arXiv:2302.12100v1 [cs.CE] 23 Feb 2023

无参数形状优化：面向工程应用的各种形状更新

P投稿至*CMAME*

Lars Radtke船舶结构设计与分析研究所（M-10）船舶技术应用数值结构分析 汉堡工业大学 汉堡，21073lars.radtke@tuhh.de

Georgios Bletsos 流体研究所 船舶理论（M-8）汉堡工业大学，汉堡，21073 george.bletsos@tuhh.de

Niklas K¨uhl 流体力学与船舶理论研究所（M-8）汉堡工业大学，汉堡，21073 kuehl@hsva.de

Tim Suchan 汉堡赫尔穆特·施密特大学机械与土木工程学院，22008 suchan@hsu-hh.de

Thomas Rung 汉堡工业大学流体动力学与船舶理论研究所（M-8），汉堡，21073 thomas.rung@tuhh.de

Alexander D¨uster 汉堡工业大学船舶结构设计与分析研究所（M-10），船舶技术应用中的数值结构分析，汉堡，21073 alexander.duester@tuhh.de

Kathrin Welker 数值数学与优化研究所 弗赖贝格工业大学¨ 弗赖贝格矿业学院 弗赖贝格，09599 kathrin.welker@math.tu-freiberg.de

2023年2月24日

摘要

在过去十年中，面向形状优化问题的无参数方法已经发展成熟，能够为复杂的工程应用提供一种灵活的工具。然而，在此背景下通过形状导数获得的灵敏度分布，无法直接用作基于梯度的优化策略中的形状更新。相反，必须求解一个辅助问题，才能从灵敏度获得梯度。尽管人们已从数学角度研究了这些辅助问题的多种选择，但其推导背后概念的复杂性往往阻碍了它们在工程中的应用。本文旨在从工程视角解释几种根据灵敏度计算形状更新的方法。我们以形式化的方式介绍相应的辅助问题，并通过数值算例比较不同选择。为此，我们考虑了一个测试案例以及计算流体动力学中的示例应用。

关键词 形状优化 · 形状梯度 · 最速下降法 · 连续伴随方法 · 计算流体力学

1 引言

形状优化是一个具有广泛应用和多种方法的领域。我们重点关注旨在求解受偏微分方程（PDE）约束的优化问题的优化方法。这类问题例如出现在流体力学等诸多工程领域中 [90, 71, 60], 结构力学 [3, 94] 和声学 [79, 43]。

为了以计算方式求解优化问题中的偏微分方程约束，需要对所研究的区域进行离散化，即需要一个计算网格。本文特别关注边界拟合网格及其方法，其中形状更新通过网格更新来实现。在边界拟合网格的背景下，形状优化问题的求解方法大致可分为参数化方法和无参数方法。所谓参数化方法，是指采用预先规定的几何形状有限维描述的方法，该描述属于推导适当形状更新过程的一部分，参见例如 [72]。所谓无参数方法，是指在连续层面独立于参数化进行推导的方法。当然，在应用场景中，无参数方法最终也需要使用求解偏微分方程所需的网格对形状进行离散化。

一般而言，偏微分方程约束问题的优化方法旨在最小化（或最大化）依赖于偏微分方程解（也称为状态）的目标泛函，例如弹性结构的柔度 [3] 或黏性流动中的耗散功率 [71]。由于最大化问题可以通过考虑负的目标泛函转化为最小化问题，因此本文仅考虑最小化问题。 [38]对相关内容进行了深入介绍。本文关注生成形状更新的迭代方法，使目标泛函得以降低。为了确定适当的形状更新，需要利用目标泛函的所谓形状导数。当设计变量的数量较多时，通常采用伴随方法计算形状导数。对于无参数形状优化方法而言，尤其如此，因为其中的形状没有通过样条等方式进行显式参数化；在最终离散化后，设计变量的数量通常对应于用于求解约束偏微分方程的网格中的节点数。在这种情形下，伴随方法具有优势，因为其获得形状导数的计算成本与设计变量的数量无关。只需额外推导并求解一个问题，即伴随问题，即可获得形状导数。关于伴随方法的一般介绍，请参见 [25, 32]。在连续伴随方法中，形状导数通常表示为在设计边界（即形状）上的积分表达式，并产生边界上的标量分布，即灵敏度分布，该分布用伴随问题的解表示。作为连续伴随方法的替代方法，可以采用离散伴随方法。它直接提供离散点（通常是计算网格的节点）处的灵敏度。 [31]总结了连续伴随方法和离散伴随方法。

尤其是在结合连续伴随方法时，通常不会直接将推导出的灵敏度表达式用作优化循环中的形状更新。相反，灵敏度通常会被平滑或滤波 [16]。本文的重点之一是解释如何通过若干方法实现这一点，使其能够直接应用于工程应用场景。为此，我们关注的是诸如如何应用一种方法？以及其优势和代价是什么？等问题，而不是如何推导出这类方法？

不过，我们希望指出，大量文献都涉及形状优化的数学基础。若想深入了解，可以参考 [20, 89]等标准教材。近来， [2] 对当前最先进的概念进行了深入综述，其中包含许多参考文献。我们将索伯列夫梯度纳入研究，这一概念已经十分成熟，并被许多研究用于根据形状导数获得所谓的下降方向（该方向会引起形状更新），参见例如面向工程研究的[48, 15] 和面向数学研究的 [82, 98, 99]。我们还考察了近期发展起来的方法，例如 [81] 提出、并在 [83, 99] 中进一步研究的Steklov-Poincar´e方法，以及 [19] 提出、并在 [69]中进一步研究的 p-调和下降方法。此外，我们还将 [91, 16]中使用的离散滤波方法纳入研究。

