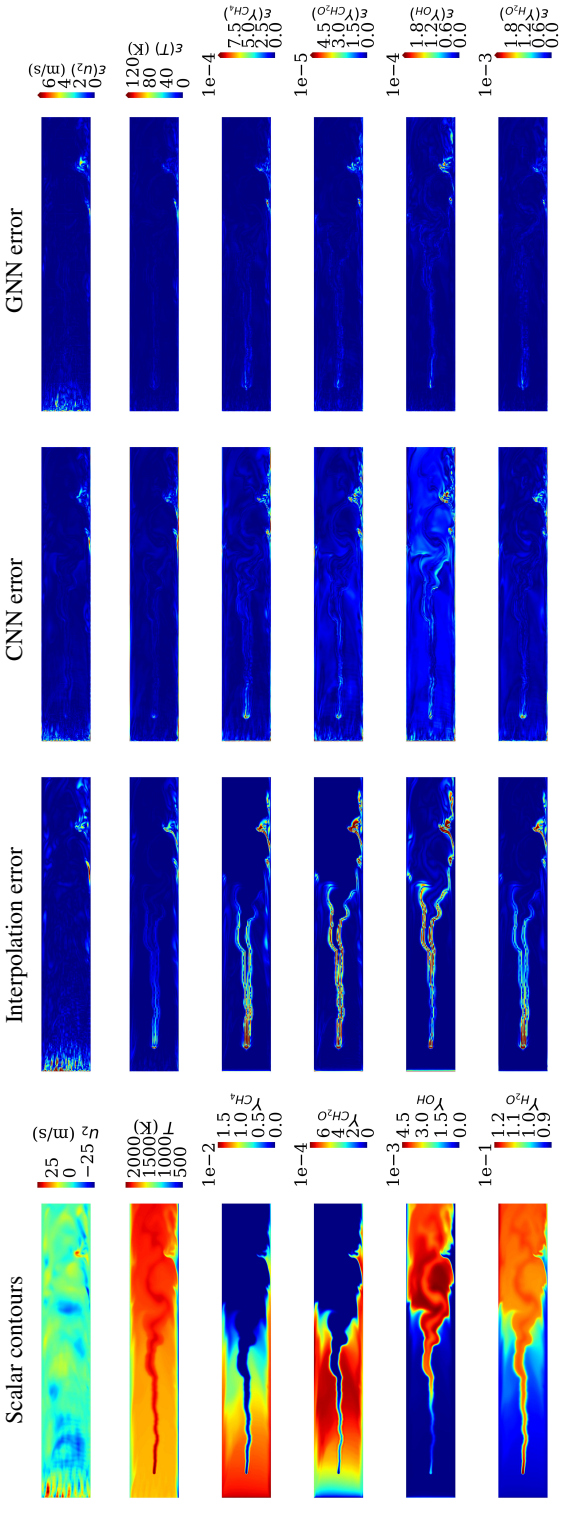

Fig. 4: Error reduction by GNN compared to trilinear interpolation and CNN baseline for Case 1. **Column 1:** Contours of key variables shown for the center-plane along z. **Columns 2, 3, and 4:** Contours of absolute errors ϵ between ground truth (DNS solution) and the results of interpolation, CNN, and GNN.

表2：百分比　不同上采样方法下各标量在不同区域的平均误差　　am方法。

区域	模型	u_1	u_2	u_3	T	ρ	Y_{CH_4}	Y_{O_2}	Y_O	Y_{OH}	Y_{CH_2O}	Y_{CO}	Y_{CO_2}	Y_{H_2O}
底壁	GNN	1.17	9.02	5.22	0.58	0.93	0.47	0.25	2.90	2.80	0.77	0.72	0.07	0.11
	插值	1.76	13.85	8.39	1.17	2.59	0.78	0.41	4.34	4.72	1.07	1.17	0.08	0.14
	CNN	6.22	14.67	11.44	3.44	8.22	1.31	0.70	18.82	16.70	1.98	2.20	0.28	0.31
中心	GNN	0.23	3.01	2.90	0.07	0.12	0.29	0.17	0.36	0.30	0.35	0.22	0.05	0.04
	插值	0.22	5.78	5.20	0.15	0.19	1.02	0.59	1.17	1.04	1.23	0.69	0.13	0.11
	CNN	0.51	3.07	3.08	0.13	0.79	0.73	0.39	1.42	1.49	0.98	0.51	0.08	0.10
顶部壁面	GNN	0.54	5.38	3.21	0.11	0.15	0.25	0.12	0.57	0.55	0.33	0.25	0.03	0.04
	插值	0.85	8.59	5.28	0.19	0.24	0.27	0.14	0.73	0.88	0.38	0.31	0.03	0.04
	CNN	3.45	10.27	8.28	1.03	1.95	0.91	0.48	2.44	3.35	1.02	0.95	0.16	0.13

