



智能可视建模与仿真实验室

Intelligent Visual Modeling & Simulation (iGame) Lab

IGA 第十二讲 基于深度学习的等几何分析 与课程总结

徐 岗

杭州电子科技大学



目录

1. 研究背景
2. 基于卷积神经网络的等几何分析
3. 基于图神经网络的等几何分析
4. 结果展示与未来展望
5. 课程总结

1.研究背景

- 生物
- 材料
- 化学
- 药学
- 力学



科学问题—流场仿真

■ 传统CFD求解

- 离散（有限差分、有限体积、有限元）
- 网格划分（结构、非结构）
- 数值求解（Euler、RK4）

$$\begin{cases} \partial_t u = \alpha^2 \cdot \partial_{xx} u \\ u(0, x) = u_0(x) \\ u(t, 0) = u(t, l) = 0 \end{cases}$$

$u_{i,j} \approx u(t_i, x_j)$, with $t_{i+1} = t_i + k$ and $x_{j+1} = x_j + h$,

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{k} = \alpha^2 \left(\frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2} \right),$$

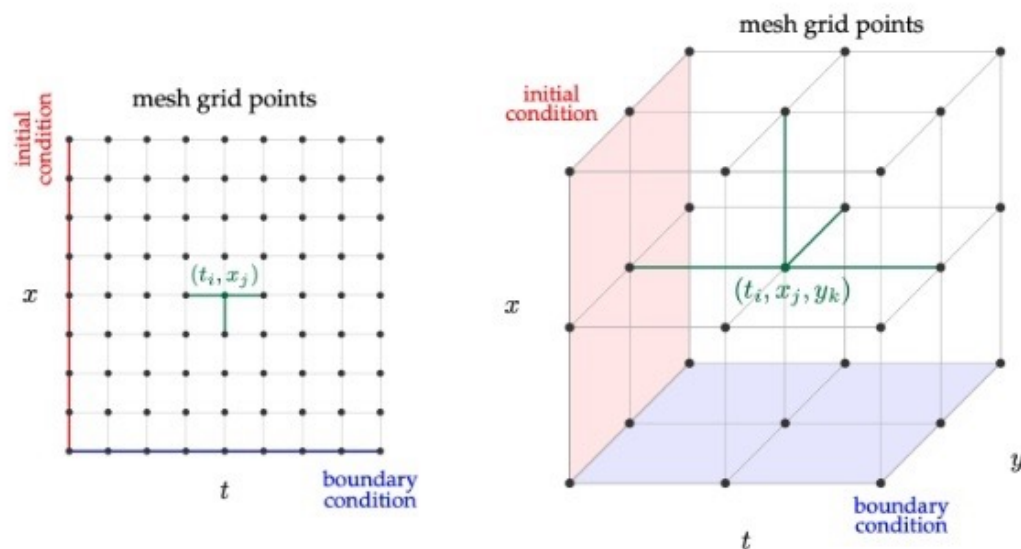
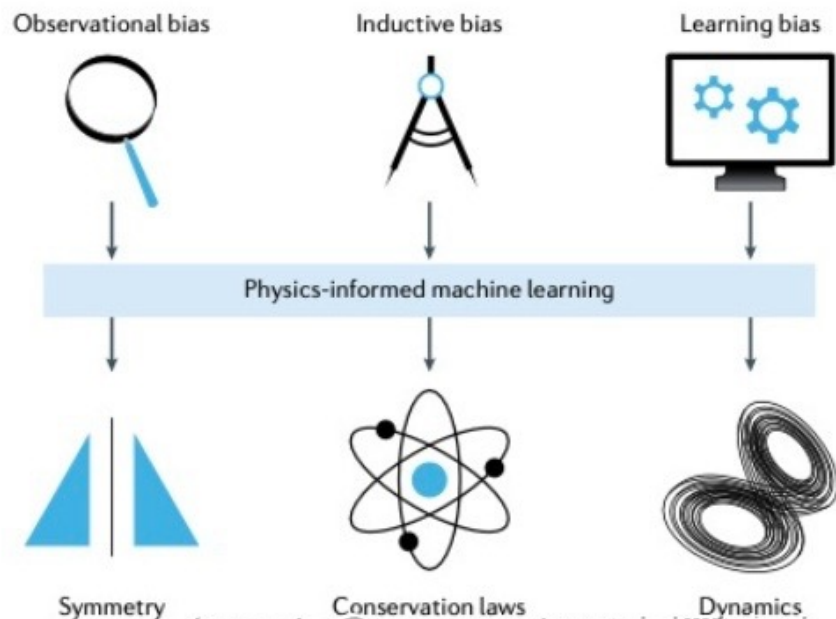
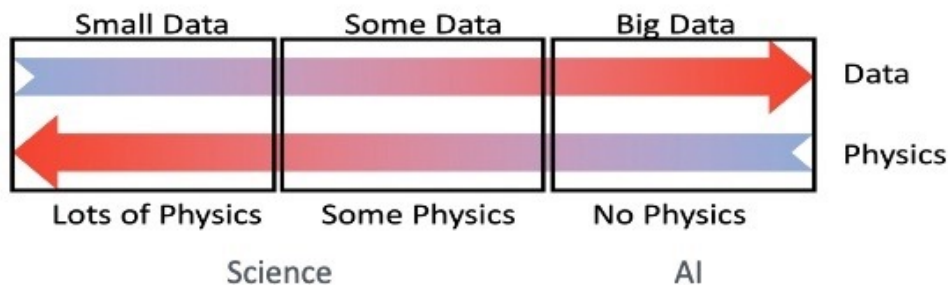


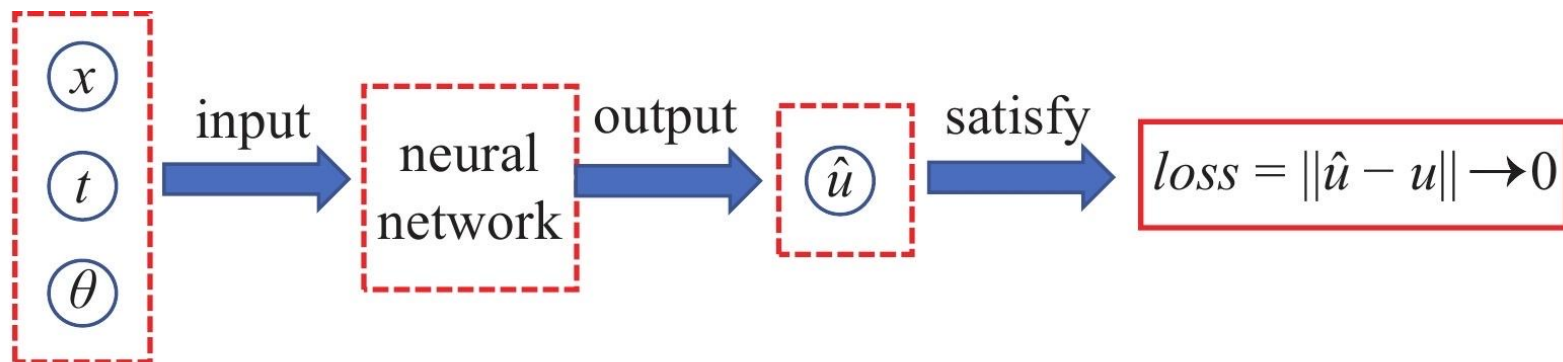
Figure 3.1: Illustration of finite difference methods for solving PDEs in two (left) and three (right) dimensions. The known function value on the boundaries is combined with finite differences to solve for the unknown function on a grid in the interior of the domain where it is defined.

系统层面看，三类在神经网络结合物理信息的任务

- 大量物理信息，少量数据 - 正问题
 - 传统数值模拟方法：有限差分、有限元
 - Physics-informed neural network (PINN)
- 一部分数据，一部分物理信息 - 反问题
 - Physics-informed neural network (PINN)
- 大量数据，没有物理信息 - 纯数据驱动建模
 - CNN/UNet/FNO……

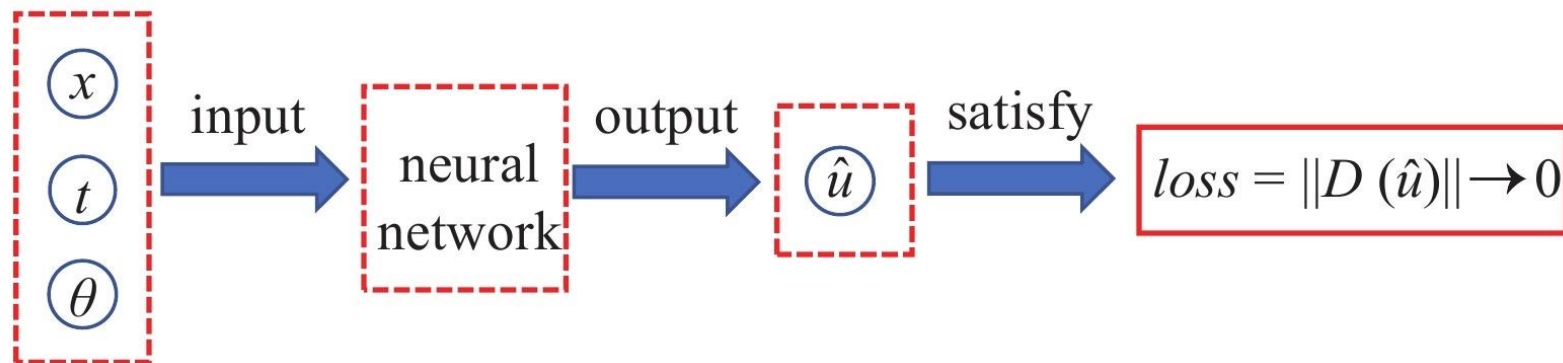


知乎 @Pascal算法摆渡人



(a) 数据驱动的 PDE 求解方法, 精确解是标签数据

(a) Data-driven PDE solution method, the exact solution is label data

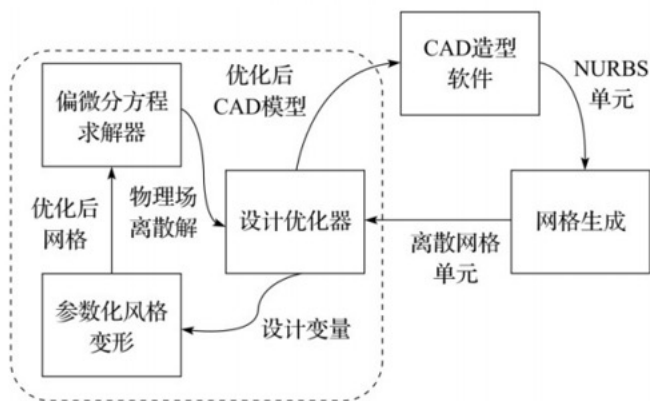


(b) 物理驱动的 PDE 求解方法, 无须任何标签数据

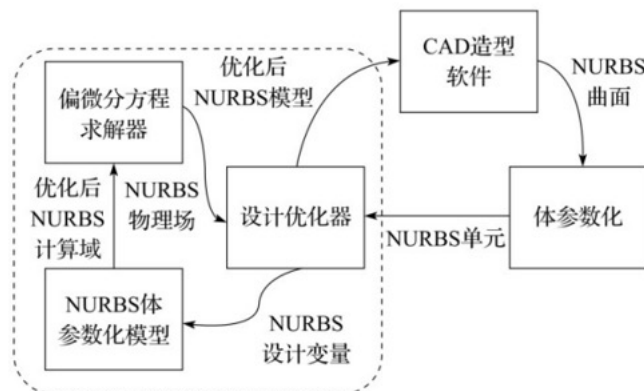
(b) Physics-driven PDE solution without any label data

知乎 @Pascal算法摆渡人

传统数值仿真方法普遍存在计算量大、求解时间长等弊端，尤其是针对复杂问题的仿真分析。比如精细血管中流固耦合的仿真分析，有限元方法的计算时间可能长达上百小时，这个时长是令人难以接受的。虽然等几何方法可以将仿真时间降低数倍，但仍旧无法适应实时仿真的任务场景。



(a) 基于有限元分析的 CAD/CAE 流程图



(b) 基于等几何分析的 CAD/CAE 流程图

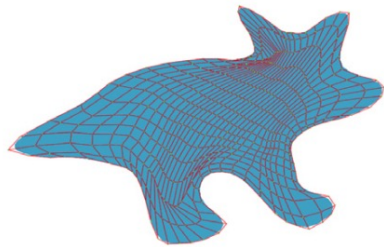
传统数值仿真方法的求解过程十分繁琐，不仅容易出错，而且仿真的结果可能也无法令人满意。于是，人们希望借助深度神经网络(DNN)强大的逼近能力以更稳健更方便的方式解决这些复杂问题，以达到在基本保持精度的前提下有效降低仿真时间的目的。

基于深度学习的等几何分析主要使用数据驱动方法，利用等几何方法制作面向不同仿真问题的多种拓扑结构数据集。

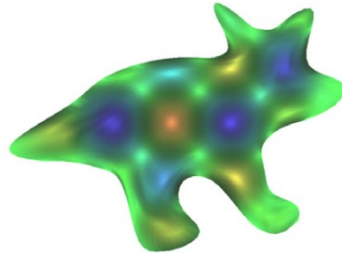
基于等几何方法制作数据集有诸多好处：

- ①基函数内部具有高阶连续性，且通过升阶操作可以增加基函数的连续性，因此 **IGA** 数值解是连续光滑的，通过神经网络预测得到的解在某种程度上能保留此特性；
- ②在优化解的过程中，**CAD**与 **CAE** 不需要交换数据，因此 **IGA** 的分析过程十分快速，制作数据集更加便捷；
- ③不用对几何模型和分析模型进行转换，因此不会造成模型的精度损失，得到的数值解更加精确，数据集质量更高，更利于神经网络训练。

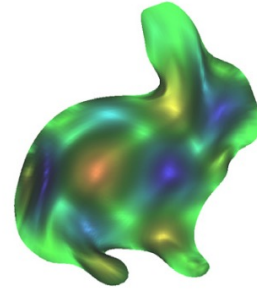
如何实现拓扑一致模型的分析重用？



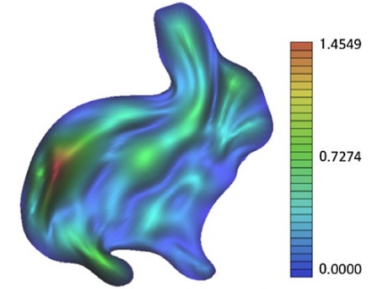
(a) Model A.



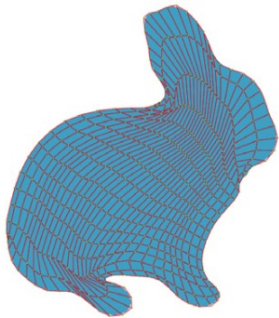
(b) IGA result of (a).



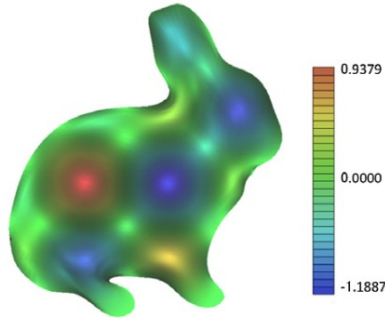
(e) Direct mapping result from (b).



