

# 2025 年第十五届 MathorCup 数学应用挑战赛

## A 题：汽车风阻预测

在空气动力学领域，空气阻力对汽车以及航空航天工业中载具的性能和效率有着至关重要的影响。以往的研究表明，预测这种阻力需要借助先进的工业仿真软件进行大规模流体力学模拟仿真，而该模拟过程不仅算法复杂，依赖工程经验和高性能计算集群，而且极为耗时，这极大地阻碍了设计的快速迭代开发以及实时气动性能优化。最近，深度学习技术，特别是 AI 技术的发展，为该问题的求解提供了新的解决方法。这一技术突破不仅对汽车和航空航天行业有影响，还在风能、建筑、船舶和无人机设计等领域展现出跨学科革命性的应用潜力。虽然人工智能技术为快速精确地预测风阻带来了范式转变，但现有的机器学习模型的泛化能力仍存在显著局限性。例如，当车辆几何形状发生变化时，模型对训练集分布外的几何特征缺乏鲁棒性，预测误差会急剧增大，无法保持稳定的预测精度。多数模型和竞赛未能系统地评估算法在任意几何拓扑和多模态数据集上的泛化性能。针对这一关键问题，本次竞赛提出了面向任意三维形状车辆的快速阻力预测挑战任务，旨在研究具有强泛化能力的深度学习模型。

本竞赛问题关注科学机器学习 (SciML) 的一个主要领域，称为算子学习范式[1]。算子学习的目标是发现或近似一个未知的算子  $\mathbf{A}$ ，该算子通常采取与微分方程相关的解算子的形式。具体的数学形式化定义见附录 A。

本竞赛任务的核心在于，构造恰当的神经网络结构，构造有效的损失函数，在尽可能低的时空间复杂度下，使算子在未见过的测试集样本上达到高精度，再在未见过的测试集样本上尽可能的泛化。

在上述方法的基础上考虑一个不可压缩的高雷诺的汽车风洞数湍流，纳威尔斯托克斯 (N-S) 控制方程可以被描述为：

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v}, \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

，其中 $\mathbf{v}$ 表示速度矢量， $p$ 表示压力标量， $\nu$ 表示粘性系数， $t$ 表示时间。仿真生成的高质量可信数据集由 K-Epsilon 湍流模型进行简化，在时间维度上取统计学平均。

例如，有一个包含三维车辆几何形状（雷诺数高达五百万）的标准空气动力学数据集。传统方法计算车辆表面压力（这是预测阻力的关键）大约需要 1000 秒。而深度学习通过在模拟数据上训练，能够找出设计参数（如形状、表面特征）与阻力的关系。训练好后，模型可以对 3 维物理场进行秒级预测，大大节省了计算资源。

ShapeNet[2]是一个大型的 3D CAD 模型库，由斯坦福大学、普林斯顿大学和芝加哥丰田技术研究所的研究人员开发。这个数据集包含了超过 300 万个模型，其中 22 万个模型被分类到 3135 个类别中。其中 3D ShapeNet Car 是 ShapeNet 数据集中一个专门的子集，它包含了 1256 辆不同类型汽车的 3D 模型，这些模型被用于各种计算机视觉和图形学研究任务，例如 3D 对象重建、语义分割和点云生成等。

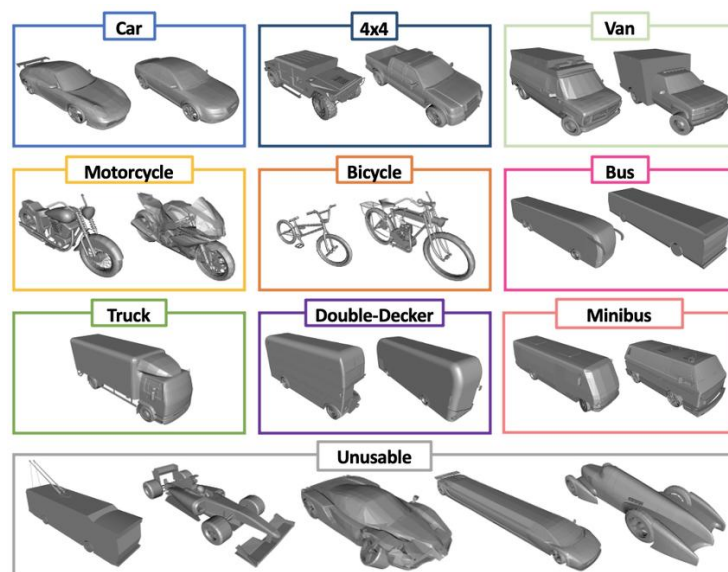


图 1 几何示意图

利用 3D ShapeNet Car 的简化模型，我们制作了一系列的车辆空气动力学模拟数据（这些数据可以用 Paraview 软件打开来查看）。在这些模拟中，车辆的速度都是每秒 20 米，雷诺数大概在 10 万到 100 万之间，我们总共模拟了 500 种不同形状的汽车数据。其中，450 种形状的汽车数据被用来训练我们的模型。