计算域的x方向和y方向，以保持计算域的完整性。

图4第一列展示了沿z方向在中心平面提取的关键标量场等值线，包括横向速度分量（u_2）、温度以及 CH_4, CH_2O、羟基和 H_2O 的质量分数。其他列比较了插值场（$\mathcal{I}_{Int}$）与高分辨率真实值（$\mathcal{I}_{HR}$）之间的绝对误差（第二列），以及相对于基于卷积神经网络的输出（$\mathcal{I}_{CNN}$）和基于图神经网络的输出（$\mathcal{I}_{SR}$）的绝对误差（分别为第三列和第四列）。对于u_2，，插值场中可见的零散偏差在卷积神经网络输出中有所减少，并在图神经网络重建中进一步受到抑制。温度也呈现出类似趋势，火焰前沿和底壁附近的局部误差在 $\mathcal{I}_{SR}$中明显减小。相比之下，卷积神经网络降低了火焰处的峰值误差，却在整个计算域引入了空间上弥散的偏差。对于存在于预混火焰不同区域（从反应物到产物）的标量，图神经网络始终能在火焰和底壁附近出现差异的区域将其最小化。卷积神经网络输出在火焰附近表现出类似特征，但在整个计算域仍保留着范围更广的误差。计算域后端底壁附近的错误区域在 $\mathcal{I}_{Int}$中尤为明显，在卷积神经网络结果中有所减小，在图神经网络结果中则大幅减弱。这表明，与插值和卷积神经网络（作为数据驱动基线）相比，采用图神经网络进行上采样能更好地匹配真实值，尤其是在对从直接数值模拟数据中提取基本见解至关重要的区域。

为评估训练模型的整体准确性，我们计算每个标量场的全域积分误差，并以对应的真实值幅值进行归一化，表示为

$$\text{Cumulative error} = 100 \times \frac{\sum |\mathcal{I}_{rec.} - \mathcal{I}_{HR}|}{\sum |\mathcal{I}_{HR}|}, \quad (12)$$

其中 $\mathcal{I}_{rec.}$ 和 $\mathcal{I}_{HR}$ 分别表示重构场和高分辨率场，求和在整个计算域上进行。如图5所示，图神经网络显著地降低了插值引入的误差，对流体动力学标量的降幅为20%至40%，对热化学标量则观察到更大的改善。相比之下，卷积神经网络基线除横向和展向速度分量外，对所有标量都引入了额外误差，总体表现差于插值。

为研究重构误差的空间分布，我们根据壁面法向位置将计算域划分为三个区域：邻近底部和顶部边界的近壁区（分别占前后 10%）以及覆盖中间 80% 的中心区域，如表2所示。在近壁区，图神经网络的误差始终最低，其次是插值，而卷积神经网络的表现最差。在中心区域，对于大多数标量，卷积神经网络产生的误差低于插值；这与卷积滤波器/卷积核天然适配局部均匀网格这一事实相符，因此，相较于插值，它们能够更好地利用该处平滑的空间相关性。尽管如此，图神经网络产生的误差仍低于插值和卷积神经网络，凸显了图神经网络模型在整个计算域内准确重构各类标量场时的稳健性，也进一步证明了其优于卷积神经网络基线。因此，以下讨论仅聚焦于图神经网络输出与插值之间的比较。

为了进一步评估该框架，我们比较了 $\mathcal{I}_{SR}$ 和 $\mathcal{I}_{Int}$ 与 $\mathcal{I}_{HR}$ 的联合概率密度函数（PDF）（图6）。这项分析超越了逐点误差指标，能更全面地展现各方法对底层数据分布的捕捉效果。对于u_2，$\mathcal{I}_{Int}$ 存在显著偏差，即使在均值处也是如此；训练后的图神经网络显著减小了这些偏差，但仍有轻微差异。同样，对于 CH_4, CH_2O 和羟基的质量分数，$\mathcal{I}_{Int}$ 中观察到的差异在 $\mathcal{I}_{SR}$中大幅减小。该模型有效捕捉了数据中复杂的统计依赖关系，在非均匀网格上取得了合理的精度。