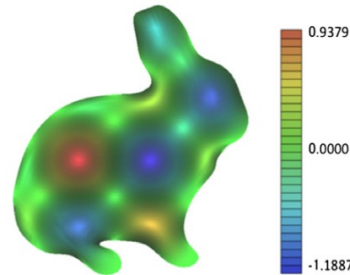
(f) The difference between (e) and (d).



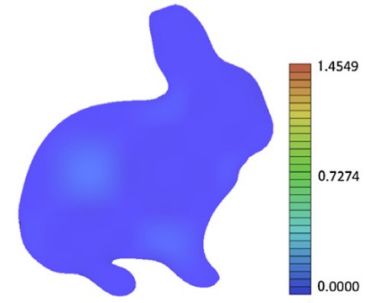
(c) Model B.



(d) IGA solution of (c).



(g) Solution w.r.t the proposed method.



(h) The difference between (g) and (d).



Contents lists available at [ScienceDirect](https://www.sciencedirect.com)

Computer-Aided Design

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cad



Isogeometric computation reuse method for complex objects with topology-consistent volumetric parameterization[☆]



Gang Xu^{a,b,*}, Tsz-Ho Kwok^{c,d}, Charlie C.L. Wang^{c,e}

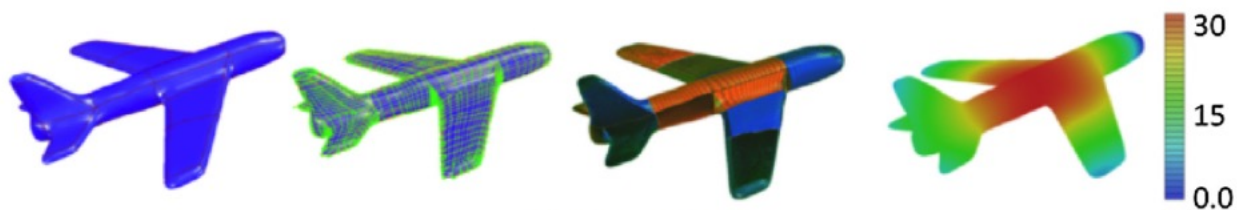
^a School of Computer Science and Technology, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, PR China

^b Key Laboratory of Complex Systems Modeling and Simulation, Ministry of Education, Hangzhou, China

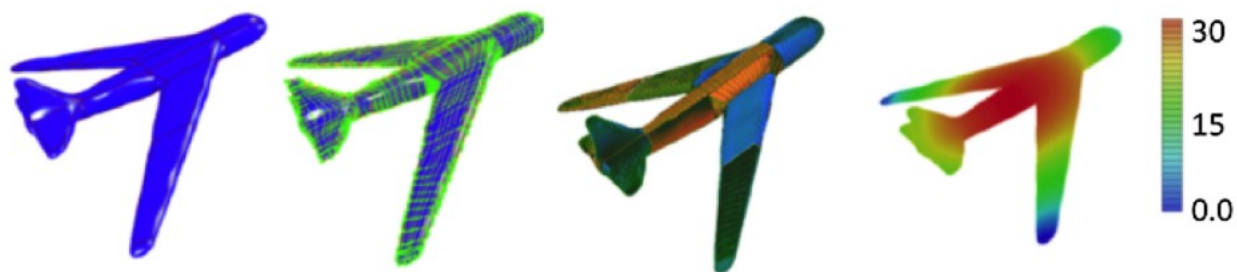
^c Department of Mechanical and Automation Engineering, The Chinese University of Hong Kong, Hong Kong

^d Department of Mechanical and Industrial Engineering, Concordia University, Montreal, Quebec, Canada

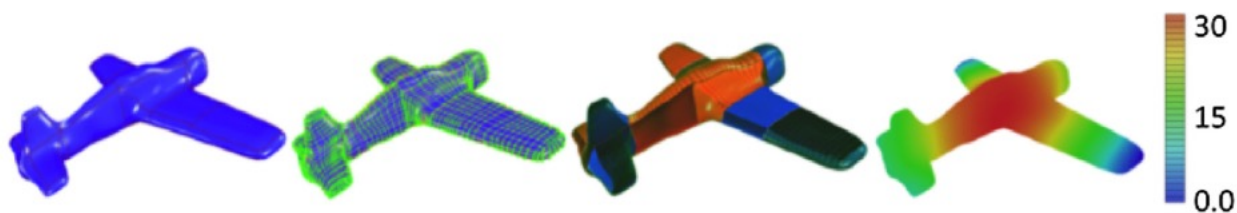
^e Department of Design Engineering, Delft University of Technology, The Netherlands



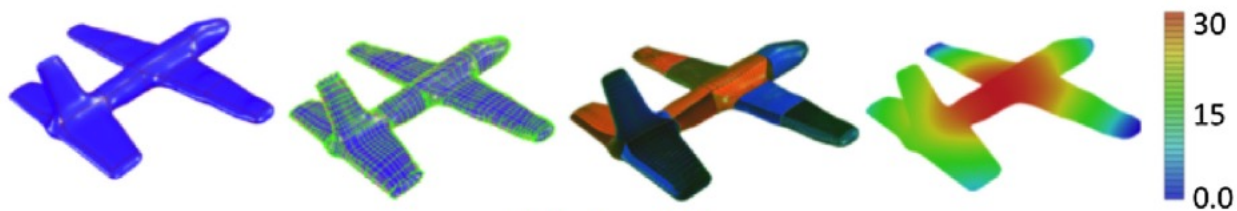
(a) Airplane model I.



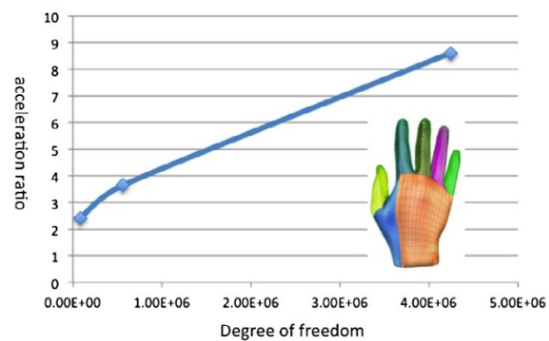
(b) Airplane model II.



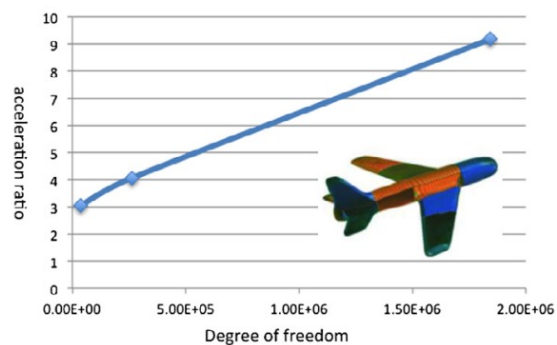
(c) Airplane model III.



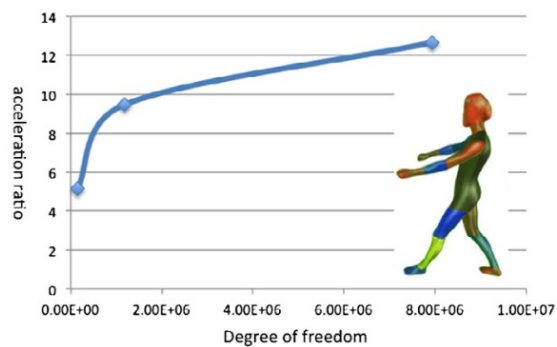
(d) Airplane model IV.



(a) Hand models.



(b) Airplane models.

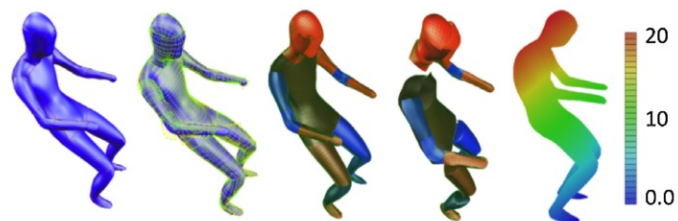


(c) Human models.

如何真正实现分析重用？深度学习提供了可能！



(a) Human body model I.



(b) Human body model II.



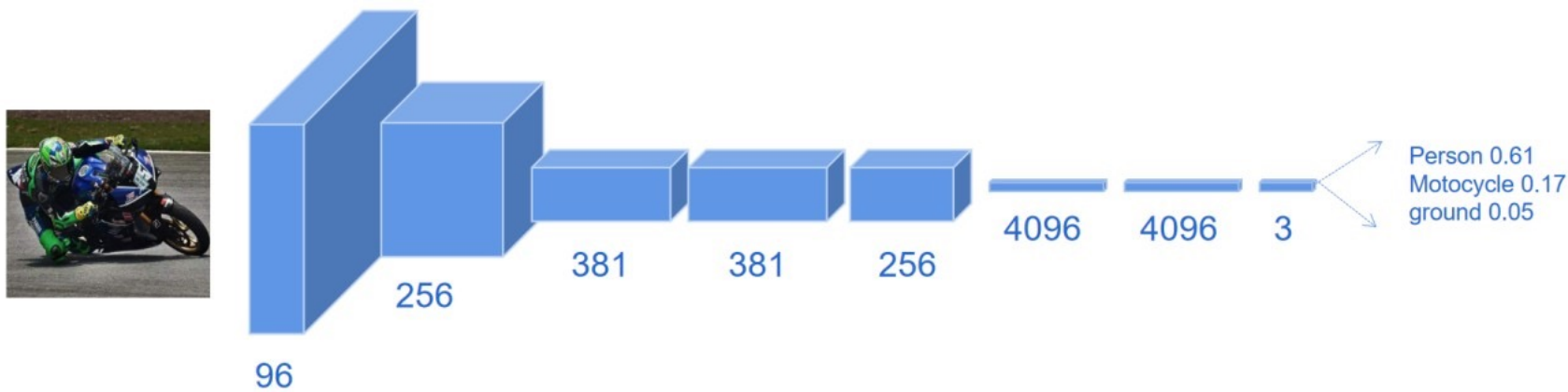
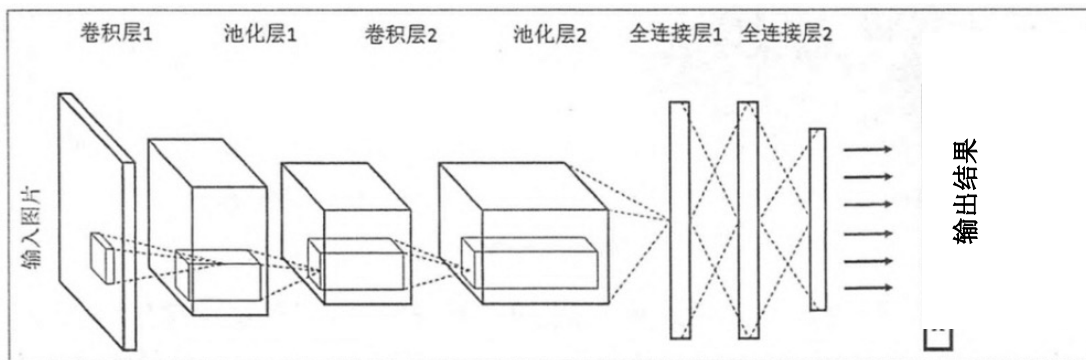
(c) Human body model III.



(d) Human body model IV.

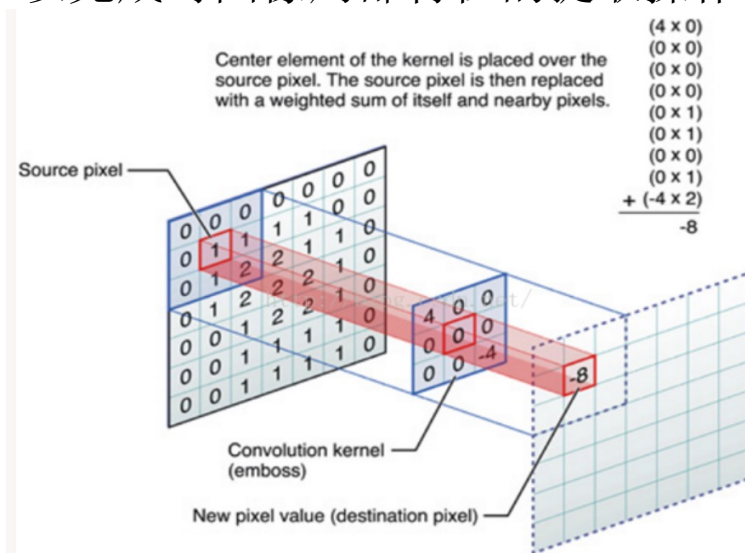
2.基于卷积神经网络的等几何分析

卷积神经网络(**CNN**)的基本结构由以下几个部分组成：
输入层，卷积层，池化层，激活函数层和全连接层。



输入层：输入的二维矩阵。如图片就是二维像素矩阵。

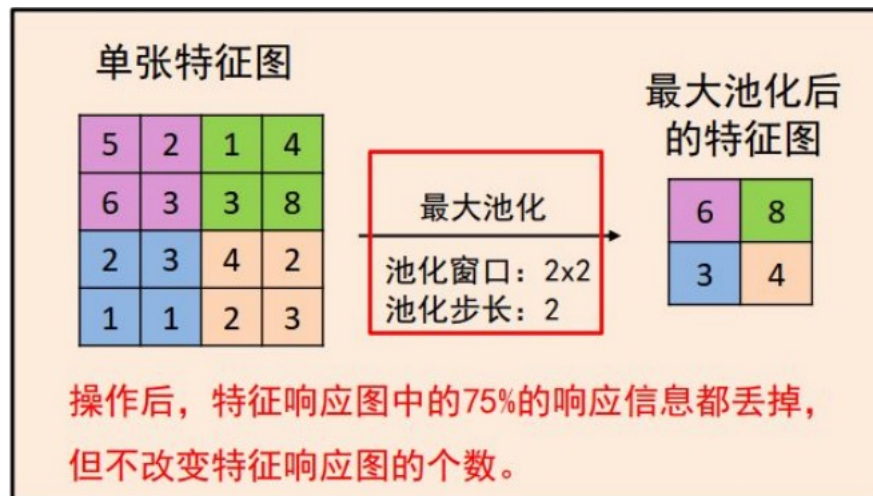
卷积层：对二维矩阵（不同的数据窗口数据）和**滤波矩阵**（一组固定的权重：因为每个神经元的多个权重固定，所以又可以看做一个恒定的滤波器）做**内积**（逐个元素相乘再求和），以完成对图像局部特征的提取操作。



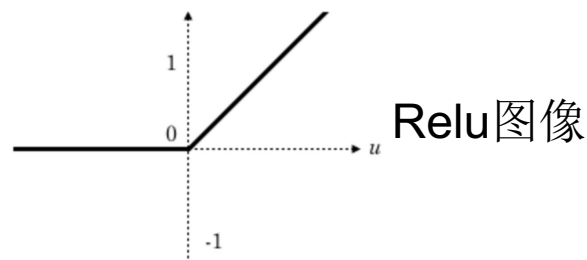
图中左边部分是原始输入数据，图中中间部分是滤波器，图中右边是输出的新的二维数据。中间滤波器与数据窗口做内积。每次滤波器都是针对某一局部的数据窗口进行卷积，这就是所谓的**CNN**中的**局部感知**机制。