所考虑的形状更新必须具备良好的网格畸变表现。在优化算法运行过程中，网格必须多次更新，其中也包括区域内部节点的位置。网格质量下降，尤其是在某个方向上采取较大步长时，是一个亟待解决的严重问题，已有多项研究探讨这一问题，参见例如 [70, 91] ；这也是本研究关注的重点。本文通过一个说明性示例和一个计算流体力学（CFD）应用，对不同方法进行比较和探究。不过，我们不会详细讨论相应伴随问题的推导，也不会详述原问题和伴随问题的数值解，而是参考该主题的现有文献，参见例如 [68, 71, 37, 78, 90, 96, 97]。本文将重点考察不同方法的性能，即如何根据给定的灵敏度计算出合适的形状更新。

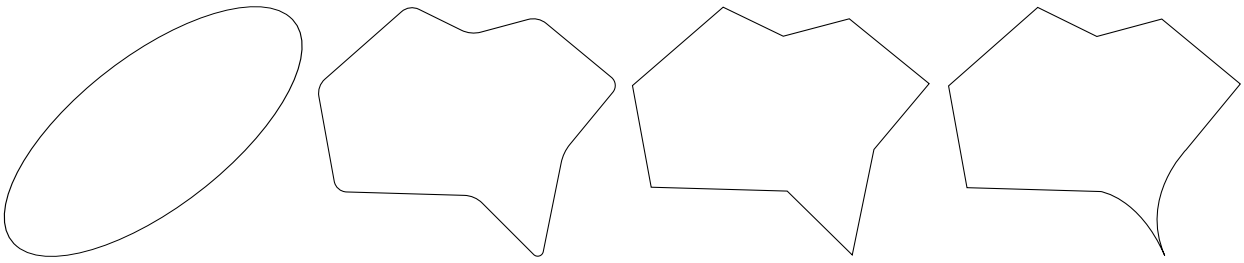


图1： $\mathbb{R}^2$ 中不同光滑性类别的形状示意图。a）无限光滑（C^∞）。b）连续可微（C^1）。c）利普希茨连续且 C^0。d）非利普希茨连续但 C^0。

本文其余部分安排如下。在第2节，我们从数学角度阐述形状优化方法，并简要介绍这些方法背后的数学概念。这包括介绍形状空间的概念，以及定义切空间上的度量，从而导出众所周知的希尔伯特方法或索伯列夫梯度。随后，我们在第3 节应用这些概念，构造能够降低目标泛函的形状更新。在第4节，我们通过一个不受偏微分方程约束的说明性示例，应用各种方法来获得形状更新，以展示这些方法的不同特性，例如网格细化时的收敛行为。在第 5 节，我们研究一个偏微分方程约束优化问题。具体而言，我们最小化二维障碍物周围以及三维管道内层流的能量耗散。我们探究并比较用于计算形状更新的不同方法，考察其适用性（即能否获得良好的网格质量）和效率（即能否快速收敛）。

2 形状空间、度量和梯度

本节重点介绍无参数形状优化背后的数学基础，旨在引入第3节所需的术语和定义；第3节更侧重于直接应用。不过，我们将在多处回顾数学部分，因为如果缺乏数学基础，第3 节中的一些信息可能难以理解。总的来说，我们遵循 [21, 1], 中的解释；如需进一步阅读，我们也推荐该文献。对于形状优化的应用，我们推荐 [74, 98, 2]。

2.1 形状的定义

为了对梯度下降算法进行理论研究，我们首先需要定义何谓形状。可供选择的定义有多种，例如使用地标向量 [18, 36, 44, 73, 88], 平面曲线 [65, 66, 64, 67] 或高维空间中的曲面 [9, 10, 45, 54, 63] 物体的边界轮廓 [27, 59, 75], 多相对象 [100],可测集的特征函数 [103] 以及图像形态 [22]。在二维情形下，我们将形状定义为嵌入周围二维空间（即所谓的 整体域 $D \subset \mathbb{R}^2$ ）中的平面曲线； [29], 对于三维模型，我们则使用嵌入周围三维空间中的二维曲面 $D \subset \mathbb{R}^3$。此外，我们还需要定义利普希茨形状：它是嵌入 $\mathbb{R}^2$ 或嵌入其中的曲面 $\mathbb{R}^3$，且可由利普希茨连续函数（的图像）描述。我们进一步将利普希茨域定义为以利普希茨形状为边界的区域。二维形状的光滑性概念示意见图 1。

2.2 形状空间的概念

定义形状空间，即所有可能形状构成的空间，是研究形状优化理论所必需的。由于我们关注梯度下降算法，使用这些算法的前提是梯度的存在。在欧几里得空间中，梯度可以轻易计算（例如 $\mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$）；然而，形状空间通常不具有向量空间结构。确定形状空间继承了何种结构通常是一项颇具挑战的任务，因此超出了本文的讨论范围；不过，形状空间通常不具有向量空间结构。接下来最好的选择是设法构建具有相应黎曼度量的流形结构，即所谓的黎曼流形。

一个鳍有限维流形是一个拓扑空间，并且还满足以下三个条件。

1. 它在局部可以用欧几里得空间来描述。2. 它可以完全由可数多个子集来描述（第二可数性公理）。3. 空间中的不同点有不同的邻域（豪斯多夫空间）。

如果这些子集（所谓的图册）彼此相容，即图册之间存在可微过渡映射，那么该流形就是可微流形，并且可以定义切空间和方向，这对于形状优化领域的进一步分析至关重要。流形上一点处的切空间是与流形相切的空间，描述了该点可能移动的所有方向。它与流形具有相同的维数。如果图册之间的过渡映射是无穷光滑的，那么我们称该流形为光滑流形。
将有限维流形的前述定义扩展到无限维，同时去除第二可数性公理和豪斯多夫条件，即可得到无限维流形。关于无限维流形相关概念的简要介绍和概述见 [98,第 2 节。3] 以及其中的参考文献。