Car Pressure, the main source of car drag force

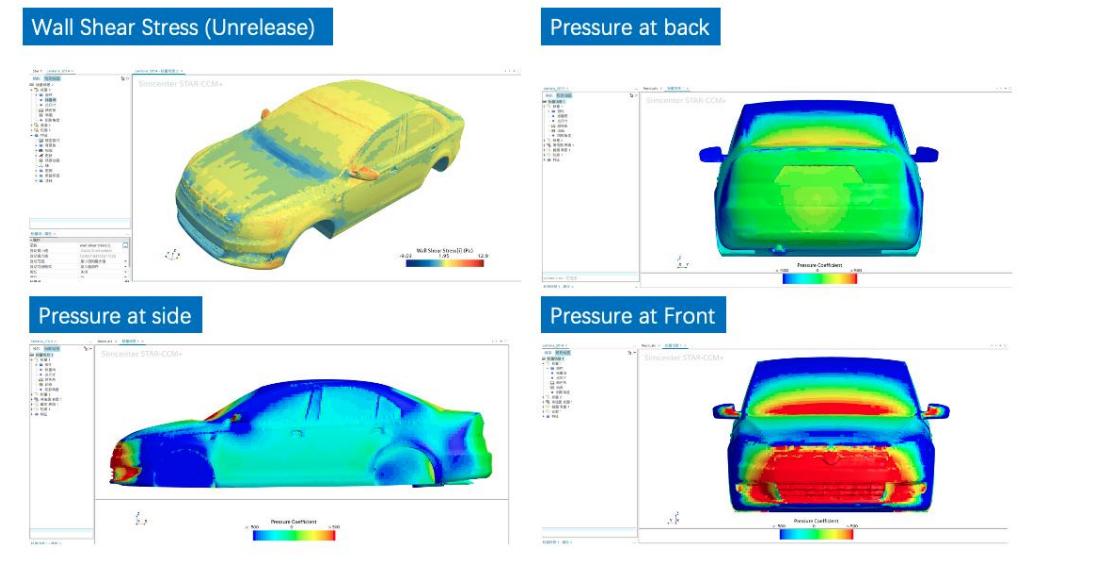


图 2 车辆仿真示意图

每个数据样本都包括了车辆表面的点的坐标，以及这些点上的压力情况。下面表格详细解释了这些数据的内容。

表 1 数据格式

变量名称	定义	形状
网格节点坐标	表示汽车表面的几何信息	节点个数, 3
网格单元坐标	表示汽车表面的几何信息	单元个数, 3
压力向量	表示汽车表面的物理信息	节点个数, 1
数据归一化信息	用于风阻压力、汽车坐标的归一化	-

请你们队基于上述算子神经网络预测方法，结合项目链接中给出的数据（两个链接数据相同，任选其一即可。星河社区项目链接：<https://aistudio.baidu.com/projectdetail/9021898>；代码仓库：

<https://gitee.com/Supob/MathorCup2025> )，从撰写一篇完整的科研论文的角度，来解答如下问题（其中 2-4 题是主干题，1、5 为附加题）：

**问题 1：**算子学习神经网络快速预测汽车风阻的本质是通过梯度优化方法优化目标损失，对神经网络的参数进行优化。假设需要优化的目标损失函数为：

$$g(\theta) = e^{\theta} - \log \theta$$

其中 $\theta$ 为学习参数，设初始参数值为 100，尝试求解使得目标函数最小的参数 $\theta$ 的值。（要求书面求解过程或者运行代码）

**问题 2：**对于给定的高雷诺数湍流下汽车风阻压力数据，简化汽车模型的几何表面进行数据读取和处理。从赛题提供的仿真文件中，一方面提取汽车表面的关键物理信息作为模型仿真数据标签，另一方面提取汽车的关键几何特征作为输入，使用飞桨深度学习框架对数据格式、数据类型进行合理的处理，构造数据加载器[4]实现多进程异步加载。通过在星河社区科学计算专区报名[5]阅读文献和获取算力进行实验，完成文献调研，作为论文摘要部分的参考。

