



计算机科学

COMPUTER SCIENCE

基于高斯混合判别的半监督学习流场预测方法

王泉, 李冠雄, 李娜, 袁东风

引用本文

王泉, 李冠雄, 李娜, 袁东风. 基于高斯混合判别的半监督学习流场预测方法[J]. 计算机科学, 2025, 52(6): 88-95.

WANG Xiao, LI Guanxiong, LI Na, YUAN Dongfeng. [Semi-supervised Learning Flow Field Prediction Method Based on Gaussian Mixture Discrimination](#) [J]. Computer Science, 2025, 52(6): 88-95.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

[基于多尺度注意力和不确定性损失的两阶段左心房疤痕分割](#)

Two-stage Left Atrial Scar Segmentation Based on Multi-scale Attention and Uncertainty Loss

计算机科学, 2025, 52(6): 264-273. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.241200197>

[基于先验驱动的体素内不相干运动的参数估计](#)

Parameter Estimation of Intravoxel Incoherent Motion Based on Prior-driven

计算机科学, 2025, 52(6): 211-218. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240300060>

[基于多层次嵌套Transformer的船名识别网络](#)

Ship License Plate Recognition Network Based on Pyramid Transformer in Transformer

计算机科学, 2025, 52(6): 179-186. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240500064>

[基于自适应图自编码器的离群点检测方法](#)

Outlier Detection Method Based on Adaptive Graph Autoencoder

计算机科学, 2025, 52(6): 129-138. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240500092>

[基于Transformer的时间序列预测方法综述](#)

Survey of Transformer-based Time Series Forecasting Methods

计算机科学, 2025, 52(6): 96-105. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240500043>

基于高斯混合判别的半监督学习流场预测方法

王 泉^{1,2} 李冠雄³ 李 娜^{1,2} 袁东风^{4,5}

1 齐鲁理工学院智能制造与控制工程学院 济南 250200

2 齐鲁理工学院山东省工业大数据与智能制造重点实验室 济南 250200

3 四川大学工程数值模拟基础算法与模型全国重点实验室 成都 610065

4 山东大学深圳研究院 深圳 518057

5 山东大学齐鲁交通学院 济南 250002

摘要 深度学习在飞机设计中备受瞩目,特别是在 AI for Science 的推动下,基于神经网络的数据驱动方法在翼型流场预测方面取得了显著成功。然而,在标注数据有限的情况下,这些方法往往表现欠佳。针对该问题,提出了一种名为 Semi-Flow 的半监督学习方法,用于翼型流场预测。Semi-Flow 利用神经网络的损失记忆特性,根据损失函数值,将伪标签数据分为简单和困难两个子集。这种聚类方法基于高斯混合模型,将损失函数结合数据损失和辅助物理监督,确保模型结果符合气动特性和数据约束。在数据选择过程中,选择两个模型共同的简单样本作为训练样本,避免噪声样本的影响。训练过程首先对标注样本进行几轮热身训练,然后逐步添加经过过滤的简单样本。实验结果表明,Semi-Flow 方法在标记数据有限的情况下相比于仅基于少量标记数据训练表现优异,总体预测性能提升了近 30%。消融研究和定性结果验证了其有效性。Semi-Flow 展示了 AI for Science 的潜力,通过减少对大量标注数据的依赖,为流场预测提供了有前景的方法。

关键词: 深度学习;面向科学任务的人工智能;半监督学习;流场预测

中图分类号 TP391

Semi-supervised Learning Flow Field Prediction Method Based on Gaussian Mixture Discrimination

WANG Xiao^{1,2}, LI Guanxiong³, LI Na^{1,2} and YUAN Dongfeng^{4,5}

1 College of Intelligent Manufacturing and Control Engineering, Qilu Institute of Technology, Jinan 250200, China

2 Shandong Provincial Key Laboratory of Industrial Big Data and Intelligent Manufacturing, Qilu Institute of Technology, Jinan 250200, China

3 National key Laboratory of fundamental Algorithms and Models for Engineering Simulation, Sichuan University, Chengdu 610065, China

4 Shenzhen Research Institute of Shandong University, Shandong University, Shenzhen 518057, China

5 College of Qilu Transportation, Shandong University, Jinan 250002, China

Abstract Deep learning has garnered significant attention in aircraft design, particularly with the advancements driven by AI for Science. Data-driven methods based on neural networks have achieved remarkable success in airfoil flow field prediction. However, these methods often underperform when labeled data is limited. This paper proposes a semi-supervised learning (SSL) method named Semi-Flow for airfoil flow field prediction. Semi-Flow leverages the memory properties of neural network loss to classify pseudo-labeled data into easy and hard subsets based on loss function values. This clustering method is based on Gaussian mixture model (GMM). The loss function combines data loss with auxiliary physical supervision, ensuring the model's outputs conform to aerodynamic properties and data constraints. During the data selection process, the easy samples common to both models are chosen as training samples, thereby avoiding the impact of noisy samples. The training process starts with several rounds of warm-up training on the labeled samples, followed by the gradual inclusion of filtered easy samples. Experimental results demonstrate that the Semi-Flow method significantly outperforms models trained solely on limited labeled data, with an overall prediction performance improvement of nearly 30%. Ablation studies and qualitative results further validate the effectiveness of the proposed method. Semi-Flow exemplifies the potential of AI for Science, offering a promising approach to flow field prediction by reducing the dependency on large amounts of labeled data.

到稿日期:2024-11-04 返修日期:2025-01-06

基金项目:国家重点研发计划(2024YFB3312302);齐鲁理工学院人才项目(QIT24TP027);国家自然科学基金(62271288)

This work was supported by the National Key R&D Program of China (2024YFB3312302), Qilu Institute of Technology for Talent Project (QIT24TP027) and National Natural Science Foundation of China (62271288).