如果无法为所讨论的形状空间建立流形结构，另一种选择是采用微分空间结构。这些结构是对流形的推广，即前面提到的任何流形同时也是一个微分空间。在这里，用于完全参数化该空间的子集称为图。正如 [41]，所解释的，这些图不一定必须与底层微分空间具有相同的维数，并且图之间的映射也不一定必须是可逆的。与作为黎曼流形的形状空间相比，将微分空间作为形状空间的研究才刚刚起步，例如参见 [34, 99]。因此，在下面的章节中，我们将首先聚焦于黎曼流形，然后简要讨论微分空间。

2.3 形状空间上的度量

为了定义形状空间上的距离和角度，需要在形状空间上定义度量。迭代点（在我们的设定中即形状）之间的距离必不可少，例如，可用于说明收敛性质或制定优化算法的适当停止准则。对于流形 M 上的所有点 m，黎曼度量会在每个 $m \in M$ 处的切空间 $T_m(M)$ 上定义一个正定内积 $g_m(\cdot,\cdot)$。[1] 这样便得到一族内积，使得流形上的任意一点都有可用的正定内积。此外，它还会在 m 处定义切空间上的范数，即 $\|\cdot\|_{g_m} = \sqrt{g_m}(\cdot,\cdot)$。如果存在这样的黎曼度量，我们就称该可微流形为黎曼流形，通常记作 (M, g)。

形状空间上的度量可分为不同类型，例如内在度量 [9, 10, 66]、外度量 [11, 17, 33, 44,66]、变形度量 [40, 93]、用于概率测度的 Wasserstein 或 Monge-Kantorovic 度量 [4, 12, 13]、Weil-Peterson 度量 [55, 85]、流度量 [23, 24, 95]，以及基于弹性变形的度量 [27, 76]。
除黎曼度量外，我们还需要定义距离，以获得经典意义上的度量。按照 [1, 74, 98]，为了得到流形上距离的表达式，我们首先使用黎曼度量 $g_m(\cdot,\cdot)$ 定义流形上从 m 出发的可微曲线 γ 的长度：

$$L(\gamma) = \int_0^1 \sqrt{g_m(\dot\gamma(t), \dot\gamma(t))}\,\mathrm{d}t \tag{1}$$

然后将距离函数 $d(m_1, m_2)$ 定义为所有从 m_1 出发并在 m_2 终止的曲线长度的下确界，即：

$$d(m_1, m_2) = \inf_\gamma L(\gamma), \quad \text{with } \gamma(0) = m_1 \text{ and } \gamma(1) = m_2. \tag{2}$$

这个距离函数称为黎曼距离 或测地距离，因为所谓的测地线 描述了流形上两点之间的最短距离。关于测地线的更多细节，请参阅 [57]。
如果能够求得测地线，那么从切空间到流形的局部映射便已可得：即所谓的指数映射。然而，求解指数映射需要解一个二阶常微分方程。使用数值方案求解往往代价过高，或精度不足。指数映射是一种特定的回缩（例如参见 [1, 74, 98]），但也可以使用其他回缩，将切空间中的元素局部映射回流形。回缩是从 $T_m(M) \to M$ 到流形的映射，满足以下两个条件。

1. m 处切空间的零元素映射到其自身，即 $\mathcal{R}_m(0) = m$。

[1] 如果内积不是正定的，但至少是非退化的（如 [56, 定义 86], 中所定义），那么我们称该度量为伪黎曼度量。

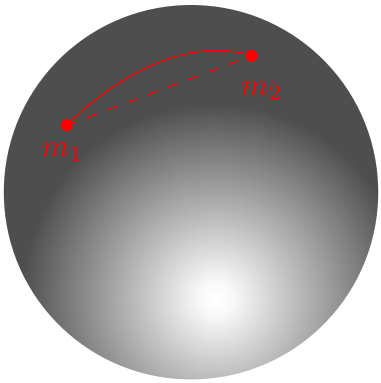


图 2：球面（一个流形）上两点的示意图：两点由穿过球面（离开流形）的直线和球面上的曲线连接。

2. 从 m 出发的曲线 $\gamma: t \mapsto \mathcal{R}_m(t\,\xi)$ 的切向量 $\dot{\gamma}(t)$ 满足 $\dot{\gamma}(0) = \xi$。形象地说，这意味着沿曲线 γ 移动，就是在方向 $\boldsymbol{\xi}$ 上移动，同时受到流形 M的约束。

示例 为了说明前面所述的观点，我们想介绍一个相对简单的例子。假设有一个没有内部的球面（一个二维曲面），嵌入在 $\mathbb{R}^3$ 中，如图 2所示。这个球面表示一个流形 M。此外，取球面上的任意两点 m_1 和 m_2 。这两点之间、同时保持在球面上的最短距离并不容易计算。如果利用该球面嵌入在 $\mathbb{R}^3$ 这一点，那么可以通过两个点的位置向量之差计算它们之间的最短距离，如图中的红色虚线所示。然而，这条路径并未沿着球面，而是穿过球面。根据上述概念，流形上两点之间的最短距离由测地线给出，图中以红色实线表示。同样，沿地球表面求最短距离也面临相同的问题。显然，不能采用穿过地球的直线路径。在点 m_1 附近的局部区域内，只需沿切空间 $T_{m_1}(M)$ 在点 m_1 处移动，再利用指数映射投影回流形，即可计算到点 m_2的最短距离。然而，对于较远的距离，这种近似可能不再有效。