在更高层将这些感受得到的不同的局部神经元综合起来就可以得到全局的信息。

池化层：将输入矩阵某一位置相邻区域的总体统计特征作为该位置的输出。主要有平均池化、最大池化等。简单来说池化就是在该区域上指定一个值来代表整个区。



激活函数层：使用非线性激活函数可以得到非线性的输出值，帮助网络学习数据中的复杂模式。常见的激活函数有Sigmoid、tanh和Relu等。



全连接层：自动提取图像特征，得到需要的输出结果。

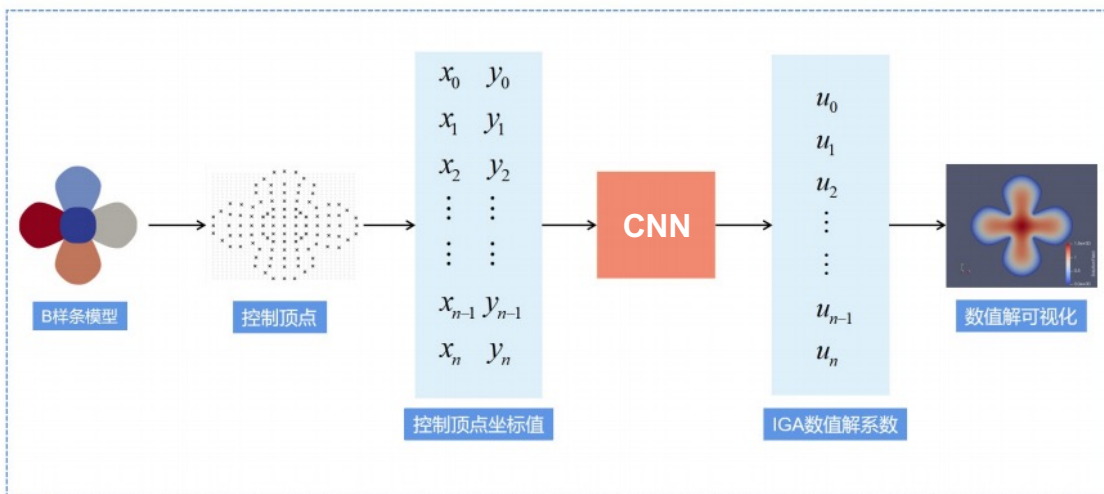
基于卷积神经网络的等几何分析方法(IGA-Reuse-Net)旨在拓扑一致的 **B** 样条模型上快速求解偏微分方程(PDE)，并得到光滑连续的高精度预测数值解。

目前求解的PDE主要为基于狄利克雷边界条件的二维泊松方程：

$$\begin{aligned} -\Delta\phi &= f \quad \text{in } \Omega \\ \phi &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{aligned},$$

一组拓扑一致的 **B** 样条模型只有控制顶点的坐标值不同。同一物理问题在一组拓扑一致 **B** 样条模型上的IGA 仿真数值解中只有系数不同。

综上，可确定卷积神经网络的输入输出，将 **B** 样条模型控制顶点的坐标作为输入，该模型对应数值解的系数作为输出。



将网络预测的系数 u_{ij} 与样条基函数 N_{ij} 线性组合以构造网络预测数值解 $\hat{\Phi}_h(x, y)$

$G^{-1}(x, y)$ 为样条模型的逆映射表示。

$$\hat{\Phi}_{h(x,y)} = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n N_{ij}(G^{-1}(x, y)) u_{ij}$$

IGA-Reuse-Net采用数据驱动的方式训练深度神经网络模型。目前不存在现成数据集供使用，提出了一个流程以生成多个面向不同仿真问题且拓扑结构不同的数据集。

为了生成用于训练的数据，需要制作多个拓扑一致的样条模型，并用等几何分析库求解偏微分方程获得数值解的系数作为标签数据。自制数据集的主要步骤包括：

步骤一：制作拓扑一致的 **B** 样条模型；

步骤二：对 **B** 样条模型归一化；

步骤三：使用等几何分析库求解偏微分方程；

步骤四：根据**CNN**的输入输出格式，转换 **B** 样条模型以及 **IGA** 数值解系数的格式。

制作拓扑一致的 B 样条模型

首先制作若干不同形状的 B 样条模型，其次通过程序对手动调整的模型进行不均匀缩放，从而批量化生成更多拓扑一致的 B 样条模型。



1-亏格模型由4片B样条组成，每片样条的控制网格大小均为 5×5 ，各参数化方向的阶数均为4。
该组模型共有5880个不同形状的带孔模型。



花朵模型由5片B样条组成，每片样条的控制网格大小均为 5×5 ，各参数化方向的阶数均为4。
该组模型共有4000个不同形状的花朵模型。



人体模型由15片B样条组成，每片样条的控制网格大小均为 4×4 ，各参数化方向的阶数均为4。
该组模型共有6300个不同形状的人体模型。

随着求解区域的缩放，偏微分方程的数值解不成规律地变化。如果不对几何模型的大小加以限制，泊松方程的数值解将是无界的，这对神经网络的学习造成极大的障碍。因此，有必要对上节制作的 B 样条模型进行归一化，将模型大小限制在 $[0,1] \times [0,1]$ 范围内。

首先找出 B 样条模型所有控制顶点 x 坐标和 y 坐标的最小值与最大值，随后计算缩放比例 s ：

$$s = 1 / \max(x_{\max} - x_{\min}, y_{\max} - y_{\min})$$

然后得到控制顶点的归一化坐标：

$$x_n = (x - x_{\min}) \times s, y_n = (y - y_{\min}) \times s$$

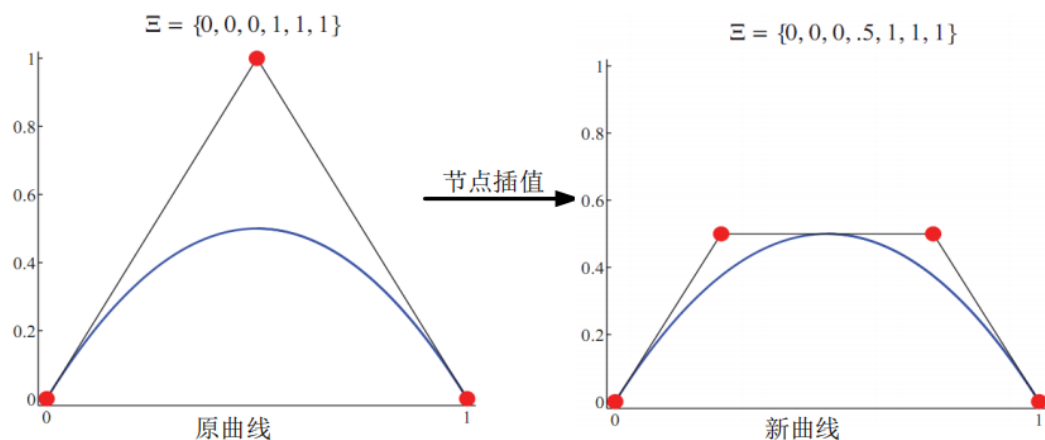
至此即可完成对一个 B 样条模型的归一化操作。

使用等几何分析库在归一化的 **B** 样条模型上求解泊松方程，然后从各模型的**IGA**数值解中提取系数作为标签数据并用于网络训练。

在利用 **IGA** 库求解的过程中可对样条模型进行细化操作。通常，加细程度越高，**IGA** 数值解的精度越高，但同时时间成本也在增加。

在 **IGA** 库的求解过程中对所有样条模型均进行**h**型细化，并且是均匀加细，即均匀插入节点。

h细化



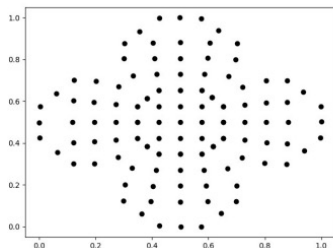
对1亏格模型均匀加细两次，求解的自由度为 404
对花朵模型均匀加细两次，求解的自由度为 561
对人体模型均匀加细一次，求解的自由度为 305

基于卷积神经网络架构，将样条模型的控制顶点 P_{ij} 与 IGA 数值解中的系数 u_{ij} 转换成矩阵格式数据。

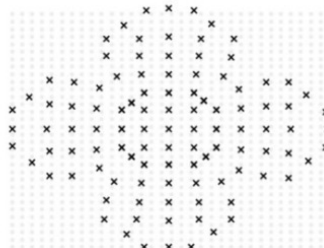
首先从归一化的 **B** 样条模型中提取控制顶点，图(b)中的黑色圆点表示控制顶点。然后根据 $r_{ij} = \lfloor x_{ij} \times M \rfloor$, $c_{ij} = \lfloor y_{ij} \times N \rfloor$ 通过控制顶点 P_{ij} 的坐标 (x_{ij}, y_{ij}) 得到在 $M \times N$ 矩阵中的下标 (r_{ij}, c_{ij}) 从而得到关于控制顶点的像素矩阵，如图(c)所示，纯黑色“×”表示控制顶点，浅灰色圆点表示填充 0。



(a) B 样条模型



(b) 控制顶点



(c) 矩阵格式

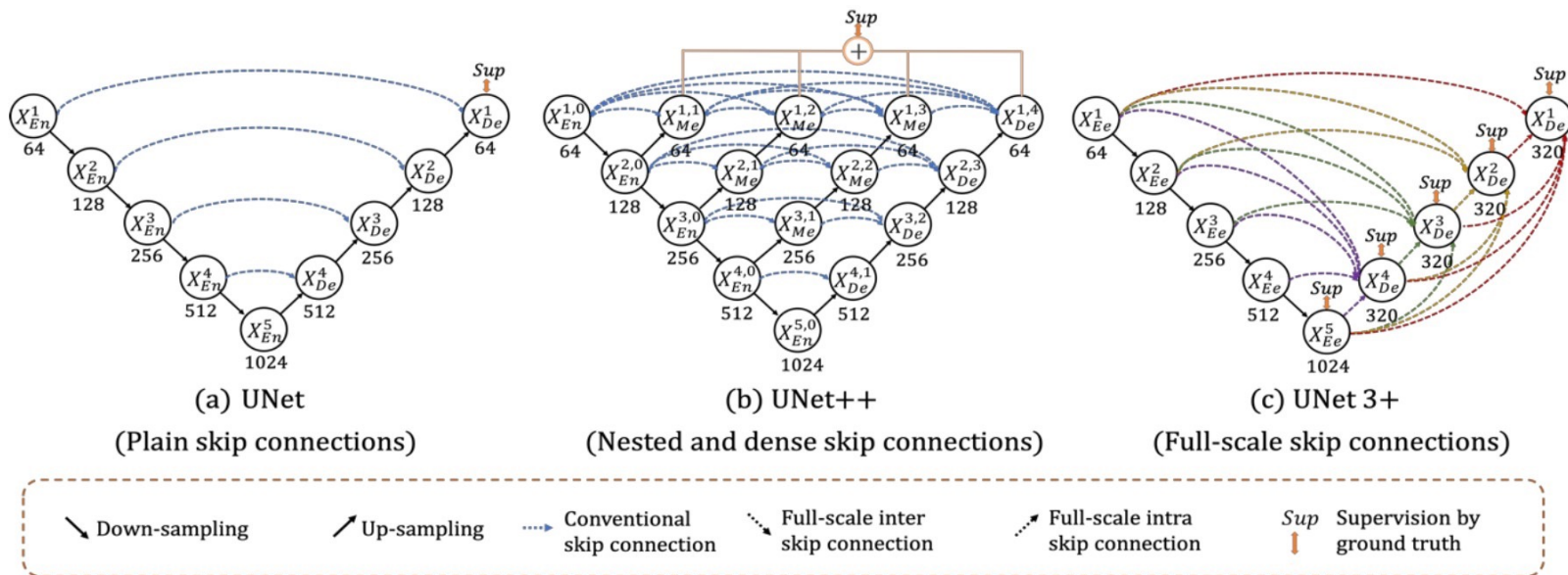
得到所有控制顶点的下标后，在矩阵中填入不同的值可得到不同含义的矩阵。

在控制顶点处填充1，可得到标记控制顶点位置的0-1矩阵。

在控制顶点处填入控制顶点的x与y坐标，可得到控制顶点的x与y坐标矩阵。

数值解的系数与控制顶点一一对应，在控制顶点处填入系数值可得到系数矩阵。

基于卷积神经网络的等几何分析使用的卷积网络模型主要基于在UNet以及 UNet++基础上改进的**UNet3+**架构，是一种基于**编码器-解码器**结构的卷积神经网络。



编码器模块，通过多次卷积和池化操作将图像特征逐步缩小、抽象化，以提取高维特征。

解码器模块，通过反卷积或上采样操作使得特征尺寸逐层变大，直至恢复原图像尺寸。在上采样的过程中通过**跳接**融合了编码器模块的低层特征。

基于 UNet 与 UNet++，UNet3+采用**全尺度**的跳接，捕获全尺度下的低层细节与高层语义，全面探索信息。

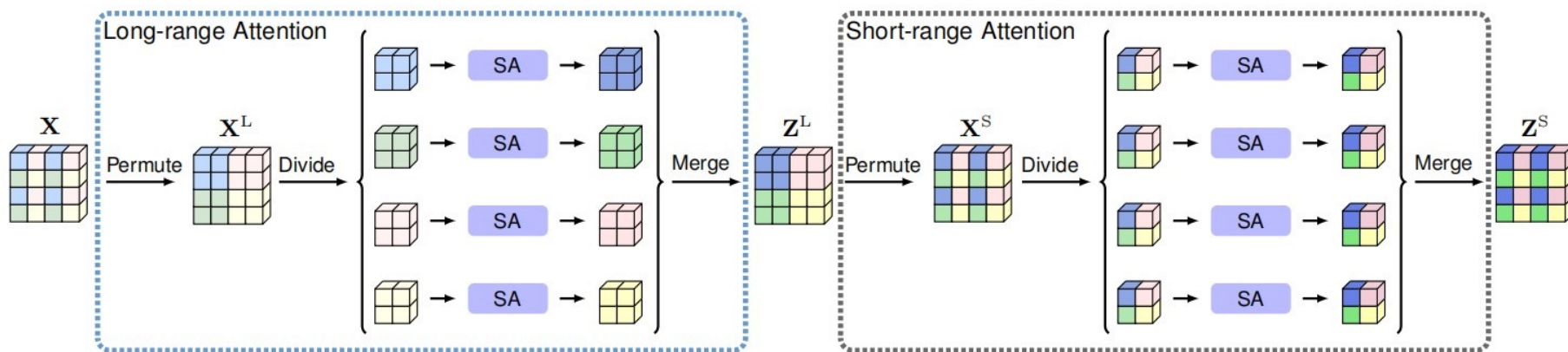
UNet3+中在解码器中可融合来自编码器低层和相同层的特征图以及来自解码器低层的特征图。