通信作者:王泉(wangxiao940218@163.com)

Keywords Deep learning, AI for science, Semi-supervised learning, Flow field prediction

1 引言

自 20 世纪 60 年代以来,计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)^[1]已成为流体力学和空气动力学领域的重要工具。它不仅获取气动参数,而且能够提供全局流场结构。然而,CFD 的计算量庞大,不能及时进行模拟仿真。另一方面,多年的发展使得 CFD 领域积累了大量的数据,如何利用好这些数据并挖掘其中的经验规律,加速设计过程是亟待解决的问题。AI 的出现带来了解决此问题的希望, AI 结合数据的智能计算流体力学研究应运而生。当前,基于深度学习的流场预测已成为 AI for Science 应用^[2-3]中一个极具应用价值的研究方向,也是极富挑战性的科学难题。

流场预测作为 CFD 与 AI 交叉研究的热点领域,旨在利用深度学习技术预测流体动力学现象,从而减少传统数值模拟的计算开销。根据预测机制可分为解算式和生成式两大类。解算式是指在给定初始条件下(网格、边界来流条件等),利用 AI 模型直接求解(基于物理信息的神经网络^[4](Physics-informed Neural Network, PINN)、算子学习^[5]等)或拟合流体运动方程的解(卷积神经网络^[6](Convolutional Neural Network, CNN)、图神经网络^[7](Graph Neural Network, GNN)等),预测流场物理量(速度、压力等)的具体值。尽管解算式方法实现了精确的流场预测,但由于限制条件过多,泛化能力受到影响。生成式方法则基于数据统计学习流场的概率分布,无须满足物理约束,效率更高且泛化性更强。当前大多数基于深度学习的流场预测方法需要大量标记数据进行监督学习,但在 CFD 领域获取这样的数据通常代价高昂、时间漫长,难以满足大规模训练需求。因此,标记数据约束是流场预测亟待解决的问题。

为了应对上述挑战,本文提出了一种基于半监督学习方法用于流场预测,探究了在有少量标记流场数据和大量无流场数据的参数化外形情况下的流场预测问题。该方法在损失函数设计上采用结合数据和辅助物理监督信号的双驱动模式。通过少量标记数据训练出一个模型,利用该模型为未标记的流场数据打上伪标记的流场数据。在标记数据上训练两个预热模型,分别利用设计的损失函数将大量伪标记的流场数据通过二分高斯混合模型进行划分,选取两个训练模型共同的简单样本和标记样本作为训练样本。在训练过程中先对标记样本进行一定轮数的预热训练,再逐步添加筛选出的简单样本。本文方法在流场预测数据集上进行了验证。验证集实验结果表明,该方法在精度上有一定提升,并且增强了模型的泛化能力。

2 相关工作

本章将从监督学习和半监督学习两个不同方面,分别对基于 AI for Science 的流场预测相关工作进行介绍。

2.1 监督学习的流场预测

AI for Science 的出现为基于数据驱动的流场预测带来了新机遇。以解算式方法为例,卷积神经网络(CNN)因其在

处理图像和空间数据方面的强大能力,被广泛应用于流场数据的特征提取与分析。Guo 等^[8]基于 CNN 逼近稳定流动,利用符号距离函数^[9](Signed Distance Function, SDF)表征物理外形和计算域,并训练 CNN 模型以预测流体场的速度和压力。Deng 等^[10]使用卷积自动编码器(Convolution Auto-Encoder, CAE)模型进行流场预测,并结合优化算法搜索最优流场控制参数或几何结构,然而该方法在泛化性上存在一定问题。Thuery 等^[11]在 CNN 基础上使用 U-Net 架构^[12],通过计算压力和速度分布进行流场预测,但该模型需要额外的特征提取,导致计算成本较高。此外,卷积操作在图像中的不同位置采用相同的模板进行滤波,难以有效捕捉流场的整体信息。

图神经网络(GNN)也因其在处理具有图结构的流场数据方面的潜力受到关注^[13-14]。Sanchez-Gonzalez 等^[15]提出了一种基于 GNN 的流体模拟方法,将流场中的速度和密度等物理字段视为图上的节点,而将物理点之间的相互作用视为图上的边。然而,该模型生成的时序帧数不足,长时间的数值稳定性和精度仍需优化。Chen 等^[16]利用 GNN 预测二维随机形状周围的层流,构建了基于流场数据的空间图结构以编码流体场的拓扑信息,但其实验局限于简单的二维形状,实际工程中的效果和泛化性仍需验证。Yang 等^[17]提出了一种多尺度 GNN 用于流场预测,采用跨尺度的图间消息传递机制,通过代数多重网格实现不同粒度图之间的信息交互。然而,这种多尺度图网络增加了模型的复杂度,计算效率和资源消耗待评估,且模型的泛化能力较差。

为了解决边界泛化性问题,研究人员开始探索基于 AI 的数值微分方法,主要通过将微分方程离散化,将连续的微分问题转换为有限个代数方程组,再利用深度学习模型进行求解。Wandel 等^[18]构建了基于有限差分方法的深度学习框架,通过微分编码器和光滑化操作使模型可微分^[19],并利用 U-Net 对有限差分的数值进行学习。Gao 等^[20]提出了一种基于物理约束的深度学习模型,旨在学习不规则域上偏微分方程的解,但训练时间较长。基于物理信息的神经网络方法面临计算成本高和效率低的问题,需单独训练不同条件下的模型,并依赖网络结构设计和参数选择,导致整体训练效率较低。为此,Lu 等^[21]提出了 DeepONet,这是一种基于算子学习的方法,由分支网络和主干网络组成,前者编码输入,后者逼近算子。训练完成后,可以通过不同的组合方式适应不同的条件来提升训练效率。

生成式方法不依赖传统流体动力学方程求解,而是通过学习大量流场数据的统计特性直接生成新的流场实例。此类方法类似于图像生成,但流场预测要求精确而非多样。生成式模型通过隐空间向量学习数据的潜在分布,增强表示能力。Wang 等^[22]提出了一种基于变分自编码器(VAE)的深度学习框架,通过编码器-解码器结构预测翼型参数与流场之间的映射关系,但编码潜变量空间的学习可能限制模型在不同流动条件或翼型参数下的泛化能力。Jiang 等^[23]提出了一种基于 Transformer 的解码器架构进行流场预测,将参数化翼型