将前述概念应用于无限维流形时，会遇到若干困难。如 [30], 所述，大多数黎曼度量都只是弱度量，即缺少切空间与余切空间之间可逆的映射，而内积需要这种映射。[2] 此外，测地线可能不存在或不唯一；无限维流形中两个不同单元之间的距离也可能为 0（即所谓的测地距离消失现象）。因此，尽管一族内积在有限维可微流形上构成黎曼度量，却未必能在无限维流形上构成黎曼度量。由于这些挑战，将无限维流形用作形状空间仍是一个持续研究的课题。

针对微分学空间的度量，相关研究较少。不过，大多数概念都可以迁移应用；在 [34] 中，为微分学空间定义了黎曼度量，从而得到黎曼微分空间。此外，在假设存在黎曼度量的前提下，还定义了微分学空间上的黎曼梯度和最速下降法。若要在工程领域中应用微分学空间，还需要对此开展进一步研究。

2.4 黎曼形状梯度

前面的章节较为笼统，旨在解释流形以及流形上的度量这一概念。现在，我们将具体关注基于黎曼流形的形状优化。根据 [98], , 我们引入一个依赖于形状[3] $\Gamma \in M$的目标泛函，其中 M 表示形状空间，在本例中为黎曼流形。在形状优化中，它通常也被称为形状泛函，记作 $J\colon\ M \to \mathbb{R},\ \Gamma \mapsto J(\Gamma)$。此外，我们将形状 Γ 的扰动记为 $\Gamma_t = F_t(\Gamma) = \{F_t(\boldsymbol{x})\colon\ \boldsymbol{x} \in \Gamma\}$ ，其中 $t \geq 0$。这两种

[2]我们不再对这一问题作进一步讨论；感兴趣的读者可参阅 [8] ，了解更多相关信息。[3]我们交替使用两种形状描述方式：将形状视为流形中的一个元素，以及将其视为整体域中的一个 $d-1$ 维子集。$D \subset \mathbb{R}^d$

算法1最速（梯度）下降算法
在黎曼流形 $(M,\ g)$ 上

要求： 形状泛函 J、初始值 $\Gamma^0 \in M$，
$\epsilon > 0$，在 $(M,\ g)$ 上的回缩 $\mathcal{R}$

1: **针对** $i = 0, 1, \ldots$ **执行**
2: 计算 $J(\Gamma^i)$
3: 计算形状梯度 $\nabla J(\Gamma^i)$，由

$$g_{\Gamma^i}(\nabla J(\Gamma^i)\ \boldsymbol{v}^\Gamma) = (J_*)_{\Gamma^i}(\boldsymbol{v}^\Gamma) \qquad \forall \boldsymbol{v}^\Gamma \in T_{\Gamma^i}(M)$$

4: 计算 $\|\nabla J(\Gamma^i)\|_{g_{\Gamma^i}}$
5: **如果** $\|\nabla J(\Gamma^i)\|_{g_{\Gamma^i}} \leq \epsilon$ **则**
6: **跳出**
7: **结束如果**
8: 计算方向 $\boldsymbol{\theta}^i = -\dfrac{\nabla J_{(\Gamma^i)}}{\|\nabla J(\Gamma^i)\|_{g_{\Gamma^i}}}$
9: 确定步长 α^i
10: 设置 $\Gamma^{i+1} = \mathcal{R}_{\Gamma^i}(\alpha^i\, \boldsymbol{\theta}^i)$
11: **结束循环**

算法 2 最速（梯度）下降算法
在欧几里得空间中（$\mathbb{R}^d, \|\cdot\|_2$）

要求： 可微函数 J，
初始值 $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^d, \epsilon > 0$

1: **为** $i = 0, 1, \ldots$ **执行**
2: 计算 $J(\boldsymbol{x}^i)$
3: 从以下内容计算梯度 $\nabla J(\boldsymbol{x}^i)$

$$\nabla J(\boldsymbol{x}^i) = \left.\frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{x}}\right|_{\boldsymbol{x}^i}$$

4: 计算 $\|\nabla J(\boldsymbol{x}^i)\|_2$
5: **如果** $\|\nabla J(\boldsymbol{x}^i)\|_2 \leq \epsilon$ **则**
6: **中断**
7: **结束如果**
8: 计算方向 $\boldsymbol{\theta}^i = -\dfrac{\nabla J_{(\boldsymbol{x}^i)}}{\|\nabla J(\boldsymbol{x}^i)\|_2}$
9: 确定步长 α^i
10: 集合 $\boldsymbol{x}^{i+1} = \boldsymbol{x}^i + \alpha^i\, \boldsymbol{\theta}^i$
11: **结束循环**

最常见的 F_t 方法是速度法和恒等扰动。速度法或速率法要求求解一个初值问题，如 [89], 中所述；而恒等扰动定义为 $F_t(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} + t\, \boldsymbol{v}^\Gamma(\boldsymbol{x}),\ \ \boldsymbol{x} \in \Gamma$，其中是一个足够光滑的向量场，$\Gamma$位于 Γ上。本文将重点研究恒等扰动。重复第2.1 节的内容，在这里，形状被描述为二维周围空间中的平面曲线，或三维周围空间中的曲面，这意味着它们始终嵌入在整体域中 D。
为了最小化形状泛函，即 最小值$_{\Gamma \in M}\, J(\Gamma)$，我们关注基于梯度进行优化。一般而言，梯度的概念可以推广到黎曼（形状）流形，但标准梯度下降法与黎曼流形上的梯度下降法之间存在一些差异。为了比较，我们分别在 $\mathbb{R}^d,\ \ d \in \mathbb{N}$ 以及黎曼流形上展示梯度下降法，见算法 2 和 1，下文将介绍所需的单元。