可靠的梯度重构对于湍流反应流的超分辨率至关重要，因为准-

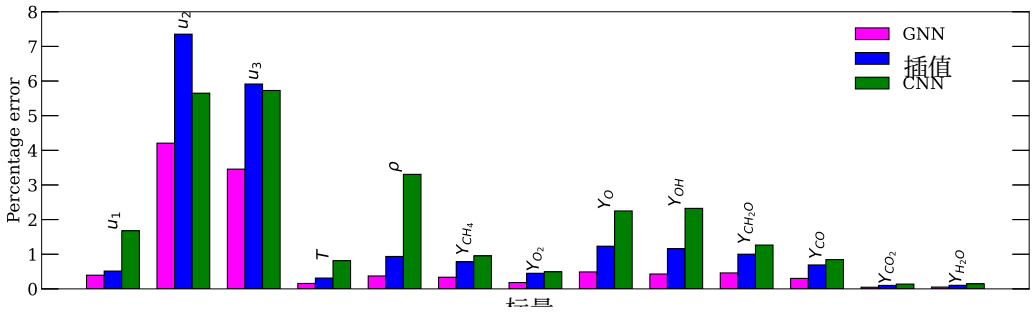

图5：案例 1 中所有上采样方法下选定标量的累积误差百分比。

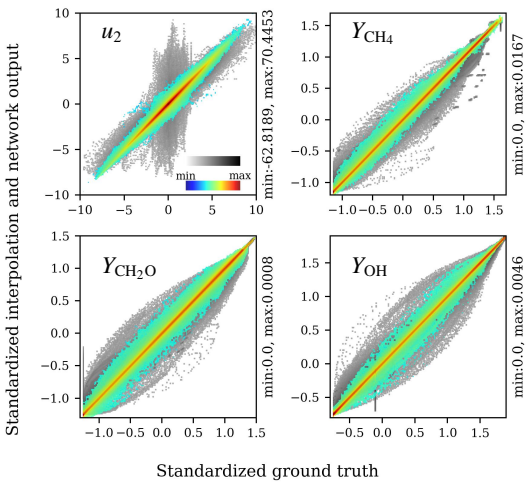

图6：案例 1 中，速度横向分量和三种组分的质量分数的插值/网络输出与真实值之间计算得到的联合概率密度函数。插值采用灰度配色方案，图神经网络输出采用 Jet 色图。

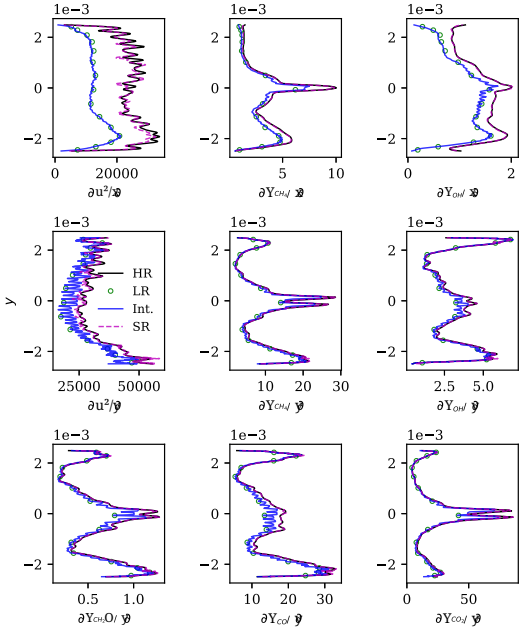

图7：沿横向（y）绘制的标量梯度均方根剖面比较。**第 1 行：**流向（x）梯度；**第 2、3 行：**横向（y）梯度。

确的梯度对于维持物理一致性至关重要，尤其是在火焰前沿等变化剧烈的区域。高频细节往往在粗尺度表示中丢失，而要获得真实的高分辨率预测，则依赖于准确的梯度估计。此外，改进的梯度重构通过增强亚网格尺度（SGS）模型来强化大涡模拟（LES），从而实现更好的湍流封闭和更准确的流动模拟。为对此进行评估，我们在图7中绘制了整个计算域内所选标量梯度的均方根（RMS）剖面，并重点关注流向与横向。

第一行表示流向上的梯度，可观察到 $\mathcal{I}_{Int}$ 与 $\mathcal{I}_{SR}$ 之间存在显著差异。训练后的图神经网络有效地减小了这些误差。 $\mathcal{I}_{SR}$ 与 $\mathcal{I}_{HR}$高度吻合，只有在 $\partial u_2/\partial x$处存在轻微偏差。第二行和第三行关注网格拉伸方向上的横向梯度。由于间距不均匀，插值会导致这些梯度出现明显波动。不过，该网络有效地减轻了这些伪影，缩小了插值数据与真实值之间的差异。这表明，即使存在网格诱导畸变，该网络仍能准确恢复梯度。