作为输入,映射为隐变量空间生成二维流场,但该模型参数量大,训练时间长。

综上所述,当前基于监督学习的流场预测相关工作已逐渐成熟,但大多数方法依赖于大量标记数据。不可否认的是,深度学习在 CFD 领域的成功取决于获取大量已标记或已解算的数据。但仅存在少量标记数据时,这些方法的性能会显著下降。

2.2 半监督学习的流场预测

半监督学习方法在流场预测中利用大量未标注数据配合少量标注数据,显著降低了对大规模数据获取的依赖,同时缩短了模型的训练时间。与需求庞大的源域数据的迁移学习不同^[24-26],半监督学习有效减少了数据准备的工作量。尽管这一策略为流场预测带来了巨大潜力,但其技术难度较高,目前相关研究成果仍较为有限。例如,Lai 等^[27]提出了一种基于对抗生成网络^[28-29](GAN)的半监督学习光流估计框架。该框架通过生成器和判别器的对抗学习过程,在无需先验假设的情况下,捕捉光流扭曲错误图像中的结构模式。该框架对有标记数据同时优化重构和对抗损失,而在无标记数据上仅优化对抗损失,从而有效利用未标记数据提升光流估计性能。然而,该方法的复杂性以及生成器和判别器的同时训练导致了较高的计算成本。此外,其自编码器结构简单,限制了框架的整体表达能力。Wu 等^[30]提出了一种结合数据增强的基于半监督学习的 GAN 网络,旨在实现快速而准确的流场预测。然而,该方法因 GAN 网络隐空间生成的不确定性,可能导致数据增强的偏差,而复杂的设计又增加了训练难度。

目前,基于 GAN 网络的方法已成为半监督学习流场预测的主要手段。尽管 GAN 提供了一种有前景的框架,但其训练难度和输出的不确定性对流场预测的精度存在潜在影

响,这些问题亟需在流场预测研究中解决。

3 所提方法

本章将详细描述所提出的基于半监督学习的流场预测方法 Semi-Flow。Semi-Flow 损失函数的设计融合了数据约束和辅助物理监督信号约束两种模式,以增强对流场全局预测的特征表达能力。Semi-Flow 的关键在于利用两个预热模型的判别结果,通过二分高斯混合模型(Gaussian Mixture Model, GMM)^[31-32]从大量伪标记数据中筛选出高置信度的简单样本,通过与标记数据一同训练,提升了模型流场预测能力,同时减少了噪声数据对流场预测产生的影响。需要说明的是,简单和困难样本的划分基于设定的归一化损失函数值。

3.1 研究方法概述

Semi-Flow 方法主要由 3 个关键部分构成。具体地, Semi-Flow 架构流程如图 1 所示。首先,进行标记样本的训练模型获取,亦称为预训练阶段。这一阶段旨在为大量未标记的流场数据赋予伪流场标签,从而扩展后续训练的样本集。这一过程通过利用已有的标记数据进行初步模型训练来实现。第二阶段是识别出简单样本集。这通过两个独立模型对混合数据集(包含伪标记和真实标记数据)的训练来实施,随后运用基于损失函数的二分高斯 GMM 模型对伪标记数据进行简单与困难样本的分类。只有当两个模型均将某样本分类为简单时,该样本才会被选入后续训练用的简单样本集。第三阶段涉及等比例增加简单样本到训练中。在这一阶段,模型首先使用标记样本进行若干轮的预热训练,确保有一个稳定的起点。之后,模型将按照设定的比例和间隔,逐渐将简单样本集合并入训练集,直至训练完成,并在验证集上进行流场预测的效果验证。

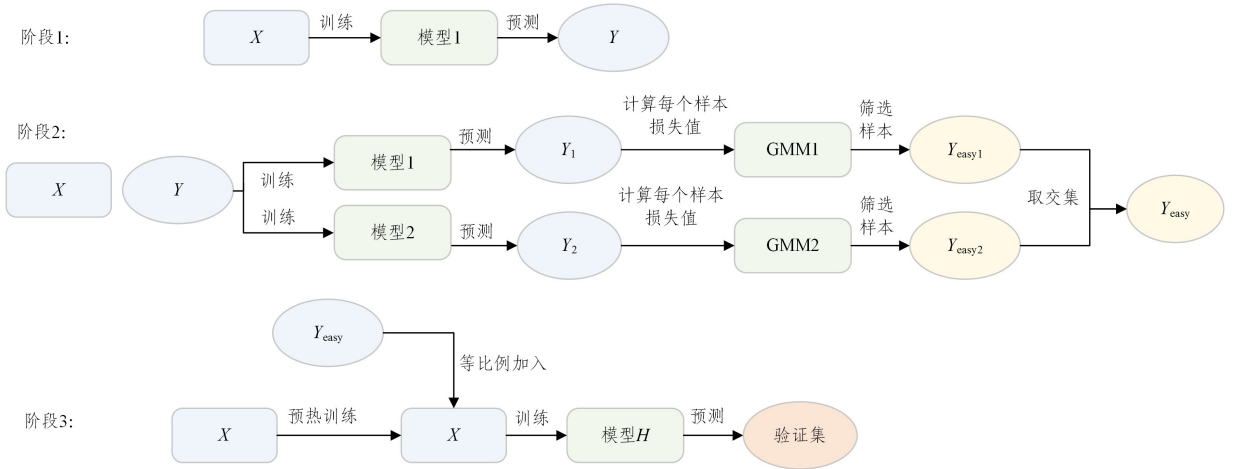


图 1 Semi-Flow 框架

Fig. 1 Framework of Semi-Flow

3.2 重点模块

3.2.1 预训练部分

该部分利用标记数据集 X 构建基于 Swin-FlowNet 的流场预测模型。预测模型具体可表示为:

$$y_{\text{flow}} = \text{Swin-FlowNet}(x_{\text{flow}}, \vartheta_{\text{flow}}) \quad (1)$$