在欧几里得空间中，解析求导或数值求导足以计算梯度。相比之下，我们现在考虑一个黎曼流形 $(M,\ g)$，其中需要使用推前 来确定 J 的黎曼（形状）梯度。我们采用 [57, p. 28] 和 [58, p. 56], 中对推前的定义，该定义已被调整用于形状优化，例如见 [29]。推前 $(J_*)_\Gamma$ 描述了切空间 $T_\Gamma(M)$ 与$T_{J(\Gamma)}(\mathbb{R})$ 之间的映射。利用推前，可将可微（形状）函数 J 在$\Gamma \in M$ 处的黎曼（形状）梯度 $\nabla J(\Gamma)$ 定义为

$$g_\Gamma(\nabla J(\Gamma), \boldsymbol{v}^\Gamma) = (J_*)_\Gamma(\boldsymbol{v}^\Gamma) \quad \forall\, \boldsymbol{v}^\Gamma \in T_\Gamma M. \tag{3}$$

有关推前的更多细节可参见例如 [46, 57]。
正如算法1中梯度 4 $\rightarrow$ 公式（3）的计算所明显表明的那样，黎曼形状梯度位于 Γ处的切空间上；与欧几里得空间中的梯度不同，该梯度无法直接与形状 Γ兼容。在该切空间上的移动将导致离开流形，除非通过使用回缩将其投影回流形，这一点正如算法第 10 行以及前文第2.3节所述。

在实际应用中，推前通常由所谓的形状导数替代。通过求解以下方程，可以计算可微函数 J 在 $\Gamma \in M$ 处的形状更新方向 $\boldsymbol{u}^\Gamma$：

$$g_\Gamma(\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) = J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) \quad \forall\, \boldsymbol{v}^\Gamma \in T_\Gamma M. \tag{4}$$

术语 $J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma)$ 表示 J 在方向 $\boldsymbol{v}^\Gamma$上的形状导数，其中 Γ 。形状导数由所谓的欧拉导数定义。泛函 J 在足够光滑的方向 $\boldsymbol{v}^\Gamma$ 上、于 Γ 处的欧拉导数

由下式给出

$$DJ(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = \lim_{t\to 0^+} \frac{J(\Gamma_t) - J(\Gamma)}{t}. \tag{5}$$

如果欧拉导数对所有方向 $\boldsymbol{v}^\Gamma$ 都存在，并且映射 $\boldsymbol{v}^\Gamma \mapsto J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma)$ 是线性且连续的，那么我们称表达式 $J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma)$ 为 J 在 Γ 沿方向 $\boldsymbol{v}^\Gamma$ 的 形状导数。
一般而言，形状导数仅取决于形状 Γ 沿其局部法向量 $\boldsymbol{n}$方向的位移，因此可以表示为

$$J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = \int_\Gamma \boldsymbol{v}^\Gamma \cdot \boldsymbol{n}\, s(\boldsymbol{x})\, \mathrm{d}\Gamma, \tag{6}$$

所谓的*Hadamard*形式或强形式，其中 s 在此称为灵敏度分布。这种标量分布 s的存在是著名 Hadamard 定理的结果，参见例如 [35, 89, 20]。需要指出的是，形状导数的弱形式[4] 是作为中间结果推导出来的；然而，本文仅考虑方程（6）中的强形式。

2.5 形状空间示例及其在形状优化中的应用

现在，我们将目光转向一些被用作形状空间的特定空间，以及这些形状空间上的度量。本文将重点讨论内在度量这一类，即定义在形状本身上的度量，见第 2.3节。

形状空间 $\mathcal{B}_e$ 其中最常见的一种形状空间通常记作 $\mathcal{B}_e$，出自 [65]。这里我们不作数学定义，而是将其描述如下：形状空间 $\mathcal{B}_e$ 包含所有由单位圆嵌入整体域所得的形状，但不包括重新参数化后的形状。该空间仅包含无限光滑的形状（见图 1(a)）。文献 [65]已证明，该形状空间是一个无限维黎曼流形，这意味着我们可以运用前文介绍的概念，在 1中的梯度下降算法作用于 $\mathcal{B}_e$时，求得黎曼形状梯度。不过，仍有两个开放问题需要解决：我们可以（或应该）为 g选择哪种黎曼度量？以及我们应采用什么方法，将切空间上的一个方向转化为流形上的运动？后一个问题已在文献 [84, 29], 中得到解答，其中将 $\mathcal{B}_e$ 上的一种可能回缩描述为

$$\mathcal{R}_{\Gamma^i} : T_{\Gamma^i}(M) \to M, \boldsymbol{v}^\Gamma \mapsto \mathcal{R}_{\Gamma^i}(\boldsymbol{v}^\Gamma) = \Gamma^i + \boldsymbol{v}^\Gamma, \tag{7}$$

也就是说，所有 $\boldsymbol{x} \in \Gamma^i$ 都被位移至 $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}^\Gamma(\boldsymbol{x})$ $\forall \boldsymbol{x} \in \Gamma^i$。由于应用起来简单，本文将始终采用这种方法。

前一个问题并不容易回答。为了计算黎曼形状梯度，可以选择多种类型的黎曼度量，各有优缺点。为了介绍三类不同的黎曼度量，我们先介绍一种不构成 $\mathcal{B}_e$上黎曼度量的方案。