通过全尺度的跳接，UNet3+不仅可提高预测精度，还可减少网络参数，提高计算效率。

除了经典的 UNet3+ 架构,IGA-Reuse-Net还使用了自注意力模块。

自注意力机制不再将注意力聚焦在少量特征上,而是更关注特征之间的关系,它能更好地捕捉特征之间的相关性。

交错自注意力(Interlaced Sparse Self-Attention, ISSA)计算所有像素点两两之间的权重,在模型训练及测试中提供全局参考,以增强卷积网络模型的预测能力。

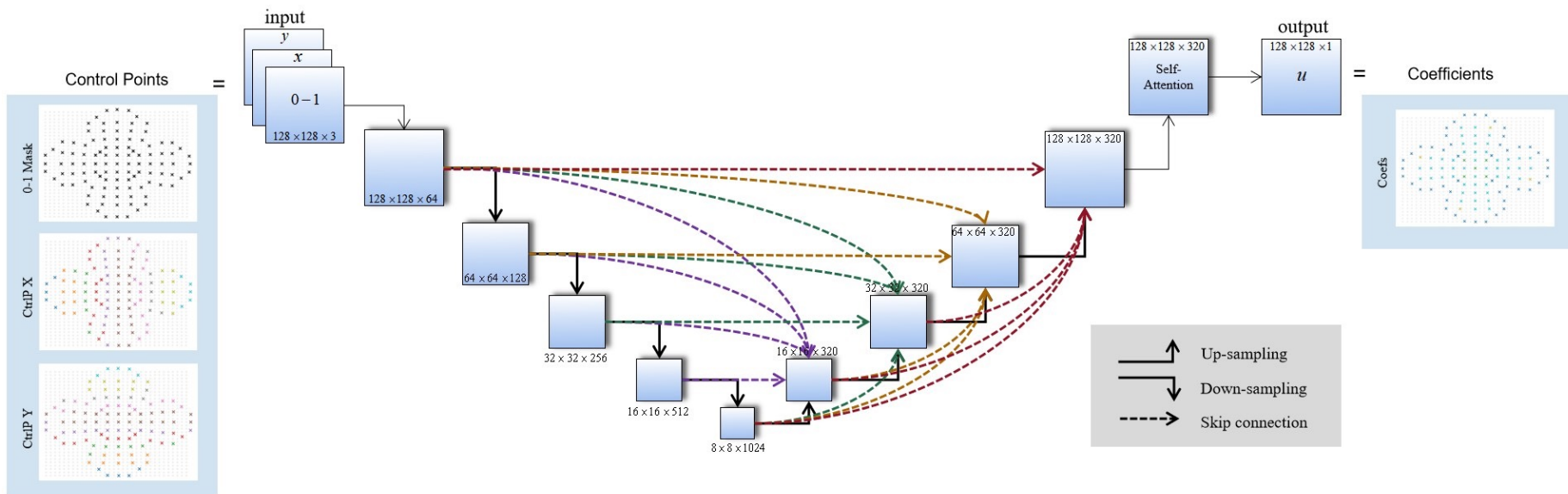


交错稀疏自注意力的核心是将密集相似矩阵 X 分解两次,得到稀疏相似矩阵 X^L 和 X^S ,每次针对稀疏近似矩阵进行self-attention

Long-range Attention 的重点是在具有较长空间距离的子集上应用Self-attention。

Short-range Attention 的重点是在具有较短空间距离的子集上应用Self-attention。

IGA-Reuse-Net整体网络架构如下图所示



图中编码器的**Down-sampling**即下采样操作包括最大池化操作和一个卷积块。

解码器中的 **Up-sampling** 即上采样操作包括双线性插值（**bilinear**）的上采样操作和一个卷积块。每个卷积块包括卷积计算、批归一化以及非线性的激活函数等模块。

图中虚线表示跳跃连接，这些跳接模块由最大池化操作或上采样操作和一个卷积块组。

在输出层前，添加了一个 **ISSA** 模块该模块为每个像素提供全局参考。

通过计算一一对应数据点之间误差平方的均值即可得到均方误差:

$$L_{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2$$

将 **B** 样条模型与数值解中的系数转换成矩阵格式数据时，在二维像素矩阵中，除了填入控制顶点坐标、系数等有用的数值，还填充了大量 **0**。

均方误差中就包含了填充 **0** 的误差计算，会参与反向传播以及更新网络参数等过程，神经网络需要花费大量精力拟合这些无用数据，对训练过程产生一定程度负面影响。

因此提出系数的误差作为损失函数。该函数只衡量预测系数与 **IGA** 数值解系数之间的 **L1** 距离:

$$L_u = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |\hat{u}_i - u_i|$$

L_u 只计算系数之间的误差，该误差引导神经网络专心拟合系数的值，避免在填充 **0** 的拟合上花费大量精力

系数损失函数简单直接，它只计算了一一对应系数之间的误差。但这些系数是一个整体，它们与样条基函数线性组合用于表示整个模型的 IGA 数值解。

我们的最终目标是得到偏微分方程的数值解，预测系数只是一个中间环节。因此提出网络预测数值解与 IGA 数值解的误差作为损失函数：

$$L_{\Phi_h} = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S |\hat{\Phi}_h(x_k, y_k) - \Phi_h(x_k, y_k)|$$

系数损失函数 L_u 是一个直接的损失函数，它侧重降低系数的误差
数值解损失函数 L_{Φ_h} 是一个间接的损失函数，从整体考虑系数之间的关系，侧重降低数值解的误差。

结合这两个损失函数作为网络模型的优化目标：

$$L_{total} = \alpha L_u + \beta L_{\Phi_h}$$

α 和 β 表示权重，均设为 1。

系数以及数值解的绝对误差指标的计算方式同损失函数中 L_u 和 L_{Φ_h} 的计算方式

数值解的相对误差是网络预测解与IGA数值解之间的相对误差：

$$e_r = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \left| \frac{\hat{\Phi}_h(x_k, y_k) - \Phi_h(x_k, y_k)}{\Phi_h(x_k, y_k)} \right|$$

该指标方便用于比较不同网络模型的预测效果。

偏微分方程的后验误差能够表明神经网络预测的数值解是否满足偏微分方程本身规律。我们目前主要求解的是泊松方程，其后验误差的显式表示比较容易推导。其公式如下：

$$e_p = \left| \Delta \hat{\Phi}(x, y) + f(x, y) \right| = \left| \frac{\partial^2 \hat{\Phi}(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \hat{\Phi}(x, y)}{\partial y^2} + f(x, y) \right|$$

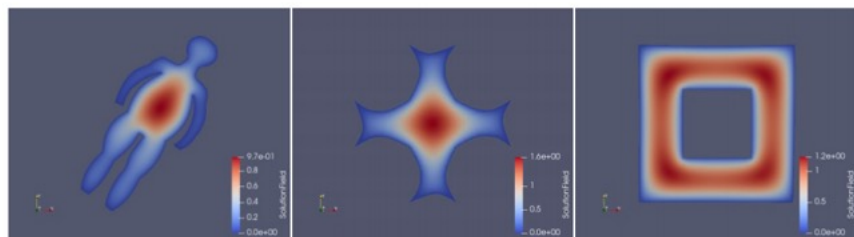
目前实验主要在三种不同拓扑的几何模型上求解两种不同右端项的泊松方程。

第一种右端项函数是一个常数 $f_1 = 100$,此时泊松方程的数值解如图(a)所示, 该数值解在几何模型中间的数值最高, 在向边缘扩散的过程中逐渐减小, 直至边界降为 0。

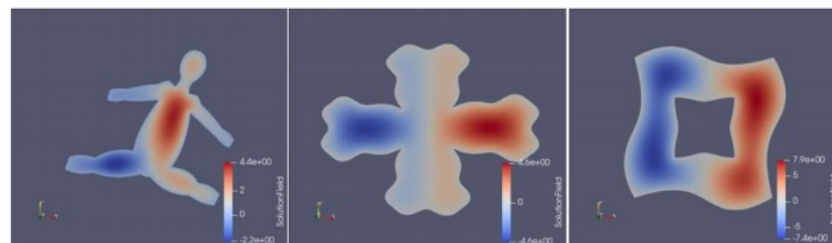
在人体模型上、花朵模型上以及 1 亏格模型上求解 f_1 右端项的泊松方程后制作的数据集分别记作 $Human_f_1$ 、 $Flower_f_1$ 和 $Hole_f_1$ 。

第二种右端项函数是一个周期性变化的函数 $f_2 = -100 \times \pi^2 \times \sin(2 \times \pi \times x)$, 此时泊松方程的数值解如图(b)所示。该数值解在几何模型内部存在一个极大值和一个极小值, 并分别以极大值和极小值为中心向周围扩散。

在人体模型上、花朵模型上以及 1 亏格模型上求解 f_2 右端项的泊松方程后制作的数据集分别记作 $Human_f_2$ 、 $Flower_f_2$ 和 $Hole_f_2$ 。

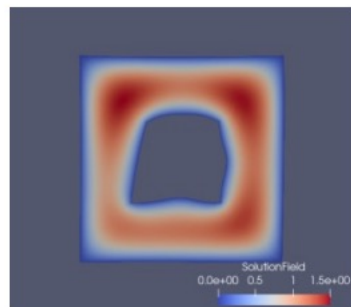


(a) $f_1 = 100$

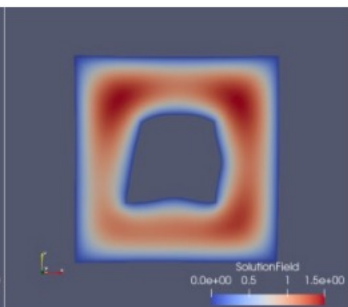


(b) $f_2 = -100 \times \pi^2 \times \sin(2 \times \pi \times x)$

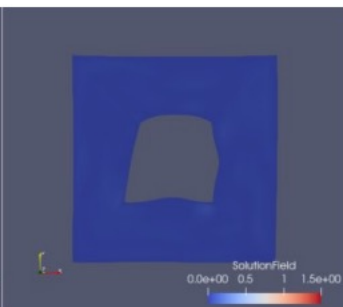
数据集	系数绝对误差	数值解绝对误差	数值解相对误差 (%)	后验误差
$hole_f_1$	0.0148	0.0108	1.42	12.63
$hole_f_2$	0.0878	0.0594	3.63	91.70



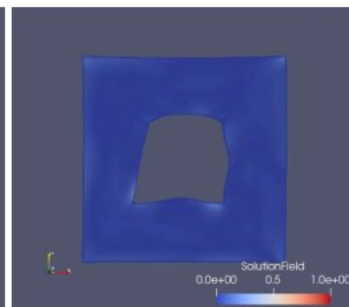
实际数值解



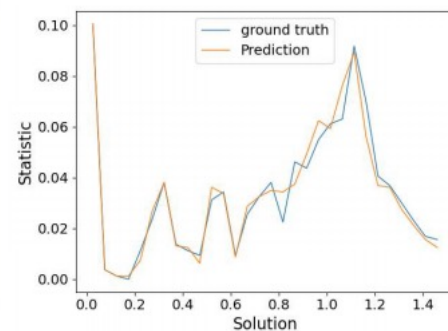
预测数值解



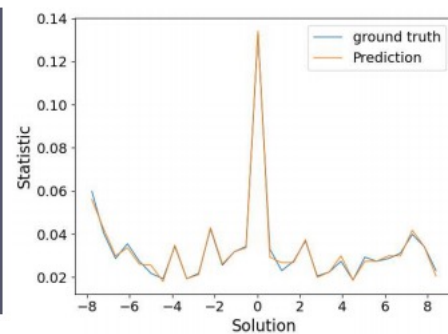
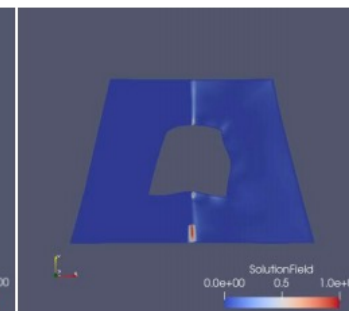
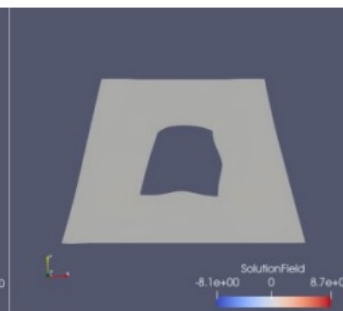
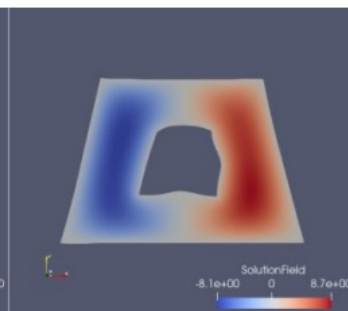
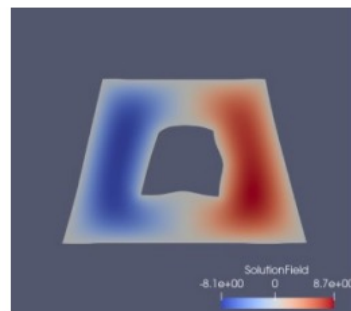
数值解绝对误差



数值解相对误差

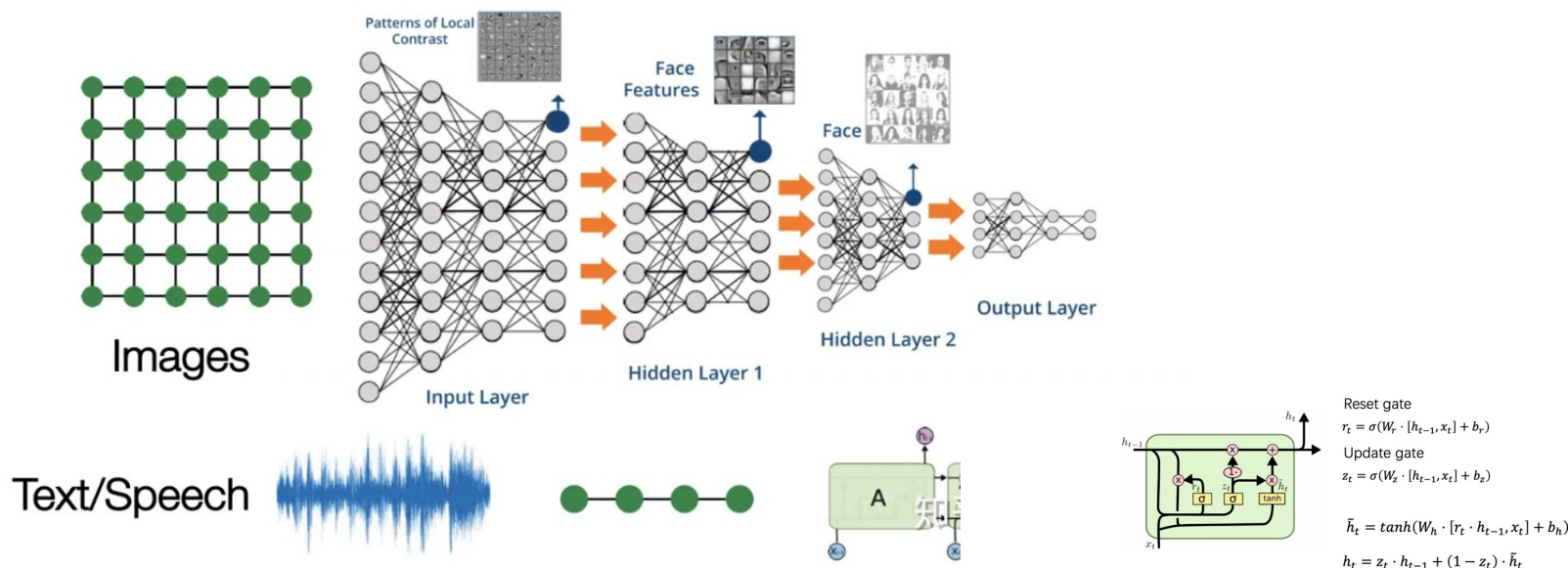


数值解分布



3.基于图神经网络的等几何分析

深度学习在许多领域的成功部分归功于快速发展的计算资源(如GPU)、大训练数据的可用性，以及从欧几里得数据（如图像、文本和视频）中提取潜在表示的有效性。

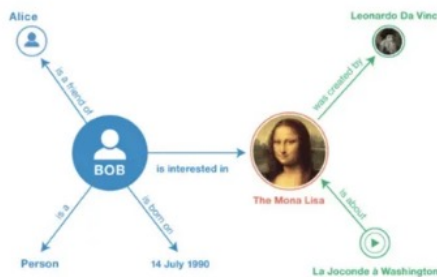


语音、图像、文本都是很简单的序列或者网格数据，是很结构化的数据，传统深度学习很善于处理这种欧几里得数据。

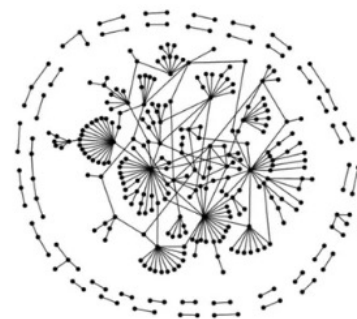
然而并不是所有的事物都可以表示成一个序列或者一个网格，例如社交网络、知识图谱、复杂的文件系统等（如下图），很多事物都是非结构化的。