其中, y_{flow} 表示模型训练得到的流场数值, x_{flow} 表示翼型控制点坐标, ϑ_{flow} 表示训练后模型的参数。进一步地,利用标记数

据集 X 的损失函数采用 L1 范数平滑方式,具体可以定义为:

$$L(\hat{y}, y) = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{|\hat{y} - y|}{\gamma} \right)^2, & \text{if } |\hat{y} - y| \leq \gamma \\ |\hat{y} - y| - \frac{1}{2} \cdot \gamma, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

其中, \hat{y} 表示通过 Swin-FlowNet 预测得到的流场数值, y 表示真实 CFD 解算流场数值, γ 为给定的阈值参数。所有样本

的损失函数均值可进一步表示为:

$$L_{\text{smooth}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(\hat{y}_i, y_i) \quad (3)$$

其中, N 表示样本数量, \hat{y}_i 和 y_i 分别表示第 i 个样本的训练模型得到的流场预测值和真实 CFD 解算值。利用模型 X 计算未标记数据集 Y 中每个样本的流场数值, 并将其作为未标记数据集的伪标记值。未标记数据集 Y 可重新定义为:

$$Y = \{(x_j, y_j)\}_{j=1}^n \quad (4)$$

3.2.2 简单样本获取

在获取简单样本的过程中, 采用 GMM 来划分简单样本。GMM 可以看作一种软 K-Means 方法。GMM 基于一种假设, 即数据的分布是由多个高斯分布组成的。更具体地, 它是一种混合的高斯分布。在 GMM 中, 每个数据点不是由一个确定的分布生成, 而是以一定的概率由各个分量生成。每个分量都有自己的均值和协方差矩阵。如果有 K 个分量, 那么 GMM 的概率密度函数表示为所有分量的线性组合, 每个分量有一个权重来表示其贡献。由于流场数据具有高维特性, 因此, 直接对伪标记数据进行迭代划分是不可行的。为此, 选用了两种不同的网络架构进行模型训练, 并利用二分 GMM 对数据进行了简单与困难样本的区分。

同样地, 在进行 GMM 划分前对损失函数的值进行归一化。损失函数的具体设计将在下一小节给出。

$$L_{\text{norm}}^j = \frac{\text{loss}_j - \text{loss}_{\min}}{\text{loss}_{\max} - \text{loss}_{\min}} \quad (5)$$

其中, loss_j 是指第 j 个通过模型得到的预测数据。 loss_{\min} 和 loss_{\max} 分别是未标记样本 Y 集中 Loss 的最小值和最大值。进一步地, 将获取的所有未标记的样本计算的损失通过二分 GMM 模型进行数据集类别划分。

首先分别利用标记流场数据集 X 训练好的模型以及基于 Transformer 解码器的模型, 通过二分 GMM 模型得到伪标记数据集 Y 中的每个样本的后验概率:

$$\begin{cases} W_1 = \{w_j\}_{j=0}^n \leftarrow \text{GMM}_1(D, X) \\ W_2 = \{w_j\}_{j=0}^n \leftarrow \text{GMM}_2(D, X) \end{cases} \quad (6)$$

其中, W_1 和 W_2 分别表示 Swin-FlowNet(后文简称模型 1) 以及基于 Transformer 解码器模型(后文简称模型 2) 通过二分 GMM 模型得到的后验概率。

这里, GMM 模型后验概率的具体计算采用期望最大化的算法, 因此, 需要对算法的最大迭代次数 maxiters 进行设置。该参数对模型的收敛性和性能有很大影响。较高的 maxiters 值会增加迭代次数, 从而更精确地估计模型参数, 并普遍提高性能。但也会延长计算时间。为了在性能和计算效率之间取得平衡, 根据对轮廓系数的评估, 将该值设为 100。

根据阈值设定的划分标准, 两个模型可以分别得到 Y_{easy_1} 和 Y_{easy_2} 两个不同的简单样本子集。进一步地, 为了获取两个模型通过 GMM 得到简单样本的公共部分, 采取对 Y_{easy_1} 和 Y_{easy_2} 取交集的形式, 具体可表示为:

$$Y_{\text{easy}} = Y_{\text{easy}_1} \cap Y_{\text{easy}_2} \quad (7)$$

其中, Y_{easy_1} 和 Y_{easy_2} 分别表示模型 1 和模型 2 利用 GMM 划

分得到的简单样本集。 Y_{easy} 为最终训练筛选出的公共简单样本集。

3.2.3 分阶段训练

经过上述过程, 已经成功地筛选出了简单样本子集。接下来将混合已标记流场数据集 X 和 Y_{easy} 进行训练。在训练初期, 这里仅利用已标记数据对模型进行预热, 确保模型有一个稳定的起始状态, 预热阶段占总训练轮次的 10%~20%。预热完成后, 开始逐步且等比例地引入简单样本, 每轮添加量为简单样本总数的 10%, 并设置每 4 个训练轮次添加一次, 直到所有的简单样本都被加入训练中, 所有样本一起训练至最大轮次, 得到最终流场预测模型。这一过程可以具体表示为:

$$D = X \cup Y_{\text{easy}} \quad (8)$$

$$Y_{\text{easy}_{\text{tr}}} = \begin{cases} 0, & \text{epo} \leq \text{warm}_{\text{epo}} \\ 0.1 * Y_{\text{easy}}, & \text{epo} \geq (\text{epo} - \text{warm}_{\text{epo}}) / 4 \end{cases}$$

$$X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^l, Y_{\text{easy}} = \{(x_j, \hat{y}_j)\}_{j=1}^n$$