正如 [65], 所证明的， $T_\Gamma(\mathcal{B}_e)$上的标准 L^2 度量定义如下：

$$g_\Gamma : T_\Gamma(\mathcal{B}_e) \times T_\Gamma(\mathcal{B}_e), (\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) \mapsto \int_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \, \mathrm{d}\Gamma \tag{8}$$

它并非 $\mathcal{B}_e$ 上的黎曼度量，因为它存在测地距离消失现象。这意味着无法应用黎曼流形的整套理论；也就是说，无法保证相对于 L^2 度量计算得到的“梯度”是一个最速下降方向。

由于基于 L^2 度量的度量并非 $\mathcal{B}_e$上的黎曼度量，因此人们提出了不会遭受测地距离消失现象的替代方案。如 [98], 所述，可以确定三组基于 L^2-度量的黎曼度量。

1. 几乎局部度量 将权重纳入 L^2 度量（参见 [7, 10, 66]）。

[4]如果目标泛函定义在周围区域上，那么弱形式也是对该区域的积分；如果定义在 Γ 上，那么弱形式是对 Γ的积分，但不是 Hadamard形式。使用弱形式可以减少推导形状导数所需的分析工作。如果目标泛函是区域积分，那么使用弱形式需要对周围区域进行积分，而不是对 Γ进行积分。更多细节以及其他优点和缺点可参见 [89, 81, 98, 99]等文献。

2. 索博列夫度量 将导数纳入 L^2 度量（参见 [9, 66]）。3. 加权索博列夫度量 将权重和导数都纳入 L^2 度量（参见 [10]）。

第一组黎曼度量可概括为

$$g_\Gamma : T_\Gamma(\mathcal{B}_e) \times T_\Gamma(\mathcal{B}_e), (\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) \mapsto \int_\Gamma \Phi\, \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma \tag{9}$$

其中函数 Φ 任意。如 [66], 所述，该函数可以依不同程度取决于二维形状的长度、形状的曲率，或两者兼而有之。

根据 [66], , 更常见的方法属于第二组。在这一组中，使用高阶导数以避免测地距离消失现象。所谓的 索博列夫度量 可以达到任意高阶。常用的（参见例如 [82]）是一阶索博列夫度量

$$g_\Gamma : T_\Gamma(\mathcal{B}_e) \times T_\Gamma(\mathcal{B}_e), (\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) \mapsto \int_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma + A\, \nabla_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \nabla_\Gamma \boldsymbol{v}^\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma \tag{10}$$

其中弧长导数为 ∇_Γ ，度量参数为 $A > 0$。通过分部积分可得到一个等价的度量，其形式为

$$g_\Gamma(\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) := \int_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma - A\, \Delta_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma, \tag{11}$$

其中， Δ_Γ 表示拉普拉斯-贝尔特拉米算子。因此，一阶索博列夫度量有时也称为拉普拉斯-贝尔特拉米方法。

The 第三组结合了前两组，因此，一阶加权索博列夫度量可表示为

$$g_\Gamma : T_\Gamma(\mathcal{B}_e) \times T_\Gamma(\mathcal{B}_e), (\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) \mapsto \int_\Gamma \Phi \left(\boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma + A\, \nabla_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \nabla_\Gamma \boldsymbol{v}^\Gamma \right) \mathrm{d}\Gamma, \tag{12}$$

或等价地,

$$g_\Gamma(\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) := \int_\Gamma \Phi \left(\boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma - A\, \Delta_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \right) \mathrm{d}\Gamma.$$

如算法1中所述，为了获得黎曼形状梯度，无法避免求解偏微分方程。在大多数情况下，偏微分方程无法解析求解。因此，必须采用离散化方法对偏微分方程进行数值求解。然而，嵌入形状 Γ 的离散化域$\Omega \subseteq D$ 不会随形状本身移动，从而导致计算网格迅速劣化。因此，必须将黎曼形状梯度延拓到周围区域。通常使用拉普拉斯方程 $\Delta \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ 来实现这一点，并在 Γ上将黎曼形状梯度设为狄利克雷边界条件。接着，我们将 $\boldsymbol{u}$ 称为黎曼形状梯度向区域Ω的延拓，即 $\boldsymbol{u}^\Gamma$ 表示 $\boldsymbol{u}$ 在 Γ上的限制。

另一种方法 $\mathcal{B}_e$ 无需使用索博列夫度量，该方法在 [83] 中提出，称为*Steklov-Poincar´方法*。该方法使用 *Steklov-Poincar´e* 度量 $g_s(\cdot, \cdot)$ 中的一个来计算形状更新。其名称源自 Poincar´e-Steklov 算子，该算子用于将诺伊曼边界条件转换为狄利克雷边界条件。随后，利用其逆算子将 Γ 上的狄利克雷边界条件转换为诺伊曼边界条件。更具体地说，所得的诺伊曼边界条件给出的变形与狄利克雷边界条件等效。设 $V(\Omega)$ 为适当的函数空间，其上定义了一个内积。然后，利用诺伊曼解算子 $E_N(\boldsymbol{u}^\Gamma) = \boldsymbol{u}$，其中 $\boldsymbol{u}$ 是变分问题 $a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma \; \forall \boldsymbol{v} \in V(\Omega)$ 的解，我们可以结合 Steklov-Poincar´e 度量 g_s、形状导数$J'(\Gamma)(\boldsymbol{v})$，以及定义在区域 Ω 上的对称强制双线性型 $a(\cdot, \cdot)$，求出黎曼形状梯度相对于 Steklov-Poincar´e 度量向区域内部的延拓，并将其记为 $\boldsymbol{u} \in V(\Omega)$，如下所示

$$g_s(\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{v}^\Gamma) = J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) \quad \forall \boldsymbol{v} \in V(\Omega). \tag{13}$$