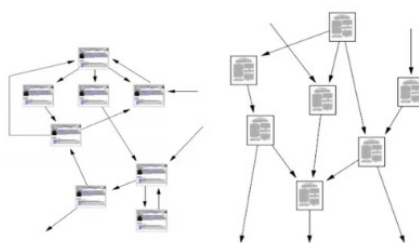
Social networks



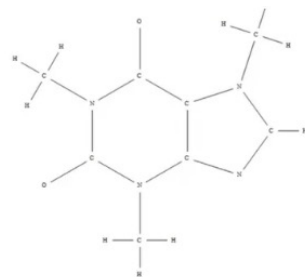
Knowledge graphs



Biological networks



Complex Systems



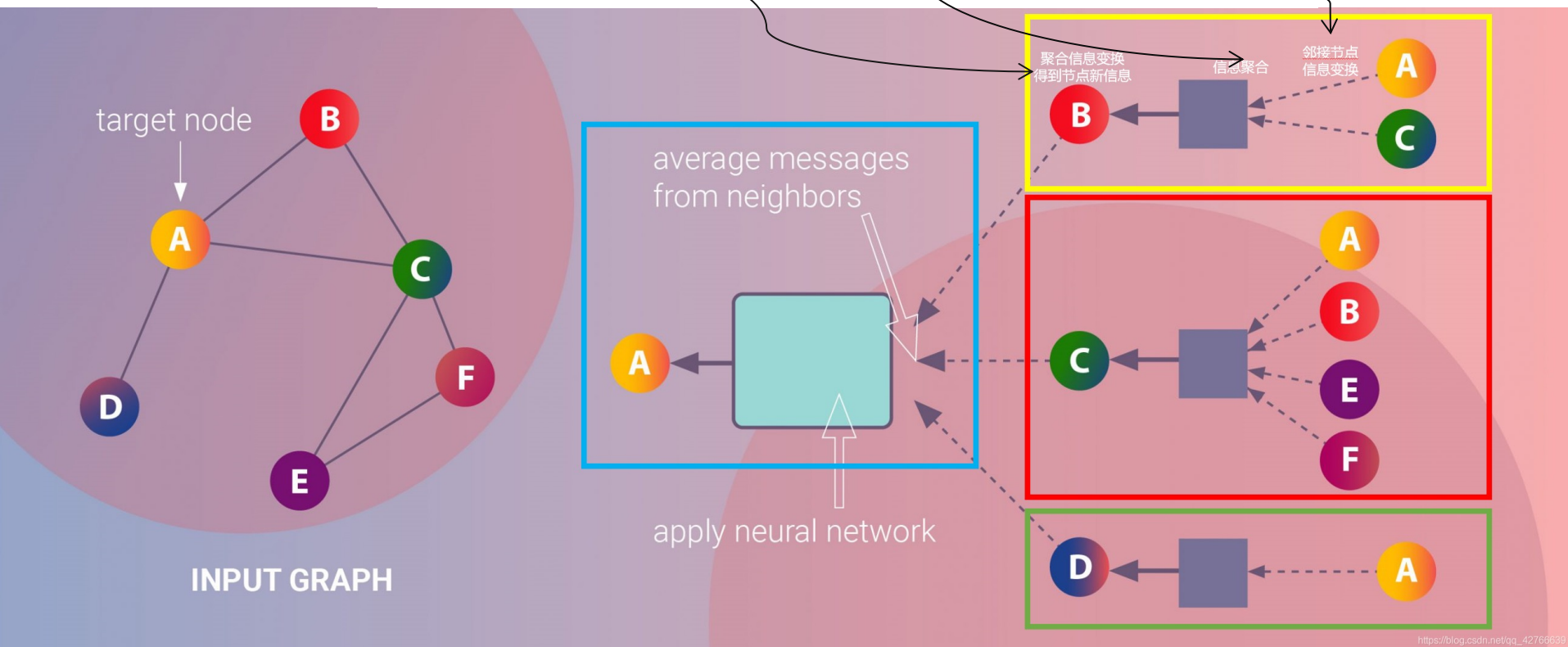
Molecules

图数据的复杂性给现有的深度学习算法带来了重大挑战。导致一些重要的操作（比如卷积）在图像域中容易计算，但很难应用到图域中。

- 1.图的大小是任意的，图的拓扑结构复杂，没有像图像一样的空间局部性
 - 2.图没有固定的节点顺序，或者说没有一个参考节点
 - 3.图经常是动态图，而且包含多模态的特征
- 为此，图神经网络(GNN)应运而生。

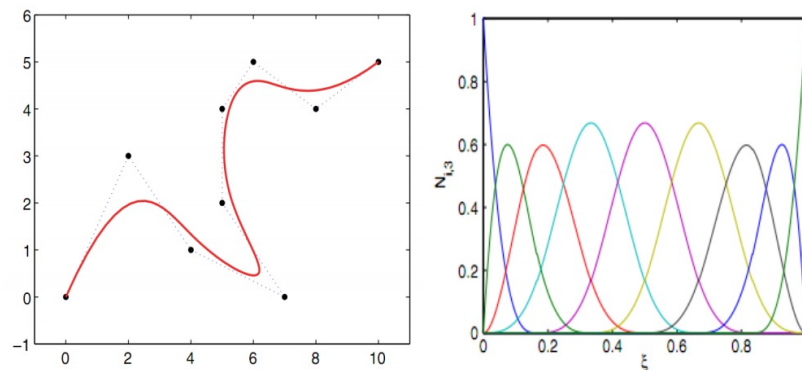
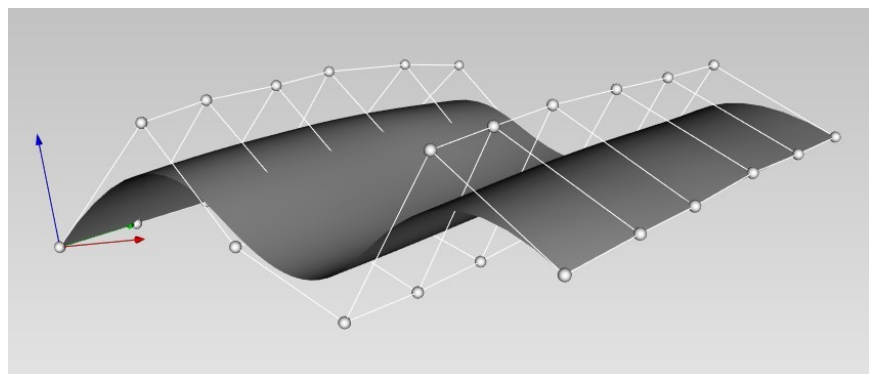
图神经网络主要依托消息传递/邻域聚合机制

$$\mathbf{x}_i^{(k)} = \underbrace{\gamma^{(k)}}_{\text{update}()} \left(\mathbf{x}_i^{(k-1)}, \underbrace{\underbrace{\square}_{j \in \mathcal{N}(i)}}_{\text{message}()} \underbrace{\phi^{(k)}}_{\text{aggregate}()} \left(\mathbf{x}_i^{(k-1)}, \mathbf{x}_j^{(k-1)}, \mathbf{e}_{j,i} \right) \right)$$



①IGA-Reuse-Net将控制顶点映射到一个 $M \times N$ 的二维矩阵中，间接地将控制顶点输入卷积神经网络。大量无用信息(冗余的非控制点)影响卷积的速度和准确率。

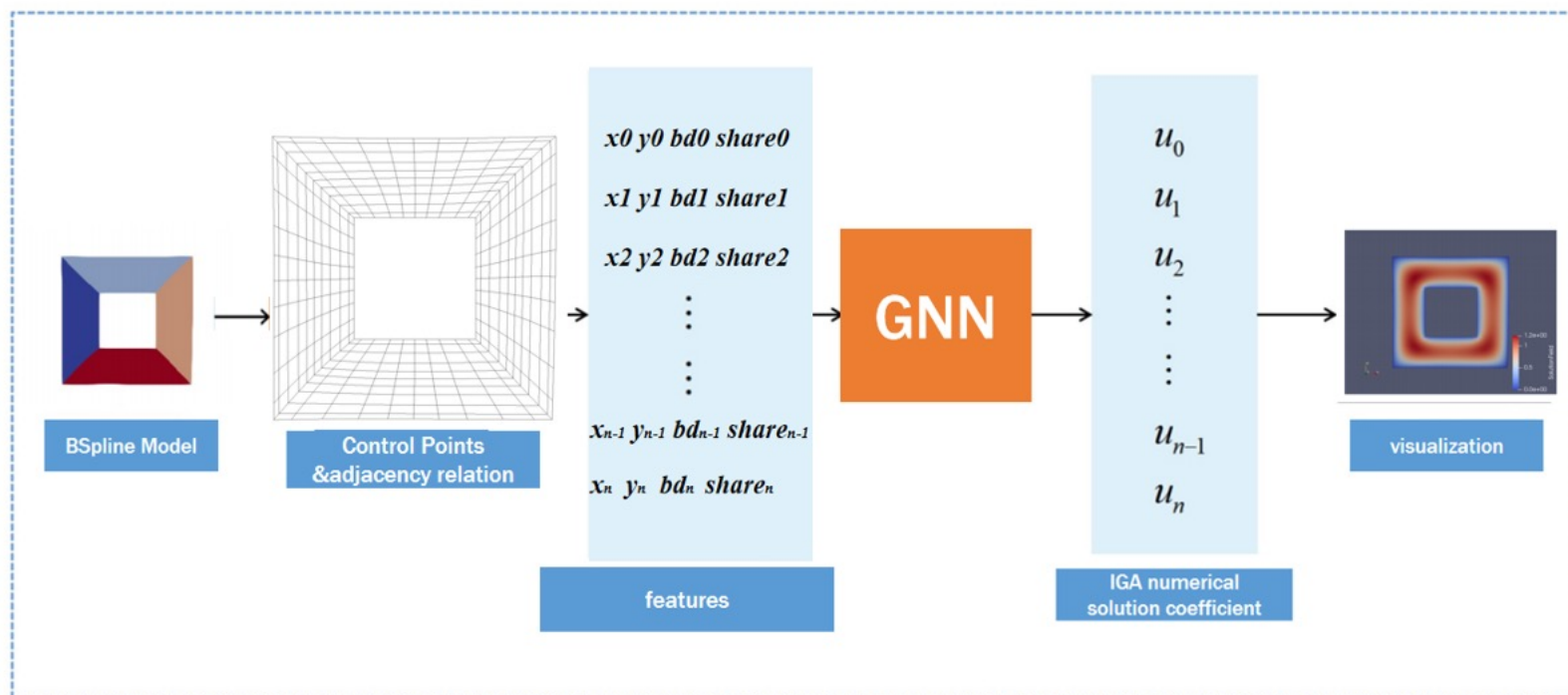
②但随着模型复杂度的升高，控制顶点个数急剧增加，映射到二维矩阵的过程变得越来越复杂。并且由于每个模型控制顶点坐标不一样，因此都需要一个映射文件。



③控制顶点及其邻接关系本质上是一个无向图，图神经网络正是用于处理这种非结构化数据的网络架构。图结构更适合表示B样条数据，且更容易扩展到三维空间的任意几何模型上。由于一组拓扑一致的B样条模型邻接关系固定，可以共用同一个映射文件。

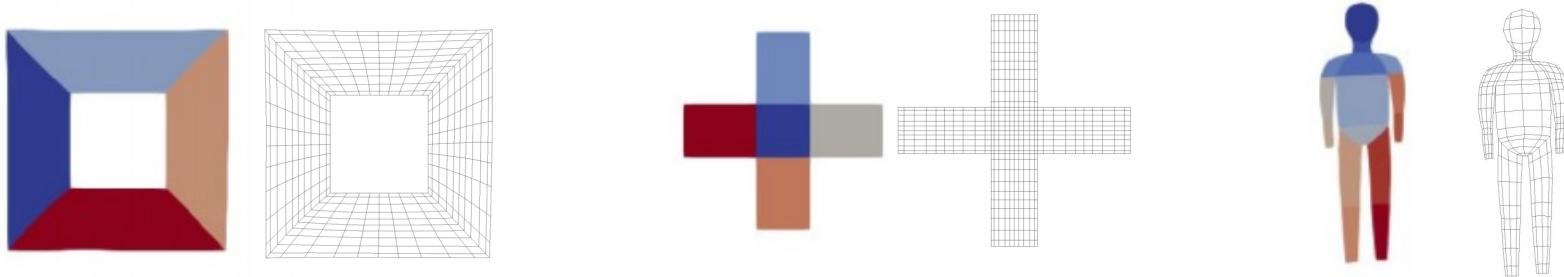
④B样条基函数具有局部支撑性，相邻的控制顶点之间存在很强的联系。而图卷积正是一个关于邻域节点的操作，能够有效地从邻域中提取信息。

为了改进基于卷积神经网络的几何分析方法IGA-Reuse-Net，我们提出了基于图神经网络的等几何分析方法IGA-Graph-Net。



1. 提出了基于图神经网络的等几何分析框架IGA-Graph-Net, 能够在具有复杂边界的拓扑一致模型上快速预测连续光滑的更高精度数值解。
2. 制作了适用于图神经网络的等几何分析数据集, 并且增加初始特征以强化表达能力。
3. 结合ResNetV2架构改进了Point Transformer结构并且使用了适用于狄利克雷边界条件的损失函数。