其中, D 表示参与训练的数据集; epo 表示当前的训练轮数, warm_{epo} 表示总的预热轮次; $Y_{\text{easy}_{\text{tr}}}$ 表示加入模型训练的数量, 需要注意的是, 这里表示的不是总的简单样本的数量。

3.2.4 损失函数构建

该项工作的损失函数由数据损失 L_{smooth} 和辅助物理监督信号损失 L_p 两部分构成。其数据损失部分采用 $L1_{\text{smooth}}$ 损失函数。 $L1_{\text{smooth}}$ 损失是一种平滑的损失函数, 具体表示如式(2)和式(3)所示。 $L1_{\text{smooth}}$ 损失在数据驱动的流场预测中提供了一种有效的损失函数选择, 通过减少对异常值的过度敏感性和改进优化过程的稳定性, 从而提高模型的预测性能和泛化能力。将以气动力为约束的辅助物理监督信号的损失加入模型, 可以帮助确保模型预测不仅仅依赖于数据, 而且符合一定的气动特性。这种方法有助于提高模型在数据稀缺或质量不高的情况下的准确性和鲁棒性。由于基于半监督学习的流场预测本身就是基于少量标记数据情况下的任务, 即使是筛选出来的流场数据, 也不可避免地会引入一定噪声, 质量不如标记流场数据。因此, 辅助物理监督信号损失的加入有助于提升流场预测的准确性。具体地, 辅助物理监督信号由阻力系数和升力系数约束共同构成, 阻力系数和升力系数的计算利用压力积分法^[31]来进行近似求解。其数学表达式为:

$$C_{d, \text{pred}} = \frac{\sum(\Delta C_{p, \text{pred}}) \cdot \sin(\alpha)}{A_{\text{ref}}} \quad (9)$$

$$C_{d, \text{target}} = \frac{\sum(\Delta C_{p, \text{Prpa}}) \cdot \sin(\alpha)}{A_{\text{gef}}}$$

$$C_{l, \text{pred}} = \frac{\sum(\Delta C_{p, \text{pred}}) \cdot \cos(\alpha)}{A_{\text{ref}}} \quad (10)$$

$$C_{l, \text{target}} = \frac{\sum(\Delta C_{p, \text{Prpa}}) \cdot \cos(\alpha)}{A_{\text{gef}}}$$

其中, $\Delta C_{p, \text{pred}}, \Delta C_{p, \text{target}}$ 分别表示预测和真实翼型表面上下压力系数差; α 表示攻角; A_{ref} 表示参考面积。进一步地, 完整的损失函数可以表示为:

$$L_{\text{total}} = L_{\text{smooth}} + \delta L_p$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [L(\hat{y}_i - y_i) + \delta \left(\frac{\sum |\Delta C_{p_{predi}} - \Delta C_{p_{targeti}}|}{A_{ref}} \right) * (\sin(\alpha) + \cos(\alpha))] \quad (11)$$

其中, δ 表示权重系数; N 表示总的样本数量; \hat{y}_i 和 y_i 分别表示第 i 个样本的流场预测值和真实 CFD 解算值; $\Delta C_{p_{predi}}$ 和 $\Delta C_{p_{targeti}}$ 分别表示第 i 个样本的预测和真实表面压差值。

4 实验结果与分析

本章将针对 Semi-Flow 方法, 在翼型流场数据上进行具体的实验验证。在实验中, 标记的流场数据既包括翼型的控制点坐标, 也包括相应的流场数据。而对于未标记的流场数据, 仅有翼型控制点的坐标信息。数据集包括的具体信息如图 2 所示。Semi-Flow 方法在数据集上进行了测试, 并通过消融实验来评估各组成部分的重要性。

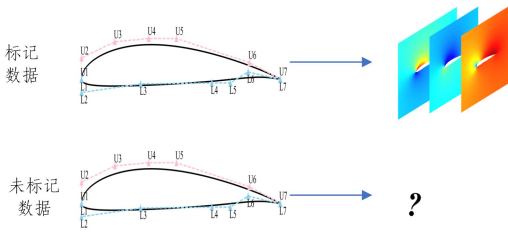


图 2 数据集定义说明

Fig. 2 Description of dataset definitions

4.1 实验数据集

为了验证 Semi-Flow 方法的有效性, 本文在翼型流场预测数据集上进行验证, 具体命名为 Flow-air。对于 Flow-air 数据集, 初始翼型形状使用非均匀有理 B 样条^[33] (Non Uniform Rational B-spline, NURBS) 来进行参数化。每个控制点的 X 或 Y 坐标的变化范围定义了机翼形状修改的区间, 通过拉丁超立方采样^[34] (Latin Hypercube Sampling, LHS) 方法在此范围内采样, 生成 3000 个机翼形状。这些翼型的流场是通过使用自主研发的 CFD 求解器求解 RANS 方程计算得出的。来流条件设定为雷诺数 7.5×10^5 和攻角 3.2° 。本文来流设定仅是为了验证所提方法。需要说明的是, Semi-Flow 在任意来流条件下均适用。在进行模型训练前, 需要对流场网格数据进行处理。首先对翼型外部解算域进行裁剪, 然后需要对裁剪后区域的解算数据采样成笛卡尔网格的形式, 进而实现数据对齐。图 3 是本文翼型网格生成结构。在这里, 网格的拓扑形式采取结构化的 H 型网格。本文将整体的外流场裁剪为图 3(b) 的形式。为了完成半监督流场预测的任务, 标记数据量为 800, 测试数据量为 200, 未标记数据量为 1400, 验证数据量为 600。

4.2 实验设置

本节工作中模型训练环境设定为: PyTorch 1.9.0 和 NVIDIA GeForce RTX 4070, 在训练中使用 AdamW^[35] 作为优化器。流场预测网络 Swin-FlowNet 的具体设置如下: 窗口大小设置为 8×8 , 每个阶段的 SCTB 层数分别设置为 2, 2, 2, 4。SCTB 的多头数分别为 2, 2, 4, 4, 所有 SCTB 均应用 0.1 的 Drop path radio。模型预热轮数为 20, 总训练轮数为 300。