我们将焦点转向案例 2，其特点是具有一种几何-

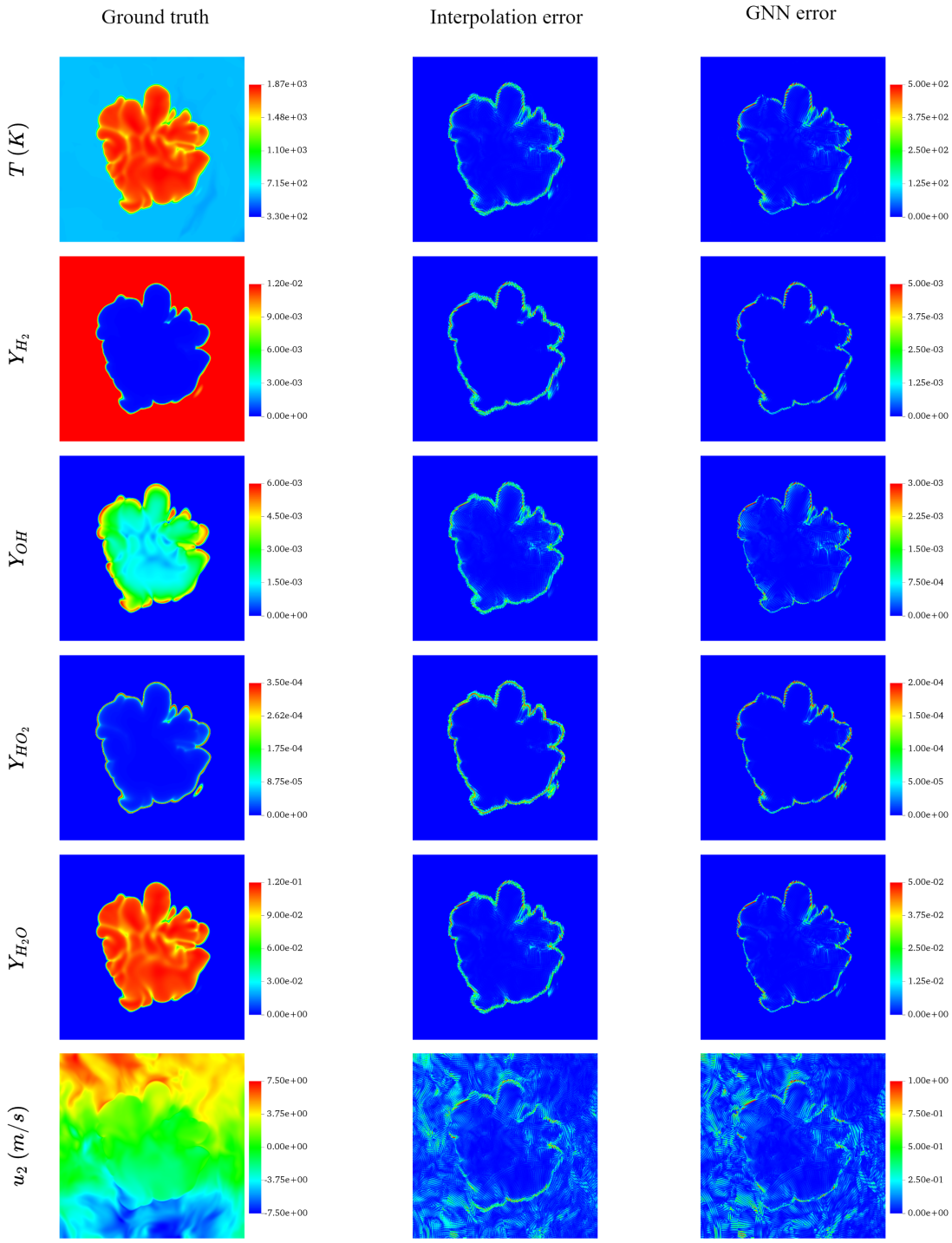

图 8：案例 2 中图神经网络相较于插值的误差降低。**第1列：**沿z 方向近似将火焰前沿分成两半的切面上关键标量的等值线。温度、H_2, OH、HO_2, 和 H_2O 的质量分数以及y–速度相对于真实值的偏差，以插值（**第1列**）和图神经网络输出（**第1列**）的绝对误差表示。

在非结构化网格上模拟了具有实际应用意义的几何构型。与案例 1 不同，此处省略填充，以专注于实现单元内部的超分辨率。值得注意的是，内燃机的设置并未达到统计稳态，且由于活塞压缩和火焰前沿推进，系统行为随时间显著变化。因此，在不同曲轴转角值下的快照上进行训练和测试，本身就能检验模型的泛化能力。推理时，将每个单元视为独立的图；随后通过直接刚度求和将所得场拼接起来：汇集并合并多个单元共有节点处的预测贡献，得到单一数值。此组装步骤确保每个共享节点处的每个标量都具有唯一且一致的值，从而在整个网格上生成全局连续的重建场。