有关更多详情，感兴趣的读者可参阅 [98]。双线性形式 $a(\cdot, \cdot)$ 的不同选择会产生不同的 Steklov-Poincar´e 度量，因此有必要表示 Steklov-Poincar´e 度量族。双线性形式的常见选择包括

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{v} \,\mathrm{d}\Omega \quad \text{or} \quad a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{u} \cdot \mathcal{D}\, \nabla \boldsymbol{v} \,\mathrm{d}\Omega, \tag{14}$$

其中 $\mathcal{D}$ 可以表示线弹性的材料张量。相对于 Steklov-Poincar´e 度量的黎曼形状梯度 $\boldsymbol{u}$的延拓 g_s 可直接求得，并可立即用于更新整个 Ω中的网格，从而避免在 Γ上求解额外的偏微分方程。此外，如第 13节所述，形状导数的弱形式可用于方程（2.4）以简化解析推导。

形状空间 $\mathcal{B}^{\frac{1}{2}}$形状空间 $\mathcal{B}_e$的一种替代方案已在 [99]中引入。它记作 $\mathcal{B}^{\frac{1}{2}}(\Gamma^0)$，并且研究表明该形状空间是一个微分学空间。该形状空间包含所有由初始形状 Γ^0经可容许变换得到的形状，其中 Γ^0 至少是利普希茨连续的。与 $\mathcal{B}_e$中的无限光滑形状相比，这对可容许形状的光滑性要求要宽松得多。图1已概述了具有不同光滑性的形状。与在黎曼流形上进行优化不同，在微分学空间上的优化尚未成为成熟的研究领域。因此，在形状空间上构建优化算法的主要目标，即推广梯度定义、距离度量和最优性条件等概念，对于新空间 $\mathcal{B}^{\frac{1}{2}}(\Gamma^0)$ 尚未实现。不过，微分学空间上最速下降法所需的对象已经建立，相应的算法也已在 [34]中提出。值得一提的是，多项数值实验，例如 [81, 80, 87, 14], 表明，从 Steklov-Poincar´e 度量得到的形状更新也可用于涉及非光滑形状的问题。然而，关于测地距离是否趋于零、适当回缩的构造以及空间对初始形状的依赖性等问题 Γ^0 仍未解决。

双 Lipschitz 变换的最大可能空间 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$在有限维流形上，最速下降方向[5] 可以通过两种等价的形式来描述，参见 [1],，其形式为

$$-\frac{\nabla J(\Gamma)}{\|\nabla J(\Gamma)\|_{g_\Gamma}} = \underset{\boldsymbol{u}^\Gamma \in T_\Gamma(M):\|\boldsymbol{u}^\Gamma\|_{g_\Gamma}=1}{\arg\min} J'(\Gamma)(\boldsymbol{u}^\Gamma). \tag{15}$$

除了求解形状梯度 $\nabla J(\Gamma)$之外，获得形状更新方向的另一种方法是求解方程（15）右端项中的最小化问题，但这通常代价高昂而难以实施。该方法由 [42] 引入，并在 [19] 中应用于形状优化，作为 $W^{1,\infty}$ 方法，提出通过求解下式来近似最小化问题（15）的解

$$\min_{\boldsymbol{u}\in W^{1,p}(\Omega,\mathbb{R}^d)} \int_\Omega \frac{1}{p}\,|\nabla \boldsymbol{u}|^p \ \mathrm{d}\Omega + J'(\Gamma)(\boldsymbol{u}^\Gamma) \tag{16}$$

同时取 $p\to\infty$，其中 $p>2$，参见 [26]。由于其与 [26, 42, 69]中以弱形式描述的延拓方程等价

$$\underbrace{\int_\Omega |\nabla \boldsymbol{u}|^{p-2}\,(\nabla \boldsymbol{u}\cdot\nabla \boldsymbol{v})\,\mathrm{d}\Omega}_{a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})} = J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) \quad \forall \boldsymbol{v}\in W^{1,p}(\Omega,\mathbb{R}^d), \tag{17}$$

该偏微分方程可以通过迭代增大 p来数值求解。类似于 Steklov-Poincar´é 方法，我们可以将延拓方程的弱形式 $a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$与强形式或弱形式下的形状导数 $J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma)$等同起来，从而得到形状更新方向。在 [69], 中，该方法被称为 p-调和下降方法。用于延拓形状更新方向的索伯列夫空间 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$被认为是双 Lipschitz 形状更新的最大可能空间。然而，目前尚不清楚还需要哪些附加假设，才能保证 Lipschitz 形状更新以这种方式保持 Lipschitz 连续性，关于这一主题的更多细节请参见 [99, 第3节2] 和 [39, 第4节1]。此外，仍需对由空间 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$中的形状更新方向所产生的底层形状空间进行理论研究。由于尚未建立能够说明方程（15）中为何要在切空间上进行最小化的流形结构，也尚未证明g_s 可能是该流形的黎曼度量[6],，因此在此情形下无法保证方程（13）给出最速下降方向。

如果我们假设 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 是能够产生保持利普希茨连续性的形状更新的最大可能空间，那么只有 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 本身或 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 的子空间才能产生保持利普希茨连续性的形状更新。例如，在使用高阶索博列夫度量以及不会损失正则性的延拓时，需要将阶数 p 选得足够高，使得来自希尔伯特空间 $H^p(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 的相应解同时也是 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 的元素。索博列夫嵌入定理表明，这仅在 $p\geq\frac{d}{2}+1$ 的情况下成立。因此，在二维中至少需要选择 $p=2$，在三维中至少需要选择 $p=3$。然而，由于需要为形状更新方向求解非线性偏微分方程，这一要求在实践中通常难以满足。此外，在某些条件下，仅相对于一阶索博列夫度量的形状梯度就足以满足上述要求，详见 [98, 第 2.2 节。2]