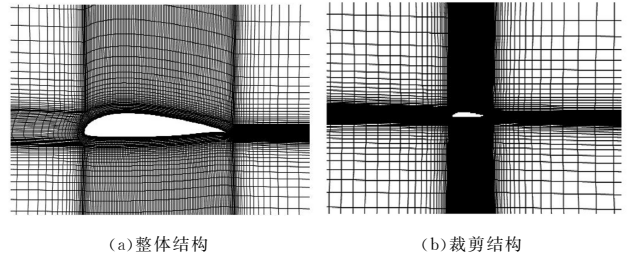


图 3 翼型网格生成结构

Fig. 3 Airfoil mesh generation structure

4.3 性能指标

为了定量评估所提出方法的性能, 使用了平均绝对误差 (MAE) 和均方根误差 (RMSE) 指标。这两项指标通常用于评估预测模型, 各自强调精度的不同方面。计算式如下:

$$MAE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |y_i - \hat{y}_i| \quad (12)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (13)$$

其中, \hat{y}_i 表示模型得到的流场预测值, y_i 表示真实解算流场数据, m 表示数据集的样本数量。MAE 用于衡量预测的平均误差, RMSE 代表标准误差, 一般 $MAE \leq RMSE$ 。需要说明的是, 较低的 MAE 以及 RMSE 表示拥有更好的性能。

4.4 实验结果

针对翼型流场预测数据集, 本节在流场预测任务上验证所提出的基于半监督学习的 Semi-Flow 框架的有效性。为此, 对比了在不同标记数据量下的预测性能。为了方便后续描述, 下面对具体方法进行简单定义。

Few-Flow: 指仅使用少量的流场标记数据进行训练得到的模型, 直接用于验证集流场验证。

Semi-Flow: 使用少量的流场标记数据并结合大量未标记数据, 通过本章提出的 Semi-Flow 训练方法得到的模型, 然后用于验证集流场验证。

SL-Flow: 指使用大量流场标记数据进行训练得到的模型, 直接用于验证集流场验证。

流场预测分析: 图 4 随机选取了验证集中的 3 个翼型, 展示了它们在不同训练方法下的流场预测结果。这是由小攻角定来流翼型构成的流场预测数据集。图 4 中, 从上到下依次为预测流场、CFD 解算流场和绝对误差图, 从左到右依次是压力场 p 、 x 方向速度场, 以及 y 方向速度场分布。绝对误差图上的颜色越浅, 表示预测值与真实值之间的误差越小。从结果中可以观察到, 仅依赖少量标记数据的 Few-Flow 方法虽然能够大致捕捉流场的整体结构, 但在细节处理上存在不足, 导致预测的流场整体较为粗糙。尤其在压力场 p 的预测上, 与真实的 CFD 流场解算结果相比, 边界层附近的表现存在明显差异。相较于 Few-Flow, Semi-Flow 方法得到了更加平滑和精细的流场预测效果。从流场绝对误差图中可以明显看出, Semi-Flow 有效改善了 Few-Flow 在边界层附近预测准确性不足的问题, 其结果与 SL-Flow 的流场预测更为接近, 表明了 Semi-Flow 在流场预测细节上更准确, 这可能是因为

大量伪标记流场数据提升了模型的泛化能力。

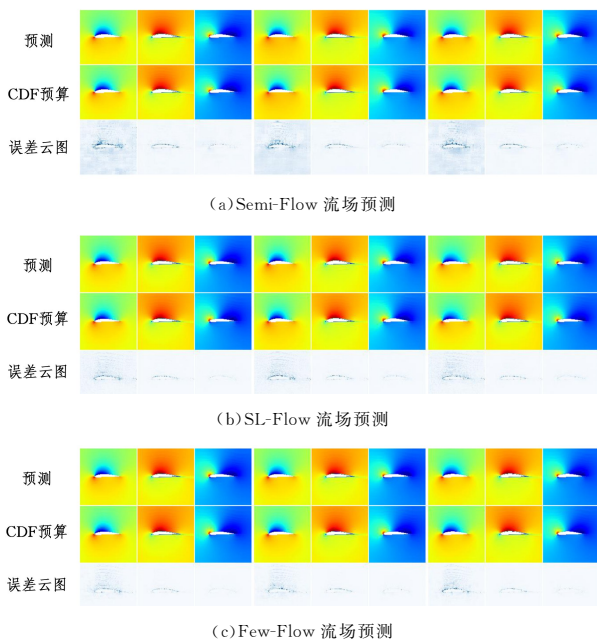


图 4 不同方法流场预测

Fig. 4 Flow modelling of different methods

性能指标分析:表 1 列出了在流场预测性能上的定量分析,包括两个关键性能指标 RMSE 和 MAE。与 Few-Flow 模型相比,Semi-Flow 模型在 RMSE 指标上实现了 32.1% 的改善,在 MAE 指标上也取得了 29.3% 的改善。这不仅是一个显著的进步,而且 Semi-Flow 模型的精度接近于传统的完全监督学习方法,充分展示了其在流场预测任务中的有效性。

表 1 不同方法在 Flow-air 数据集上的性能指标表现

Table 1 Performance metrics of different methods on Flow-air

| dataset | | |
|-----------|-----------------------|-----------------------|
| 方法 | RMSE | MAE |
| Few-Flow | 3.42×10^{-2} | 6.76×10^{-3} |
| Semi-Flow | 1.11×10^{-2} | 4.85×10^{-3} |
| SL-Flow | 9.07×10^{-3} | 4.01×10^{-3} |

4.5 效率对比

数据集规模显著影响训练时间,因此在时间与精度之间需要找到最佳平衡。表 2 对比了时间和精度,包括数据获取时间、模型训练时间及 MAE 指标。与 Few-Flow 方法相比,SL-Flow 在提升 39.3% 的预测性能的同时,仅增加了 13.0% 的训练时间。此外,Semi-Flow 方法数据获取和训练时间上均显著优于 SL-Flow,同时保持了相近的精度。