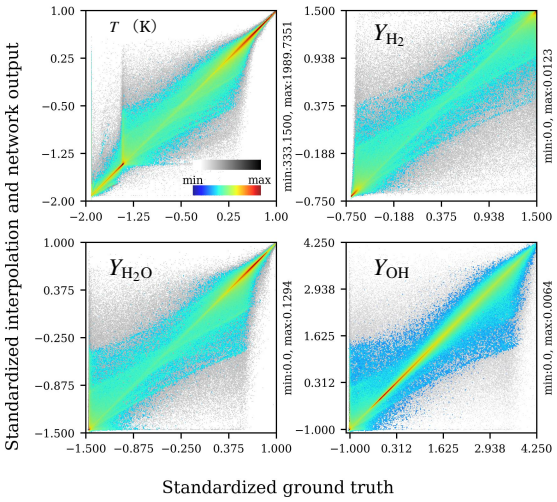

图9：案例 2 中，温度和三种组分的质量分数的插值/网络输出与真实值之间计算得到的联合概率密度函数。插值采用灰度配色方案，图神经网络输出采用 Jet 色图。

图 8 展示了一个大致平分推进中火焰前沿的 z–平面上的标量等值线。第一列给出了y–速度、温度以及关键化学物种（H_2, H_2O、羟基（OH）和过氧羟基（HO_2）自由基）的质量分数的真实值（$\mathcal{I}_{HR}$）。第二列和第三列分别展示了 $\mathcal{I}_{Int}$ 和 $\mathcal{I}_{SR}$ 的预测结果与真实值之间的绝对误差。值得注意的是，基于低分辨率数据得到的 $\mathcal{I}_{Int}$对于该计算域尺寸而言已具备较高分辨率，因为其中包含大量单元，其误差大多集中在火焰前沿。在此情况下，与 $\mathcal{I}_{Int}$相比，超分辨率起到有针对性的细化作用，缩小了三个标量的误差区域。这一点尤为重要，因为湍流燃烧中的降阶模型本质上具有非线性，即使是微小的改进，对于保持物理精度也至关重要。

为完整起见，我们还考察了y方向的速度分量，该分量垂直于活塞运动方向。在此配置下，该分量反映了发动机几何结构引起的大尺度滚流，以及火焰前沿膨胀引起的流动。与主要偏差局限于反应区的热化学标量不同，u_2 场的误差分布在整个关注区域内，呈现出两种明显的模式。一种与火焰前锋拓扑一致，另一种则表现为空间上零散分布的斑块。总体而言，绝对误差较小，大部分低于 10%。与热化学场的情况一致，超分辨率降低了沿火焰前沿集中的误差。然而，分布范围更广的偏差仍然存在。解决这一残余误差分量——它并非与火焰前沿唯一相关——被视为未来研究的一个方向。

由于内存限制，提取了一个涵盖火焰前沿和燃烧区域的子域，以确保对所有变量的节点进行充分采样——进一步量化了所观察到的差异和改进。图9中的联合概率密度函数（PDF）进一步量化了所观察到的差异和改进。与图6中的趋势一致，$\mathcal{I}_{Int}$ 和 $\mathcal{I}_{HR}$ 的分布表现出明显的不一致，这反映在嘈杂的联合分布中。总体而言，超分辨率提高了所有标量与真实值之间的一致性。对 $\mathcal{I}_{SR}$ 进行更细致的标量特异性分析后，可以发现三种不同的行为。对于温度，$\mathcal{I}_{Int}$ 和 $\mathcal{I}_{HR}$ 在两端区域（分别对应反应物区和产物区）均表现出更高的准确性，而火焰前沿附近的中间区域仍然难以重建。相比之下，H_2 的质量分数在两端存在局部误差，但在火焰前沿附近的准确性有所提高。对于H_2O和OH的质量分数，峰值（产物区）处的误差对于 $\mathcal{I}_{Int}$ 而言已经很小，并且通过 $\mathcal{I}_{SR}$得到了良好保留。在这些峰值附近，$\mathcal{I}_{SR}$ 进一步降低了误差；而在低值区域（反应物区），尽管有明显改进，$\mathcal{I}_{SR}$ 仍表现出轻微的残余噪声。这些观察结果表明，插值技术会对超分辨率性能产生可测量的影响，凸显了未来研究中采用与插值方法无关的超分辨率方法的必要性。

最后，按照公式（12）计算累积误差，并列于表3。值得再次强调的是，由于元素数量庞大，低分辨率场及其相应的插值场已经具有较高的分辨率，尽管尚未达到直接数值模拟的水平。

表3：比较 使用反距离加权插值和超分辨率方法时 所有标量的百分比误差。

	u_1	u_2	u_3	p	T	Y_{H_2}	Y_{O_2}	Y_{H_2O}	Y_H	Y_O	Y_{OH}	Y_{HO_2}	$Y_{H_2O_2}$
插值	5.23	5.30	6.63	0.75	0.67	0.23	0.13	1.22	31.46	16.38	4.66	42.27	27.65
超分辨率	4.38	4.46	5.35	0.62	0.54	0.19	0.10	0.96	25.36	12.88	3.64	34.27	22.44
降低（%）	16.25	15.85	19.31	17.33	19.40	17.39	23.08	21.31	19.39	21.37	21.89	18.93	18.84