**问题 3：**尝试构建算子神经网络，如 KAN（Kolmogorov-Arnold Network），Diffusion，Transformer，Fourier-Neural-Network, PINN（Physics Informed Neural Network）等等，基于深度学习的偏微分方程求解器，实现从输入几何信息到输出物理信息的快速预测，并使用飞桨完成论文实验代码编写。

- 报名飞桨共创计划活动领取 AI 芯片算力[5]
- 跑通 AIStudio baseline 示例项目，对模型进行修改
- 在星河社区跑通训练推理流程，完成评分榜单提交
- 在 MathorCup 官网完成论文及项目链接的提交

注：算力资源存在客观限制，为了确保各参赛队伍获得更加优质的服务和更好的体验，每支队伍仅限申请一个算力名额，请以参赛编

号（例：**MC25000006**）作为申请名称，同时会出现算力紧张无资源的情况，请同学们错峰训练，并及时寻找其他资源。

**问题 4：**通过自主创新实验，从数据和模型中分析当前算法的特性，主要包括计算模型的计算复杂度和占用的物理空间、计算模型的模型参数量和计算模型的显存占用（GB 为单位）。在全量非稀疏的测试数据上，达到压力场预测 L2 相对平均误差低于 0.4，Cd（阻力系数）误差小于 80 个 counts 的精度。

- 尝试在训练集数据上设置不同输入稀疏采样率(稀疏数据 10% 50% 100%)
- 尝试修改训练集数量(100, 200, 全量)
- 尝试修改神经网络超参数(比如层数，参数量，激活函数等)

根据上述实验在全量非稀疏测试数据集上的精度要求，完成论文实验描述并给出结论。

**问题 5：**尝试证明 Transformer 模型中的注意力机制是神经算子层的一个特例。

### 参考文献：

- [1] Lu L, Jin P, Pang G, et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators[J]. Nature machine intelligence, 2021, 3(3): 218-229.
- [2] Chang A X, Funkhouser T, Guibas L, et al. Shapenet: An information-rich 3d model repository[J]. arXiv preprint arXiv:1512.03012, 2015.
- [3] 陈凯,李佳琳,王朋波,等.基于几何信息神经算子的参数化汽车几何风阻预测模型[C]//中国汽车工程学会汽车空气动力学分会.2024 中国汽车工程学会汽车空气动力学分会学术年会论文集.百度公司;北京汽车研究总院;清华大学自动化系;;2024:2-11.DOI:10.26914/c.cnkihy.2024.023235.
- [4][https://www.paddlepaddle.org.cn/documentation/docs/zh/api/paddle/io/DataLoader\\_cn.html#dataloader](https://www.paddlepaddle.org.cn/documentation/docs/zh/api/paddle/io/DataLoader_cn.html#dataloader)

[5]<https://aistudio.baidu.com/activitydetail/1502019365?shared=1&sharedUserId=3010718>

[6] Li Z, Kovachki N, Azizzadenesheli K, et al. Fourier neural operator for parametric partial differential equations[J]. arXiv preprint arXiv:2010.08895, 2020.

## 附录 A

在数学形式上，问题可以定义如下：给定数据对  $(f, u)$ ，目标是寻找一个非线性的算子  $A: U \rightarrow V$ ，使得  $A(f) = u$ ，或者寻找  $A$  的一个近似，记为  $\hat{A}$ ，使得对于任何新的输入数据  $f' \in U$ ，我们有  $\hat{A}(f') \approx A(f')$ ，该近似需在训练数据和未见测试数据上具有一致收敛性，从而展示出良好的泛化能力，其中  $f \in U$ ， $u \in V$ ，其中  $U$  和  $V$  是用于定义有界函数的巴纳赫空间，它们是有限  $d$  维实数空间域  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  上的函数子空间。

对于  $\hat{A}$ ，假设我们观测到  $N$  组 i.i.d 的但带有不均匀的噪声和仿真离散误差的函数样本数据  $\{f^{(i)}, u^{(i)}\}_{i=1}^N$  并用其作为训练数据，其中  $f^{(i)} \sim \mu$ ， $\mu$  为以  $U$  为支撑的，且  $u^{(i)}$  是要拟合的非线性算子  $A$  下的前推。根据逼近定理，假设现有一组可学习的参数  $\theta \in \mathbb{R}^K$  的神经网络  $\hat{A}$ ，通过合理的构造损失函数  $L$ ，可以拟合  $A$ ，定义优化任务目标为：

$$\arg \min_{\theta \in \mathbb{R}^K} \sum L(\hat{A}(f^{(i)}; \theta), u^{(i)})$$