表 2 不同方法时间和精度对比

Table 2 Comparison of different methods in time and accuracy

| 方法 | 数据获取/min | 训练/min | MAE |
|-----------|----------|--------|-----------------------|
| Few-Flow | 3600 | 69 | 6.76×10^{-3} |
| Semi-Flow | 3600 | 78 | 4.85×10^{-3} |
| SL-Flow | 10800 | 107 | 4.01×10^{-3} |

4.6 权重系数 δ 设置

本文的损失函数使用了数值损失和辅助物理监督信号损

失相结合的方式,并且对辅助物理监督信号损失部分设置了权重系数 δ 。权重系数的设定是一种重要的技术,通过调整其权值,可以使得模型在训练过程中更加符合实际应用中的需求和约束。表 3 列出了不同权重系数 δ 下的性能指标。随着权重系数 δ 值的增加,模型的 RMSE 和 MAE 性能也不断提升。当数值设置为 0.4 时,模型性能指标达到最优。若进一步增大权重值,则模型整体性能会出现一定程度下降。过大的权重可能会导致损失函数出现一定失衡,进而出现性能下降。

表 3 不同权重 δ 系数下的 RMSE 和 MAE 结果

Table 3 Results of RMSE and MAE with different δ values

| 权重系数 δ | RMSE | MAE |
|---------------|-----------------------|-----------------------|
| 0.1 | 2.79×10^{-2} | 6.27×10^{-3} |
| 0.2 | 2.31×10^{-2} | 5.73×10^{-3} |
| 0.4 | 1.90×10^{-2} | 5.17×10^{-3} |
| 0.5 | 2.23×10^{-2} | 6.00×10^{-3} |

4.7 消融实验

本节将讨论损失函数设置、训练模块设置对流场预测性能的影响。

在损失函数设置部分,分别对数据约束损失部分和整体损失函数设置进行探讨,具体讨论了辅助物理监督信号 L_P 损失部分的加入对预测性能的影响。表 4 列出了有无 L_P 加入的实验结果。可以看到,加入 L_P 损失函数后,流场预测性能均有一定改善。从性能指标分析,RMSE 和 MAE 分别降低了 19.4% 和 24.9%,说明辅助物理监督信号 L_P 损失部分的加入对流场预测是有益的。

表 4 损失函数在 Flow-air 数据集上的消融实验

Table 4 Ablation studies on Flow-air dataset with different loss functions

| L_{smooth} | L_P | RMSE | MAE |
|--------------|-------|-----------------------|-----------------------|
| ✓ | ✓ | 1.74×10^{-2} | 4.63×10^{-3} |
| ✓ | ✗ | 2.13×10^{-2} | 6.17×10^{-3} |

进一步地,本文揭示了 Semi-Flow 方法中各个模块的重要性,实验结果如表 5 所列。

表 5 不同训练模型组合在 Flow-air 数据集上的消融实验

Table 5 Ablation experiments with different combinations of training models on Flow-air dataset

| 预热模型 | 简单样本划分 | 分阶段训练 | RMSE | MAE |
|------|--------|-------|-----------------------|-----------------------|
| ✓ | ✓ | ✗ | 1.83×10^{-2} | 4.32×10^{-3} |
| ✓ | ✗ | ✓ | 2.10×10^{-2} | 5.26×10^{-3} |
| ✗ | ✓ | ✓ | 7.13×10^{-2} | 9.91×10^{-3} |
| ✓ | ✓ | ✓ | 1.77×10^{-2} | 4.27×10^{-3} |

分析发现,若缺少预热模块,RMSE 和 MAE 指标的性能显著下降。这一发现强调了预热模块在为模型引入先验数据知识方面的关键作用。进一步观察发现,当省略简单样本划分环节时,与完整的 Semi-Flow 方法相比,RMSE 和 MAE 值分别增加了 15.8% 和 18.9%。在 Flow-B 数据集上,这种差异更加显著,由此表明了简单样本划分在减少模型过拟合现象上的重要性。分阶段训练相较于前两个模块对性能的提升

似乎不是非常明显,与 Semi-Flow 方法相比,性能提升不超过 5%。这表明模型可能拟合了部分噪声样本。此外,一次性加入所有训练样本,导致训练时间不可避免地增加。因此,分阶段训练对于模型训练的效率和效果均有益。总结来说,Semi-Flow 方法中的 3 个模块——预热模块、简单样本划分,以及分阶段训练都是不可或缺的。只有这 3 个模块齐全,模型才能在时间和性能上实现最优表现。

结束语 本文提出了一种基于半监督学习的流场预测方法 Semi-Flow,旨在解决在仅有少量标注的流场数据和大量未标注的翼型参数化外形数据情况下的预测难题。Semi-Flow 采用了一种结合数据损失与辅助物理监督信号的损失函数设计,以确保预测结果既遵循物理属性,又符合数据约束。该损失函数引入了基于高斯混合模型的样本筛选机制,避免了噪声数据对模型训练的不利影响。在翼型流场预测数据集上的验证结果表明,Semi-Flow 方法相比于仅利用少量标注数据的模型训练,显著提升了模型的预测精度和对新数据的泛化能力。通过有效利用未标注数据,Semi-Flow 在维持高预测精度的同时,极大地增强了模型在处理未知流场条件下的预测能力。此外,本文探讨了 Semi-Flow 中不同参数设置对预测结果的影响,并通过消融实验分析了各组成部分的贡献,进一步验证了该方法的有效性。

本文是对半监督学习领域流场预测的初步探索。虽然该方法取得了一定成功,但仍有改进空间。未来的工作可以考虑将流动控制方程作为损失函数中的物理约束条件,以确保模型能够捕捉流动现象并遵循物理规律,从而提高预测精度。