在水动力学标量中，除压力外，误差都很小。温度以及反应物和产物组分的误差更低，而中间组分的偏差则明显更大。对于每种热化学标量，远离火焰前沿的区域变化较小。由多层感知机构成的基于图神经网络的超分辨率模型，由于其固有的非线性，可能会引入局部噪声。尽管如此，所有热化学标量的总体误差均有所降低。平均而言，$\mathcal{I}_{SR}$ 产生的误差比 $\mathcal{I}_{Int}$ 低约20%。

5. 结论

我们提出了一种基于图神经网络（GNN）的新型机器学习方法，用于在复杂网格上对湍流反应流进行超分辨率重建。无插值方法与边-节点卷积相结合，能够准确、系统地重建梯度等重要流动特征。基于图神经网络的方法直接在原生非均匀或非结构化网格上运行，无需进行中间插值。在先进图形处理器上的实现使其能够处理大量数据，并应用于实际相关场景。

基于反应通道和氢发动机数据集得到的结果表明，与插值等较简单的方法相比，所提出的方法具有显著优势，尤其是在联合概率密度函数等与建模相关的统计量方面。这使本文提出的方法可应用于广泛的未来场景，从实验室火焰的实验研究到工业相关装置的开发。尽管这些结果展现了该方法的潜力，但未来研究将进一步开展更基础的分析，以理解模型的行为，例如确定该方法可能成功或失败的条件；相关研究将涉及较低维数或较少自由度的情形。

虽然训练和应用均在最先进的硬件上进行，但计算性能并非本研究的重点。目前正在探索适用于百亿亿次级超级计算机的优化策略，以充分利用其巨大潜力，推动绿色能源技术的发展。未来将开展详细研究，以评估如何将多模态更好地整合到所提出的方法中，从而扩大其适用范围。

CRediT 作者贡献声明

PriyabratDash：概念构思、方法学、软件、形式分析、可视化、撰写（初稿）。**Konduri Aditya**：概念构思、方法学、指导、撰写（审阅与编辑）。**Christos E.Frouzakis**：概念构思、数据整理、指导、可视化、撰写（审阅与编辑）。**Mathis Bode**：概念构思、方法学、数据整理、指导、经费获取、撰写（审阅与编辑）

利益冲突声明

作者声明，他们不存在任何已知的竞争性经济利益或个人关系，可能影响本文所报告的研究工作。

致谢

作者衷心感谢约翰·冯·诺依曼计算研究所（NIC）授予计算时间，并由于利希超级计算中心（JSC）的 JURECA 超级计算机提供计算资源。此外，作者感谢通过 JUPITER研究与早期访问计划（JUREAP）获得对 JEDI 的访问权限。JEDI 是 JUPITER 的一套较小型测试系统，其经费来自欧洲高性能计算联合事业（JU）、德国联邦研究、技术与航天部（BMFTR）以及北莱茵-威斯特法伦州文化与科学部（MKWNRW）。PD 感谢总理研究奖学金（印度）和亥姆霍兹访问研究奖学金的支持。KA 获得了印度 ANRF核心研究基金的资助。

补充材料

虽然均方误差（MSE）是评估机器学习训练收敛情况的标准指标，但它主要受大尺度结构影响，可能无法可靠地反映小尺度重建的质量。尽管如此，我们仍在图10中绘制了两种情况的损失曲线。