将控制顶点作为节点，控制顶点的连接关系作为边，样条模型的控制网格很容易转成图结构数据。



B 样条模型的控制网格转成图结构数据后的节点数、边数统计

几何模型	节点数	边数	总个数
1 亏格模型	440	1760	5880
花朵模型	561	2200	4000
人体模型	305	1200	6300

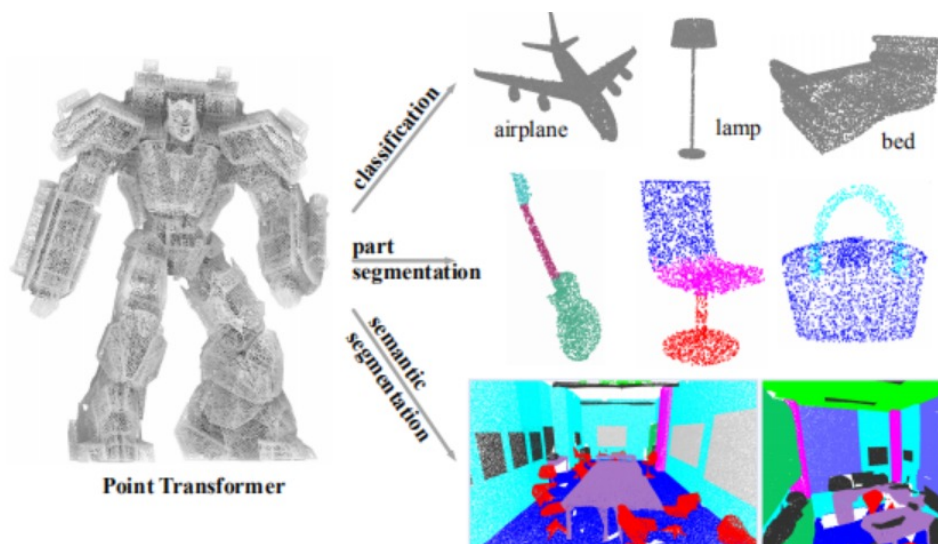
输入图神经网络的节点特征由四维向量组成：

[x] & [y] 代表控制点的坐标。

[bd] 用于标记控制顶点是否位于几何模型的边界上。1代表位于边界，0代表不在边界上。在几何模型中相邻样条的边界是重合的，因此存在一些重复的控制顶点。

用 [share] 标记被共用的控制顶点。0代表不被多片b样条共用，1代表被两片b样条共用，2代表被三片b样条共用，以此类推。

IGA-Graph-Net所使用的图神经网络模型主要为基于ResNetV2改进的Point Transformer模型



Point Transformer诞生于点云领域。在分类、部件分割以及语义分割等方面展现出优异的性能。

然而其优秀的捕捉局部信息的能力使其对于我们的工作有很高的适配性。

Point Transformer主要有两大优势：

1. Point Transformer对于点对计算的是他们之间的向量注意力，向量注意力能够调节单个通道的特征。

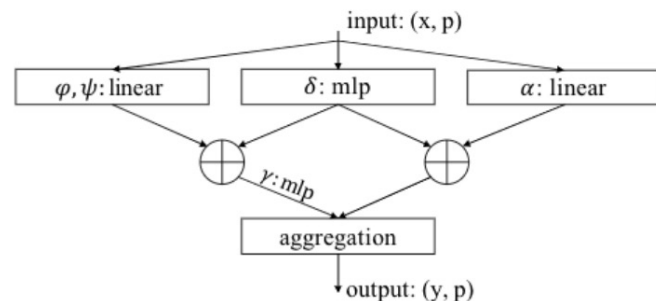
2. Point Transformer引入了坐标位置编码 $\delta = \theta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)$

其中 $\mathbf{p}_i$ 和 $\mathbf{p}_j$ 是点 i 和点 j 的空间坐标， θ 是具有两个线性层和一个ReLU层的非线性多层感知机(MLP)。

位置编码对自注意起着重要作用，使算子能够适应数据中的局部结构。
位置编码 δ 对于注意力产生分支和特征转换分支都很重要。因此在两个分支中都加入了 δ 。

点云领域的Point Transformer层可用如下公式表示：

$$\mathbf{y}_i = \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathcal{X}(i)} \rho(\gamma(\varphi(\mathbf{x}_i) - \psi(\mathbf{x}_j) + \delta)) \odot (\alpha(\mathbf{x}_j) + \delta)$$



 注意产生分支：利用减法关系计算向量注意力

 特征转换分支：将点特征映射到高维空间

$\mathcal{X}(i) \subseteq \mathcal{X}$ 是点的局部邻域，通过KNN算法得到，然而在GNN中，B样条数据天然包含了邻域信息，精确的邻域信息能够提升训练效率与精度。

GNN领域中的Point Transformer层可表示成如下形式：

$$x'_i = \sum_{j \in Neighbor(i) \cup \{i\}} \alpha_{i,j} (W_1 x_j + \delta_{i,j})$$

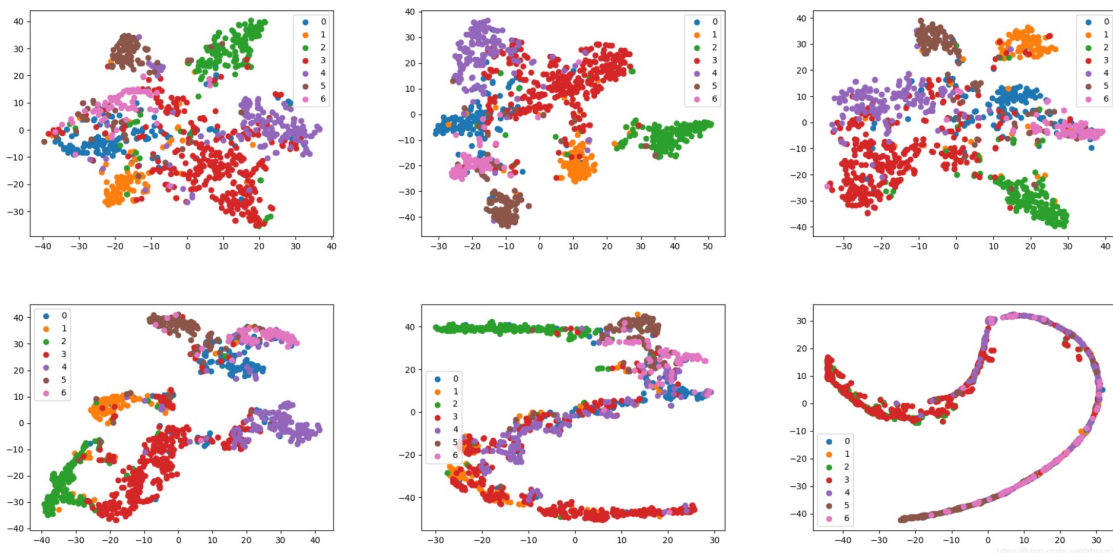
$$\alpha_{i,j} = softmax(\gamma_\theta(W_2 x_i - W_3 x_j + \delta_{i,j}))$$

$$\delta_{i,j} = h_\theta(pos_i - pos_j),$$

过平滑（**over-smoothing**）是GNN特有的现象，指的是在进行多次信息传递后，节点之间的特征逐渐趋于相似或一致，导致节点的区别性降低。

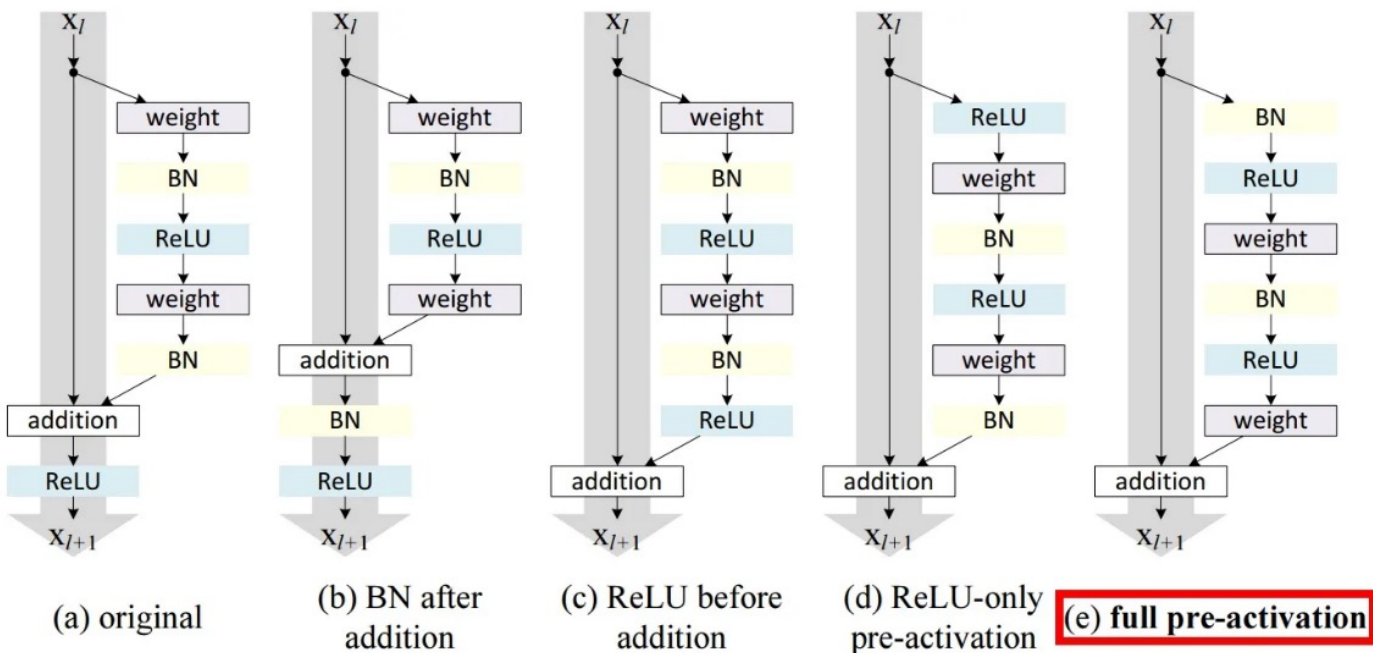
过平滑现象可能会导致以下问题：

- 1.信息丢失：当图神经网络过平滑时，节点之间的特征变得相似或一致，导致原始图中的重要信息被模糊或丢失。这可能导致难以区分不同节点或子图之间的差异。
- 2.高度连接的节点：在过平滑情况下，节点之间的特征变得相似，可能会导致高度连接的节点形成一个连续的块或子图，而与其他节点之间的连接较弱。这可能导致无法准确地对图结构进行建模。
- 3.节点分类或拟合性能下降：由于过平滑现象降低了节点之间的区分性，节点分类或者拟合任务的性能可能受到影响。模型可能无法准确地将具有相似特征的节点分类到正确的类别或拟合希望的数据。



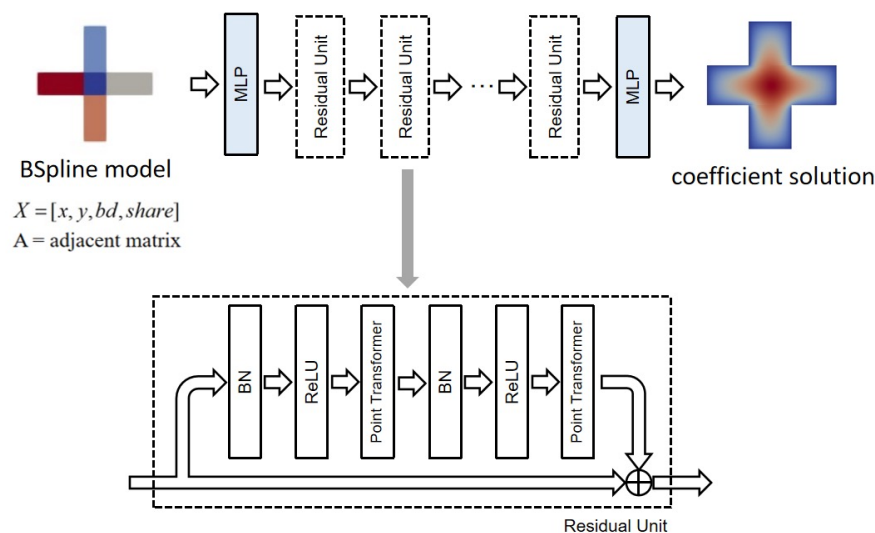
多层GNN使得节点分类能力下降，节点特征不具有区分度。

在图神经网络中引入残差连接机制，深层单元的特征可以由浅层单元的特征和残差函数相加得到，可以帮助信息在网络中更好地传播。这样可以减轻特征的过度平滑，并促进节点之间的信息流动。



通过移动各层位置，ResNetV2发现将激活函数（ReLU 和 BN）都移动到权值层（Conv）之前，形成一种预激活（pre-activation）能得到最好的效果。因为在这种情况下，保证前向传播和反向传播过程中的信息畅通无阻，真正实现了恒等映射。

IGA-Graph-Net的网络架构如下图所示，结合了ResNetV2的PointTransformer层构成了中间的残差单元，而输入部分和输出部分分别由一个MLP组成。网络的输入数据为制作数据集时提及的点的四维特征和邻接矩阵所组成。输出数据与IGA-Reuse-Net一样，为每个点的系数误差。



同时，我们引入新的适用于狄利克雷边界条件的损失函数用于训练

$$L_d = \frac{1}{s} \sum_{k=1}^s |\hat{u}_i - u_i|$$

此损失函数只计算非边界点的系数绝对误差，由于狄利克雷边界条件边界值固定，预测其值并没有必要。忽略边界对于效率和性能都有一定提升。

同时我们发现在GNN中，放弃综合数值解绝对误差的总损失函数，单纯计算系数绝对误差，在不影响预测精度的情况下提升了效率。

4.结果展示与未来展望

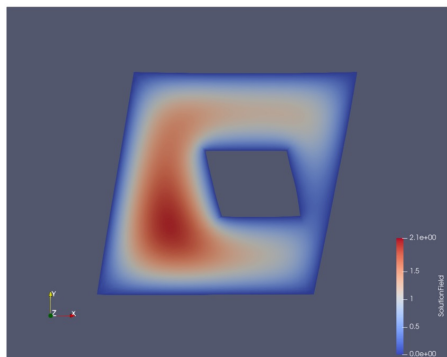
Dataset	Network Architecture	Absolute Error of Coefficients	Absolute Error of Solution	Relative Error of Solution(%)	Posterior Error
<i>hole</i> - <i>f</i> ₁	IGA-Reuse-Net	0.0148	0.0108	1.42	12.63
	IGA-Graph-Net	0.0082	0.0063	0.85	8.08
<i>flower</i> - <i>f</i> ₁	IGA-Reuse-Net	0.0144	0.0089	2.38	24.23
	IGA-Graph-Net	0.0079	0.0059	1.25	11.29
<i>human</i> - <i>f</i> ₁	IGA-Reuse-Net	0.0206	0.0095	7.05	37.34
	IGA-Graph-Net	0.0117	0.0059	3.28	22.73
<i>hole</i> - <i>f</i> ₂	IGA-Reuse-Net	0.0878	0.0594	3.63	91.70
	IGA-Graph-Net	0.0723	0.0588	2.94	66.15
<i>flower</i> - <i>f</i> ₂	IGA-Reuse-Net	0.0860	0.0553	10.95	143.4
	IGA-Graph-Net	0.0653	0.0525	10.04	72.30
<i>human</i> - <i>f</i> ₂	IGA-Reuse-Net	0.1250	0.0583	16.06	213.9
	IGA-Graph-Net	0.0727	0.0376	8.64	118.9