参考文献

- [1] ANDERSON J D, WENDT J. Computational fluid dynamics: volume 206 [M]. Springer, 1995.
- [2] VAN NOORDEN R, PERKEL J M. AI and Science: what 1,600 researchers think[J]. Nature, 2023, 621(7980): 672-675.
- [3] XU Z M. Ai4science: Neural networks for molecular property prediction[EB/OL]. https://zhiming-xu.github.io/files/Molecular_GNN.pdf.
- [4] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 378: 686-707.
- [5] LU L, JIN P, PANG G, et al. Learning nonlinear operators via deepnet based on the universal approximation theorem of operators[J]. Nature Machine Intelligence, 2021, 3(3): 218-229.
- [6] RAZAVIAN A S, AZIZPOUR H, SULLIVAN J, et al. CNN features off-the-shelf: an astounding baseline for recognition [C]//Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops. 2014: 806-813.
- [7] SHI W, RAJKUMAR R. Point-GNN: Graph neural network for 3d object detection in a point cloud[C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2020: 1711-1719.
- [8] GUO X, LI W, IORIO F. Convolutional neural networks for steady flow approximation[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2016: 481-490.
- [9] PARK J J, FLORENCE P, STRAUB J, et al. DeepSDF: Learning continuous signed distance functions for shape representation [C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2019: 165-174.
- [10] DENG K, CHEN H, ZHANG Y. Flow structure oriented optimization aided by deep neural network[C]//10th International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD10). 2018.
- [11] THUEREY N, WEISSENOW K, PRANTL L, et al. Deep learning methods for reynolds-averaged navier-stokes simulations of airfoil flows[J]. AIAA Journal, 2020, 58(1): 25-36.
- [12] RONNEBERGER O, FISCHER P, BROX T. U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation[C]//International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention. Springer, 2015: 234-241.
- [13] XU Z H, CHEN X L, LI J, et al. Graph Hypersphere Prototype Network for Semi-supervised Few-shot Node Classification. Journal of Chinese Computer Systems, 2025, 46(3): 542-551.
- [14] SANCHEZ-GONZALEZ A, GODWIN J, PFAFF T, et al. Learning to simulate complex physics with graph networks [C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2020: 8459-8468.
- [15] CHEN J, HACHEM E, VIQUERAT J. Graph neural networks for laminar flow prediction around random two-dimensional shapes[J]. Physics of Fluids, 2021, 33(12): 123607.
- [16] YANG Z, DONG Y, DENG X, et al. Amgnet: Multi-scale graph neural networks for flow field prediction [J]. Connection Science, 2022, 34(1): 2500-2519.
- [17] WANDEL N, WEINMANN M, KLEIN R. Learning incompressible fluid dynamics from scratch-towards fast, differentiable fluid models that generalize[J]. arXiv: 2006.08762, 2020.
- [18] TOME M F, MCKEE S. Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains[J]. Journal of Computational Physics, 1994, 110(1): 171-186.
- [19] GAO H, SUN L, WANG J X. Phygeonet: Physics-informed geometry-adaptive convolutional neural networks for solving parameterized steady-state pdes on irregular domain[J]. Journal of Computational Physics, 2021, 428: 110079.
- [20] LU L, JIN P Z, PANG G F, et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators[J]. Nature Machine Intelligence, 2021, 3: 218-229.
- [21] WANG J, HE C, LI R, et al. Flow field prediction of supercritical airfoils via variational autoencoder based deep learning framework[J]. Physics of Fluids, 2021, 33(8): 086108.
- [22] JIANG J, LI G, JIANG Y, et al. TransCFD: A transformer-based decoder for flow field prediction[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2023, 123: 106340.
- [23] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need [C]//Proceedings of the 31 International Conference on Neural Information Processing Systems. 2017: 6000-6010.

- [24] WANG X, DONG Y, ZOU S, et al. A semi-supervised framework for computational fluid dynamics prediction[J]. *Applied Soft Computing*, 2024, 154: 111422.
- [25] WEISS K, KHOSHGOFTAAR T M, WANG D. A survey of transfer learning[J]. *Journal of Big data*, 2016, 3(1): 1-40.
- [26] LAI W S, HUANG J B, YANG M H. Semi-supervised learning for optical flow with generative adversarial networks[C]// *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017.
- [27] WANG X, JIANG Y, LI G, et al. Sag-flownet: self-attention generative network for airfoil flow field prediction[J]. *Soft Computing*, 2024, 28: 7417-7437.
- [28] WANG X, ZOU S, JIANG Y, et al. Swin-FlowNet: Flow field oriented optimization aided by a CNN and Swin-Transformer based model[J]. *Journal of Computational Science*, 2023, 72: 102121.
- [29] WU H Z, LIU X J, AN W, et al. A generative deep learning framework for airfoil flow field prediction with sparse data[J]. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2022, 35(1): 470-484.
- [30] REYNOLDS D A. Gaussian mixture models[M]// *Encyclopedia of Biometrics*. Boston, MA: Springer, 2009: 659-663.
- [31] YIN X, CHEN S, HU E. Regularized soft k-means for discriminant analysis[J]. *Neurocomputing*, 2013, 103: 29-42.
- [32] ROGERS D F. An introduction to NUBRBS: with historical perspective[M]. Morgan Kaufmann, 2001.
- [33] BLASINGAME T, JOHNSTON J, LEE W. Type-curve analysis using the pressure integral method[C]// *SPE Western Regional Meeting*. SPE, 1989.
- [34] LOH W L. On latin hypercube sampling[J]. *The Annals of Statistics*, 1996, 24(5): 2058-2080.
- [35] LOSHCHILOV I, HUTTER F. Decoupled weight decay regularization[J]. *arXiv*: 1711. 05101, 2017.



WANG Xiao, born in 1994, Ph.D, associate professor. His main research interests include deep learning, data mining, signal processing and AI for Science.

(责任编辑:喻葵)