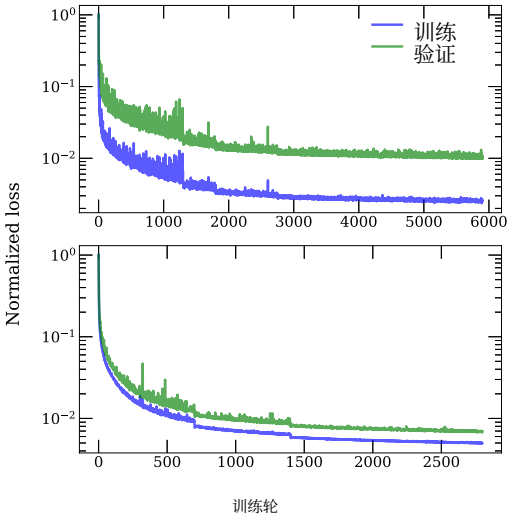

图10：反应通道（案例 1，顶部）和反应式内燃机（案例 2，底部）的归一化损失曲线。

参考文献

[1] X. Wang、K. Yu、S. Wu、J. Gu、Y. Liu、C. Dong、Y. Qiao、C. C. Loy，《ESRGAN：增强型超分辨率生成对抗网络》，载于：L. Leal-Taixé、S. Roth（编），《计算机视觉——ECCV 2018年研讨会》，施普林格国际出版社，Cham，2019年，第63–79页。[2] Y. Li、Y. Ni、R. A. C. Croft、T. Di Matteo、S. Bird、Y. Feng，《人工智能辅助的宇宙学模拟超分辨率》，《美国国家科学院院刊》118（2021年），e2022038118。[3] L. Yu、M. Z. Yousif、D. Zhou、M. Zhang、J. S. Lee、H.-C. Lim，《用于有效流场去噪的自监督学习》，《流体物理》36（2024年），105159。[4] P. Dash、T. Mallik、N. Verma、A. Roy Choudhury、R. V. Ravikrishna、K. Aditya，《一种基于深度学习的模型：从捕获涡燃烧室实验图像中识别回流区》，载于：第3B卷：燃烧、燃料与排放，GT2024，美国机械工程师学会，2024年，第V03BT04A005页。[5] M. Bode，《将物理信息增强型超分辨率生成对抗网络应用于非均匀网格上的湍流非预混燃烧，并演示加速模拟工作流程》，arXiv预印本 arXiv:2210.16248（2022年）。[6] M. Bode，《人工智能超分辨率：在湍流与燃烧中的应用》，施普林格国际出版社，Cham，2023年，第279–305页。[7] X.-Y. Liu、M. H. Parikh、X. Fan、P. Du、Q. Wang、Y.- F. Chen、J.-X. Wang，《Confild-inlet：利用神经场和生成式潜在扩散模型生成合成湍流入口》，《物理评论：流体》10（2025年），054901。[8] S. Liu、H. Wang、J. H. Chen、K. Luo、J. Fan，《利用物理信息神经网络从稀疏数据重建高分辨率湍流火焰》，《燃烧与火焰》260 (2024) 113275. [9] P. W. Battaglia, J. B. Hamrick, V. Bapst, A. Sanchez-Gonzalez, V. Zambaldi, M. Malinowski, A. Tacchetti, D. Raposo, A. Santoro, R. Faulkner, C. Gulcehre, F. Song, A. Ballard, J. Gilmer, G. Dahl, A. Vaswani, K. Allen, C. Nash, V. Langston, C. Dyer, N. Heess, D. Wierstra, P. Kohli, M. Botvinick, O. Vinyals, Y. Li, R. Pascanu，《关系归纳偏置、深度学习与图网络》，arXiv预印本 arXiv:1806.01261 (2018). [10] K. Fukami, K. Taira，《用于湍流超分辨率的单快照机器学习》，《流体力学杂志》1001 (2024) A32. [11] A. Subramaniam, M. L. Wong, R. D. Borker, S. Nim- magadda, S. K. Lele，《利用物理信息生成对抗网络增强湍流》，arXiv预印本 arXiv:2003.01907 (2020). [12] Z. Li, N. Kovachki, K. Azizzadenesheli, B. Liu, K. Bhattacharya, A. Stuart, A. Anandkumar，《用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子》，arXiv预印本 arXiv:2010.08895 (2021). [13] X. Li, Z. Yang, H. Yang，《基于混合注意力的Swin Transformer断层粒子图像测速超分辨率重建》，《流体物理》36 (2024) 065132. [14] D. Shu, Z. Li, A. Barati Farimani，《用于高保真流场重建的物理信息扩散模型》，《计算物理学杂志》478 (2023) 111972. [15] M. Bode, M. Gauding, Z. Lian, D. Denker, M. Davi- dovic, K. Kleinheinz, J. Jitsev, H. Pitsch，《利用物理信息增强型超分辨率生成对抗网络对湍流反应流进行亚滤波建模》，《燃烧学会论文集》38 (2021) 2617–2625.[16] M. Bode, M. Gauding, D. Goeb, T. Falkenstein, H. Pitsch，《将物理信息增强型超分辨率生成对抗网络应用于湍流预混燃烧和发动机类火焰核直接数值模拟数据》，《燃烧学会论文集》39 (2023) 5289–5298. [17] L. Nista, H. Pitsch, C. D. K. Schumann, M. Bode, T. Grenga, J. F. MacArt, A. Attili，《对抗训练对湍流超分辨率重建的影响》，《物理评论：流体》9 (2024) 064601. [18] L. Nista, C. D. K. Schumann, F. Fröde, M. Gowely, T. Grenga, J. F. MacArt, A. Attili, H. Pitsch，《Zipgan：基于超分辨率的生成对抗网络直接数值模拟数据压缩框架》，arXiv预印本 arXiv:2412.14150 (2025). [19] L. Nista, C. D. Schumann, P. Petkov, V. Pavlov, T. Grenga, J. F. MacArt, A. Attili, S. Markov, H. Pitsch，《用于大涡模拟的超分辨率生成对抗网络湍流模型的并行实现与性能》，《计算流体》288 (2025) 106498. [20] P. Dash, K. Aditya，《基于尺度相似性的深度学习湍流小尺度自监督重建工作流》，《流体物理》36 (2024) 075136.[21] P. Veli˘ckovi´c, G. Cucurull, A. Casanova, A. Romero, P. Liò, Y. Bengio，《图注意力网络》，arXiv预印本 arXiv:1710.10903 (2018).