对于*hole*_f1, *flower*_f1, *human*_f1以及*human*_f2数据集, 基于GNN的IGA-Graph-Net都对于基于CNN的IGA-Reuse-Net表现出了巨大的优势, 对于预测误差有明显下降。

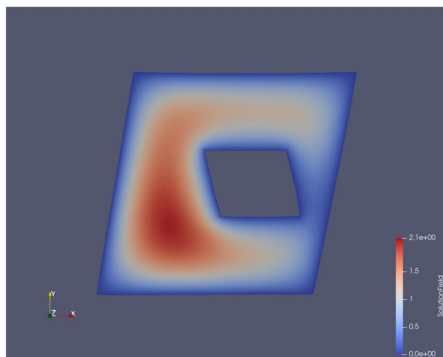
而对于*flower*_f2和*hole*_f2数据集, IGA-Graph-Net虽然预测误差仍低于IGA-Graph-Net, 但优势并不明显。推测由于1亏格模型和花朵模型细化了两次, 点分布较为密集, 加剧了过平滑现象, 再加上周期性泊松方程进一步提高了训练难度, 导致IGA-Graph-Net并未展现出更大的优势。

同时, 我们制作了两两者之间的可视化对比结果。

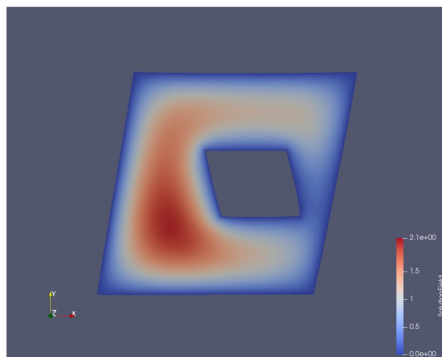
实际数值解



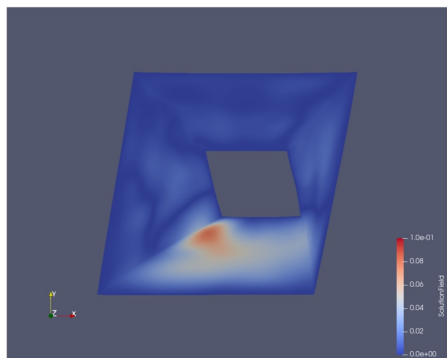
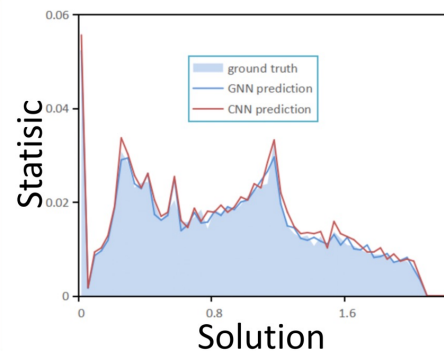
CNN预测解



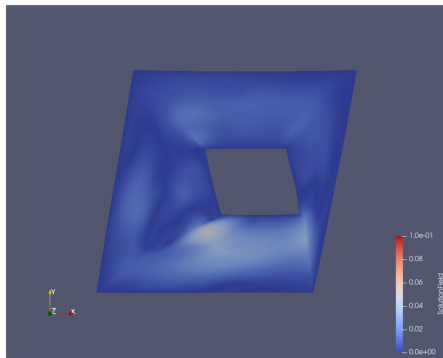
GNN预测解



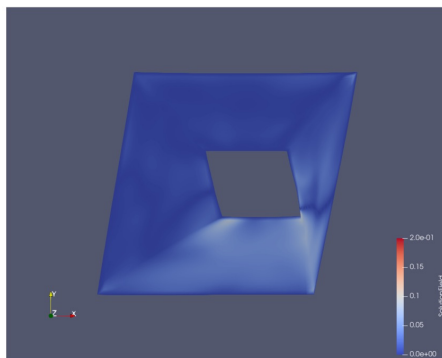
数值解分布



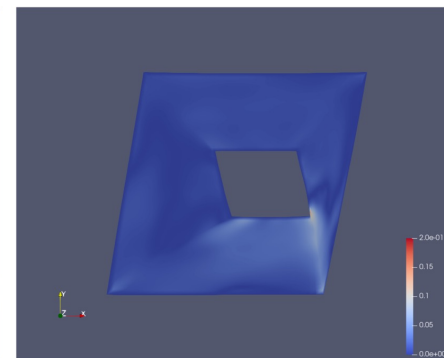
CNN数值解
绝对误差



GNN数值解
绝对误差

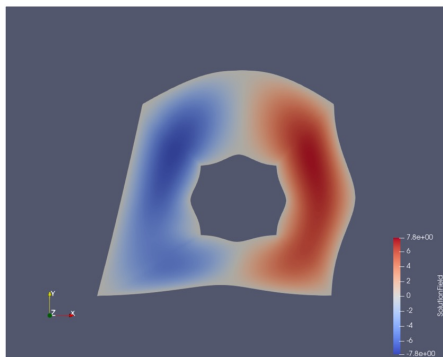


CNN数值解
相对误差

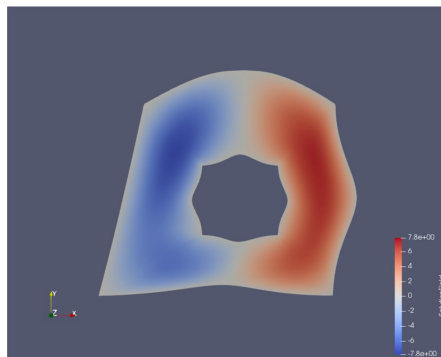


GNN数值解
相对误差

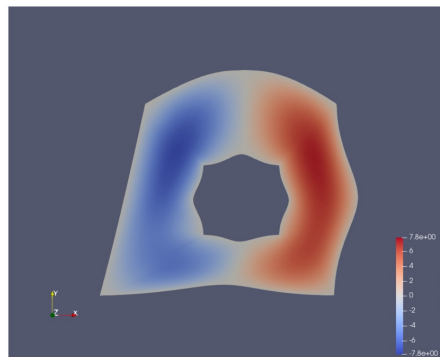
实际数值解



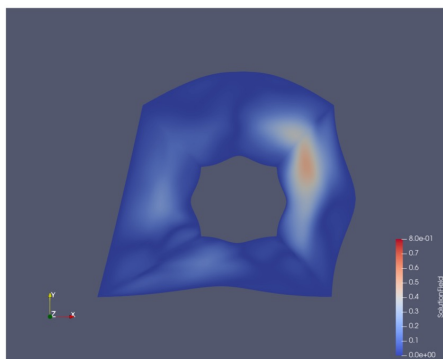
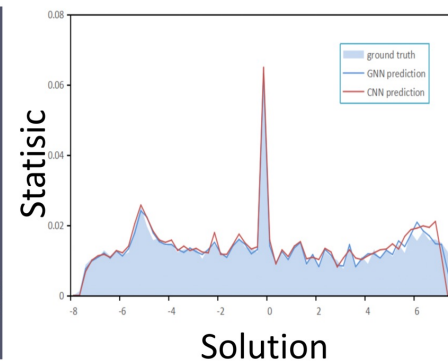
CNN预测解



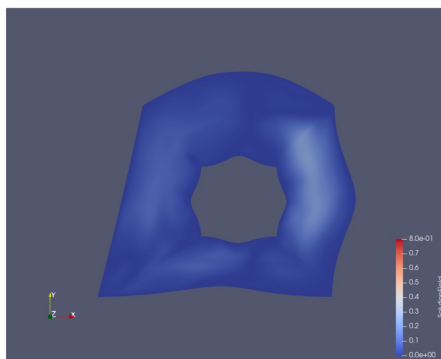
GNN预测解



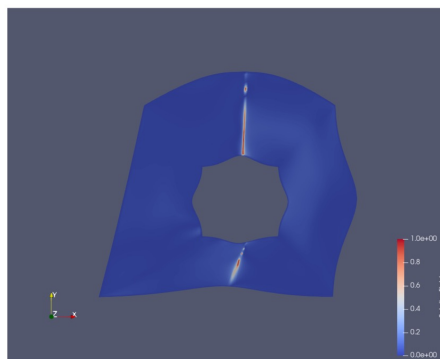
数值解分布



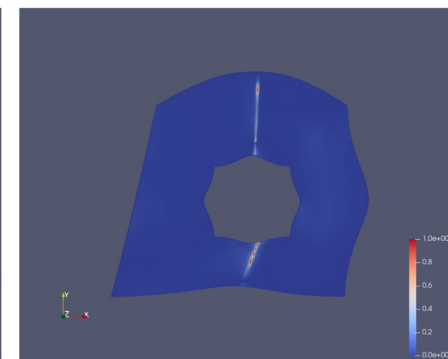
CNN数值解
绝对误差



GNN数值解
绝对误差

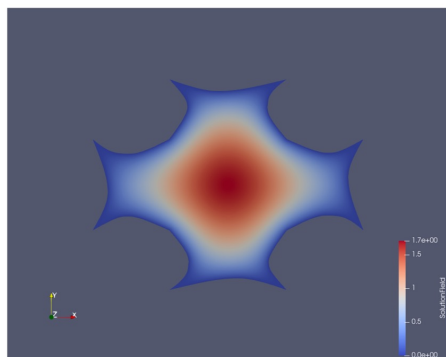


CNN数值解
相对误差

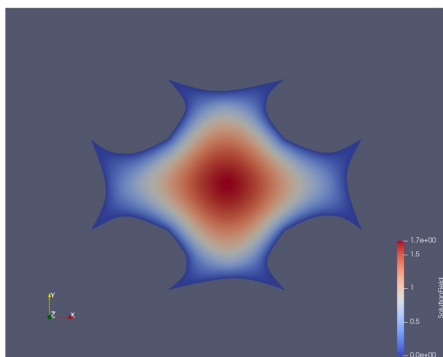


GNN数值解
相对误差

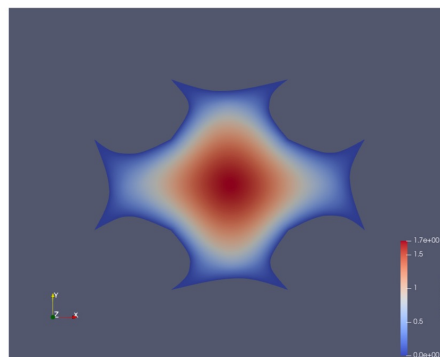
实际数值解



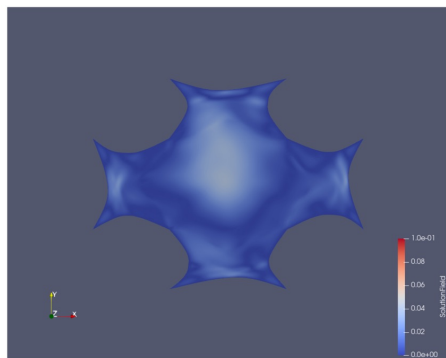
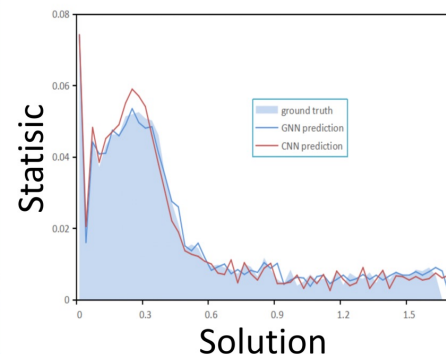
CNN预测解



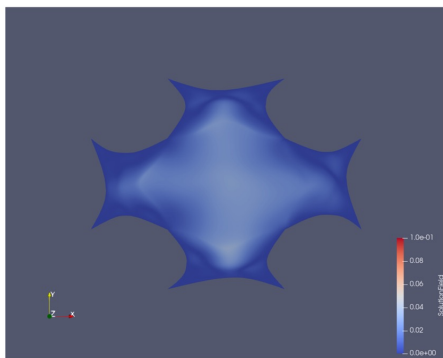
GNN预测解



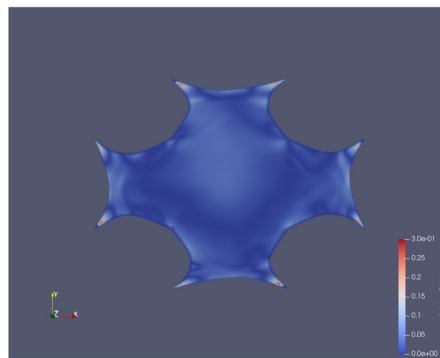
数值解分布



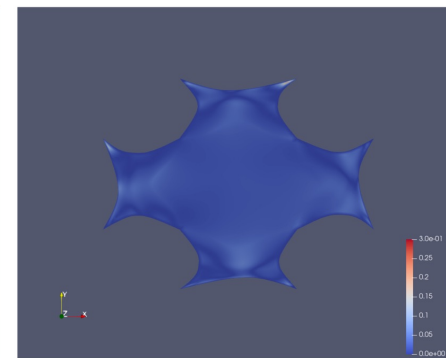
CNN数值解
绝对误差



GNN数值解
绝对误差



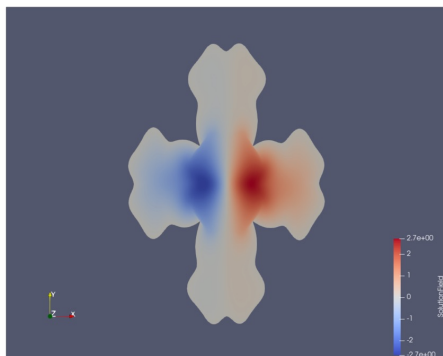
CNN数值解
相对误差



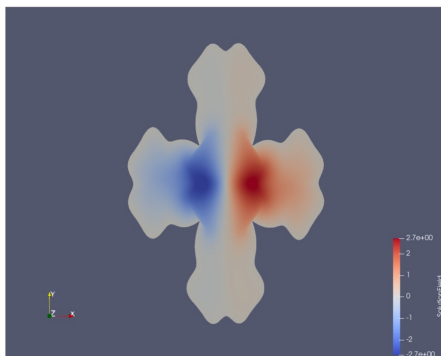
GNN数值解
相对误差

结果对比 (flower_f2)