[22] T. N. Kipf, M. Welling, 《变分图自编码器》, arXiv预印本 arXiv:1611.07308 (2016). [23] W. L. Hamilton, R. Ying, J. Leskovec, 《大型图上的归纳式表示学习》, arXiv预印本 arXiv:1706.02216 (2018). [24] C. R. Qi, H. Su, K. Mo, L. J. Guibas, 《PointNet：用于三维分类与分割的点集深度学习》, arXiv预印本 arXiv:1612.00593 (2017). [25] Z. Li, K. Meidani, P. Yadav, A. Barati Farimani, 《用于加速分子动力学的图神经网络》, 《化学物理学杂志》156 (2022) 144103. [26] R. Bhattoo, S. Ranu, N. M. A. Krishnan, 《利用拉格朗日图神经网络学习铰接刚体动力学》, arXiv预印本 arXiv:2209.11588 (2022). [27] 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预印本 arXiv:2010.03409 (2021). [28] M. Lino, S. Fotiadis, A. A. Bharath, C. D. Cantwell, 《用于非定常欧拉流体动力学的多尺度旋转等变图神经网络》, 《流体物理》34 (2022) 087110. [29] S. Barwey, V. Shankar, V. Viswanathan, R. Maulik, 《用于可解释科学机器学习的多尺度图神经网络自编码器》, 《计算物理学杂志》495 (2023) 112537. [30] S. Barwey, P. Pal, S. Patel, R. Balin, B. Lusch, V. Vishwanath, R. Maulik, R. Balakrishnan, 《利用多尺度图神经网络对流体流动进行基于网格的超分辨率处理》, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 443 (2025) 118072. [31] M. Fey, J. Sunil, A. Nitta, R. Puri, M. Shah, B. Stojanovi˘c, R. Bendias, A. Barghi, V. Kocijan, Z. Zhang, X. He, J. E. Lenssen, J. Leskovec, 《PyG 2.0：真实世界图上的可扩展学习》, arXiv预印本 arXiv:2507.16991 (2025). [32] S. Li, Y. Zhao, R. Varma, O. Salpekar, P. Noord- huis, T. Li, A. Paszke, J. Smith, B. Vaughan, P. Da- mania, S. Chintala, 《PyTorch Distributed：加速数据并行训练的经验》, arXiv预印本 arXiv:2006.15704 (2020). [33] [数据集] W. T. Chung, M. Ihme, K. S. Jung, J. H. Chen, J. Guo, D. Brouzet, M. Talei, B. Jiang, B. Savard, A. Y. Poludnenko, B. Akoush, P. Sharma, A. Tamkin, Q. Wang, S. Shahane, C. Yifan, V. Coulon, C. J. Lapeyre, 《Blastnet模拟数据集，2.1版》(2024). [34] W. T. Chung, K. S. Jung, J. H. Chen, M. Ihme, 《Blastnet：呼吁社区参与燃烧机器学习大数据建设》, Appl. Energy Combust. Sci. 12 (2022) 100087. [35] M. Baum, T. J. Poinsot, D. C. Haworth, N. Darabiha, 《具有复杂化学反应的H2/O2/N2火焰直接数值模拟：二维湍流》, 《流体力学杂志》281 (1994) 1–32. [36] B. Jiang, D. Brouzet, M. Talei, R. L. Gordon, Q. Caz- eres, B. Cuenot, 《高温燃烧产物稀释火焰的湍流火焰-壁面相互作用》, 《燃烧与火焰》230 (2021) 111432. [37] B. A. Danciu, G. K. Giannakopoulos, M. Bode, C. E. Frouzakis, 《实际尺寸内燃机中氢燃烧的直接数值模拟》, arXiv预印本 arXiv:2502.16318 (2025).

[38] C. Welch, J. Erhard, H. Shi, A. Dreizler, B. Böhm, 《火花点火发动机中稀薄氢火焰不稳定性的实验研究》, 《燃烧学会论文集》40 (2024年) 105391。[39] M. P. Burke, M. Chaos, Y. Ju, F. L. Dryer, S. J. Klip- penstein, 《高压燃烧的综合氢氧动力学模型》, 《国际化学动力学杂志》44 (2012) 444–474。[40] S. Kerkemeier, C. E. Frouzakis, A. G. Tomboulides, P. Fischer, M. Bode, nekcrf：用于直接数值模拟的新一代高阶反应性低马赫数流动求解器, arXiv 预印本 arXiv:2409.06404 (2024年)。[41] P. Fischer, S. Kerkemeier, M. Min, Y.-H. Lan, M. Phillips, T. Rathnayake, E. Merzari, A. Tomboulides, A. Karakus, N. Chalmers, T. War- burton, NekRS, 一种GPU加速谱元纳维–斯托克斯求解器, 《并行计算》114 (2022) 102982。