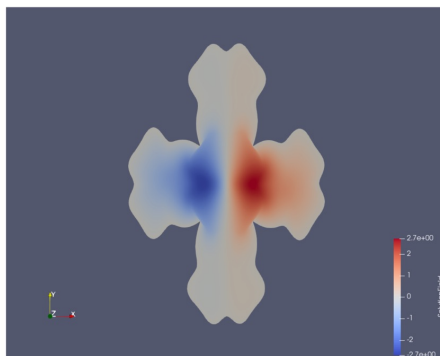
实际数值解



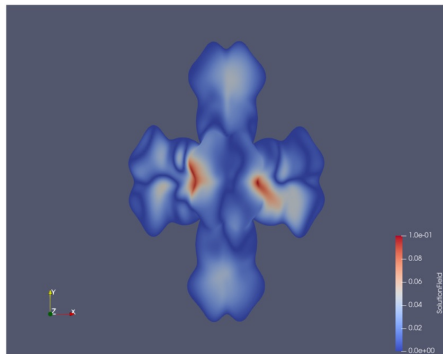
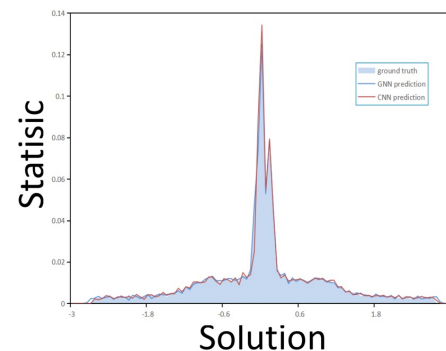
CNN预测解



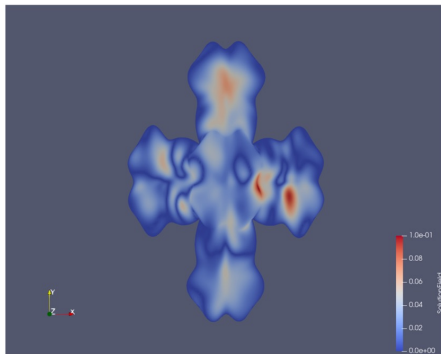
GNN预测解



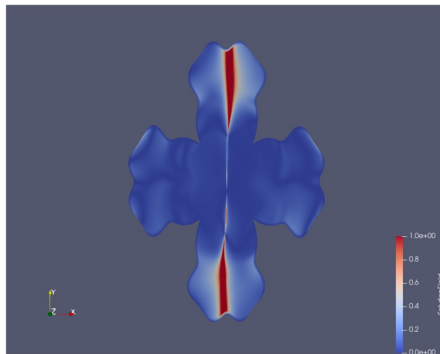
数值解分布



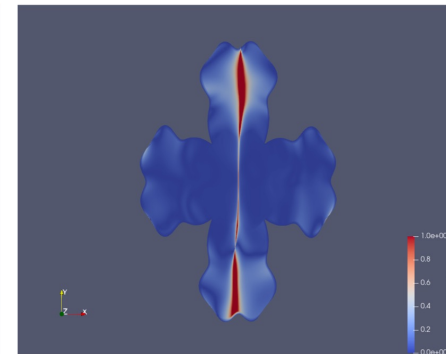
CNN数值解
绝对误差



GNN数值解
绝对误差

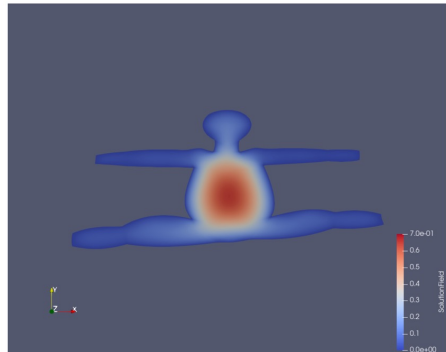


CNN数值解
相对误差

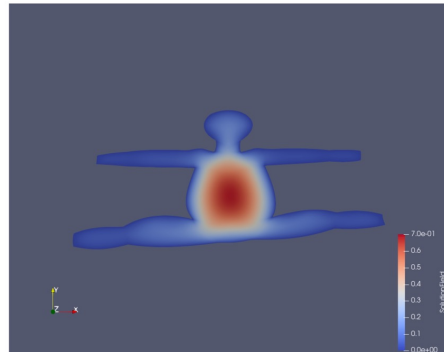


GNN数值解
相对误差

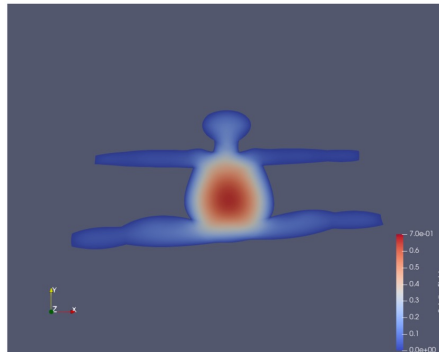
实际数值解



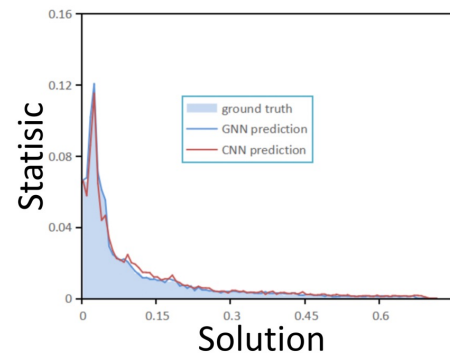
CNN预测解



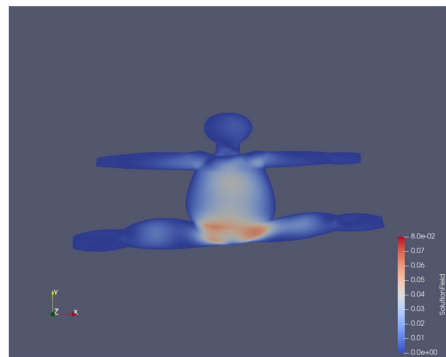
GNN预测解



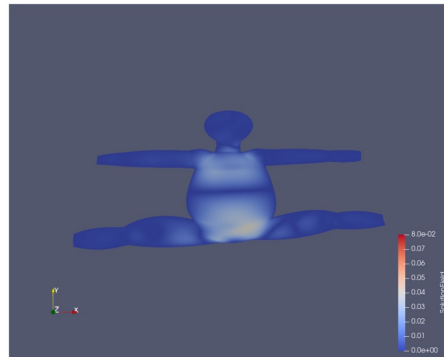
数值解分布



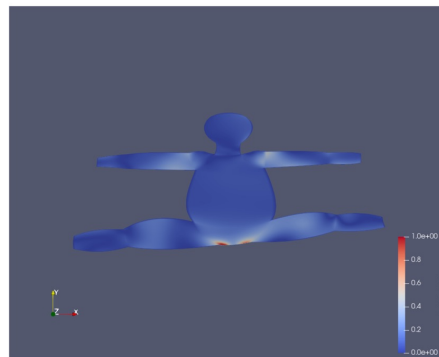
CNN数值解
绝对误差



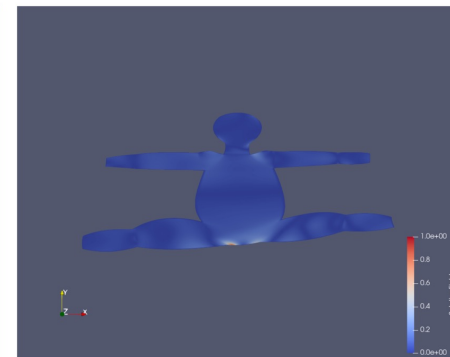
GNN数值解
绝对误差



CNN数值解
相对误差



GNN数值解
相对误差

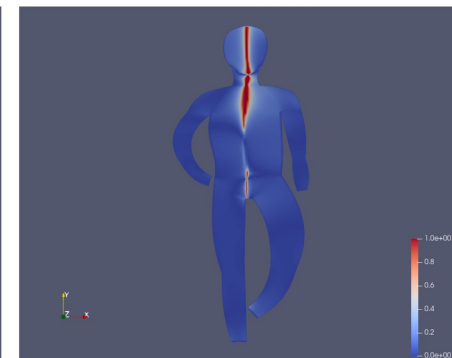
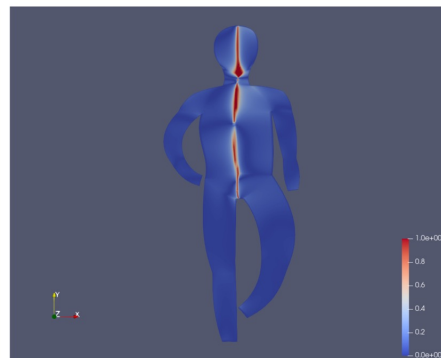
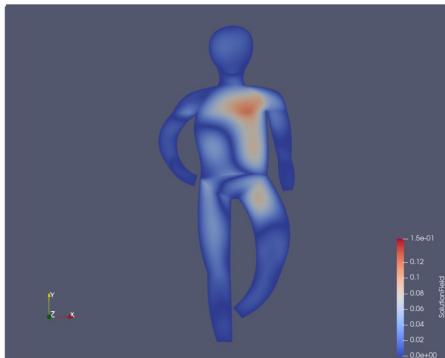
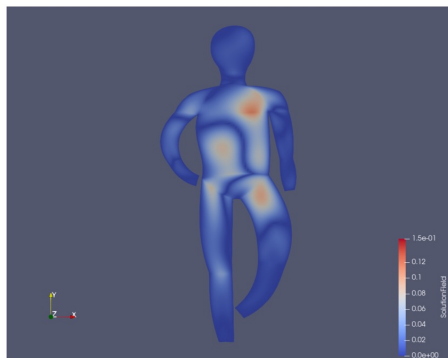
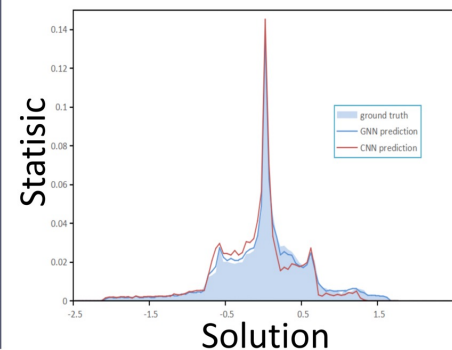
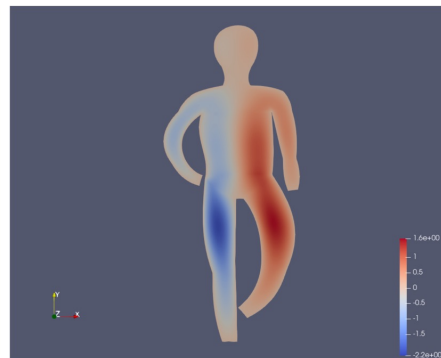
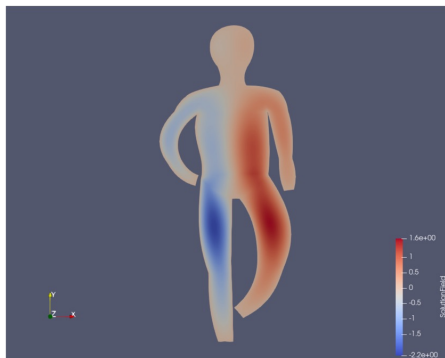
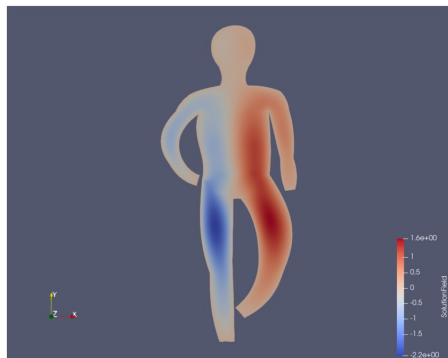


实际数值解

CNN预测解

GNN预测解

数值解分布



CNN数值解
绝对误差

GNN数值解
绝对误差

CNN数值解
相对误差

GNN数值解
相对误差

1. 改进网络结构，使其更适合于**PDE**求解任务。目前所用的网络架构主要从点云领域迁移过来，有很大的改进空间。
2. 扩充数据集类型（**PDE**类型，边界条件）
3. 目前求解的问题均基于二维问题，未来可把工作推广至三维问题。
4. 探索基于物理的无监督学习方法。目前以数据驱动的方式训练神经网络，需要提供几何模型数值解的系数作为标签数据。训练精度很依赖于数据集质量。

课程总结

- 【第一讲】CAE与等几何分析介绍
- 【第二讲】曲线曲面曲体建模基础
- 【第三讲】有限元分析与网格生成
- 【第四讲】等几何分析中的计算域参数化I
- 【第五讲】等几何分析中的计算域参数化II
- 【第六讲】基于等几何分析的Poisson 问题求解
- 【第七讲】基于等几何分析的线弹性问题求解及GIFT 方法
- 【第八讲】基于等几何分析的超弹性问题求解及等几何配点法
- 【第九讲】等几何形状优化
- 【第十讲】等几何拓扑优化
- 【第十一讲】基于体细分的等几何建模仿真优化一体化框架
- 【第十二讲】基于深度学习的等几何分析及课程总结

<https://www.bilibili.com/video/BV1dM4y117PS>

GAMES302-等几何分析 (更新中)

7210 12 2023-04-09 20:00:00 未经授权，禁止转载



智能可视建模与仿真实验室
Intelligent Visual Modeling & Simulation (iGame) Lab

第一讲 CAE与等几何分析简介

徐岗

杭州电子科技大学计算机学院
浙江省离散行业工业互联网重点实验室

Email : gxu@hdu.edu.cn

1人正在看, 已装填 8 条弹幕 请先答题 转正> 发送

GAMES-Webinar 发消息
计算机图形学与混合现实在线平台 (GAMES主...)

充电 + 关注 9.7万

弹幕列表

权力的游戏：凛冬将至》传奇史诗巨制
广告 权力的游戏

视频选集 (1/10)

自动连播

- | | |
|-----------------------------|---------|
| P1 1. CAE与等几何分析简介 | 1:37:50 |
| P2 2. 曲线曲面曲体的建模基础 | 1:29:25 |
| P3 3. 有限元分析与网格生成 | 1:25:56 |
| P4 4. 等几何分析中的计算域参数化 I | 1:24:31 |
| P5 5. 等几何分析中的计算域参数化 II | 1:17:18 |
| P6 6. 基于等几何分析的泊松问题求解 | 1:11:07 |
| P7 7. 基于等几何分析的线弹性问题求解及GI... | 1:21:16 |
| P8 8. 基于等几何分析的线弹性问题求解及等... | 1:13:05 |
| P9 9. 基于等几何分析的形状优化 | 1:09:55 |
| P10 10. 基于等几何分析的拓扑优化 | 1:25:58 |

巨头的财富密码 【科技内幕】互联网巨头们，凭啥赚钱到手软？

- 二维问题 → 三维问题
- 静态问题 → 动态问题
- 线性问题 → 非线性问题
- 单种材料 → 多种材料
- 宏观结构 → 微观结构
- 单场仿真 → 多场耦合
- 串行计算 → 并行计算
- 固化空间 → 灵活推广
- 传统求解 → AI 预测
- 理论研究 → 软件平台

- 适合等几何分析的最优样条模型
- 直接基于曲体的复杂模型造型方法
- 体细分在奇异点/奇异边处的连续性
- 三维结构化体参数化拓扑构造问题
- 带有裁剪曲面边界的体参数化方法
- 等几何在奇异点/奇异边处的收敛性
- 时变复杂流体问题等几何分析求解
- 超弹性材料非线性动力学问题求解
- 拓扑及形状优化问题的进一步扩展
- 三维复杂等几何分析工业软件开发

感谢大家的支持！

请大家多多宣传我们的教学资源！



智能可视建模与仿真实验室

Intelligent Visual Modeling & Simulation (iGame) Lab

Thank You !

Q & A