从理论角度介绍了构造形状更新所需的概念后，下一节将再次阐述这些概念，并重点关注其适用性。

[5]原文给出的是最速上升方向，而最速下降方向则据此定义。[6]除非 $W^{1,p}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$ 满足以下条件，否则 $p=2$和 $a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$ 不具备关于参数的线性性，$p=2$因此不能归类为双线性形式。要使等式（13）成立，必须是双线性形式。

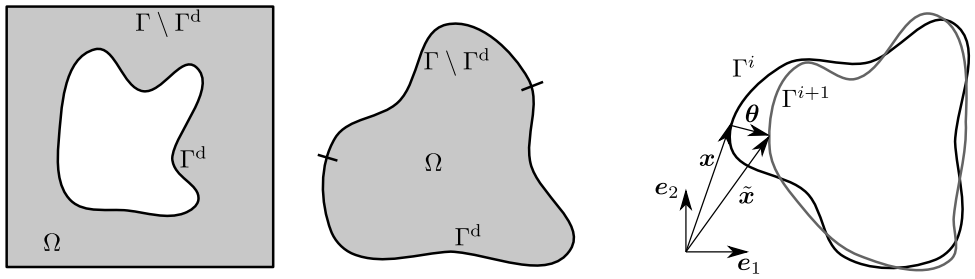


图 3：计算区域及其边界（左）和域变换（右）的示例。

3 工程中的无参数形状优化

在工程应用中，待优化的形状 Γ 可能以不同方式与计算区域 Ω 相关联，如图 3所示。无论采用何种关联方式，优化算法的主要目标不仅是根据给定形状 Γ^{i+1} 计算更新后的形状 Γ^i，使得 $J(\Gamma^{i+1}) < J(\Gamma^i)$，还要计算更新后的区域 Ω^{i+1}，以保持给定离散化 Ω^i的质量。与根据恒等扰动更新形状类似，更新后的区域计算如下：

$$\Omega^{i+1} = \left\{ \tilde{\boldsymbol{x}} : \tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} + \alpha\, \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{x}) \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Omega^i \right\}, \tag{18}$$

在离散意义下应用，例如通过将所有节点相应地位移 $\alpha\,\boldsymbol{\theta}$。总结上一节的阐述，实现目标函数期望降低的梯度下降算法包含以下四个步骤：计算

> 1. 目标函数 $J(\Gamma^i)$ 及其形状导数 $J'(\Gamma^i)(\boldsymbol{v}^\Gamma)$，2. 形状更新方向 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$（负形状梯度 $-\boldsymbol{u}^\Gamma$），3. 区域更新方向 $\boldsymbol{\theta}$（负形状梯度 $-\boldsymbol{u}$的延拓），4. 步长 α 和更新后的区域 Ω^{i+1}。

这里我们以一般方式将 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 和 $\boldsymbol{\theta}$ 分别称为形状更新方向和区域更新方向，因为并非所有方法都能根据式（形状梯度的定义，得到实际的形状梯度。式（4）。本节其余部分将重点讨论步骤 2–4，首先介绍若干种以简化方式计算 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 的方法，以便直接应用。有些方法将步骤 2 和 3 合并，直接得到区域更新方向 $\boldsymbol{\theta}$。对于其他方法，则按照本节末尾的说明单独计算延拓，其中还会介绍步长控制。

我们不详细介绍步骤 1（形状导数的计算 $J'(\Gamma_i)$），而是请读者参阅第 1节所引文献，了解如何推导伴随问题，以便高效地计算 $J'(\Gamma)$，且计算效率不受设计变量数量影响。不过，我们假设目标函数给定为

$$J(\Gamma) = \int_\Omega j_\Omega \,\mathrm{d}\Omega + \int_\Gamma j_\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma, \tag{19}$$

这适用于本文所考虑的所有问题，也同样出现在许多工程应用中。此外，我们假设形状导数以强形式给出（见式（6））。因此，步骤 2 的主要输入是灵敏度分布 s。

3.1 形状和区域更新方法

在汇总几种用于计算形状更新方向的方法之前 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$，我们希望先对为什么所计算的方向是能够使 s 降低的形状更新的合理候选方向作一些一般性说明 J。为此，可以利用式（5）中形状导数的定义来得到一阶近似

$$J(\Gamma^{i+1}) \approx J(\Gamma^i) + \alpha\, J'(\Gamma^i)(\boldsymbol{\theta}^\Gamma). \tag{20}$$

利用式（6）中的形状导数表达式，并令 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\boldsymbol{n}\, s$，可得 ns

$$J(\Gamma^{i+1}) \approx J(\Gamma^i) - \alpha \int_\Gamma s^2 \,\mathrm{d}\Gamma \lessapprox J(\Gamma^i), \tag{21}$$

这从形式上表明，至少对于较小的 α，可以预期目标函数会减小。然而，在实践中尝试使用 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\boldsymbol{n}\, s$ 时，以及在第2节所述的进一步数学研究中，理论上会遇到若干问题。一个明显的实际问题是，既不能假定 $\boldsymbol{n}$，也不能假定 s 足够光滑，以致它们的乘积及后续延拓能够产生有效的位移场 $\boldsymbol{\theta}$，并可按式（18）应用。本文考虑的所有方法都通过提供一个比 $\boldsymbol{n}\, s$更光滑的形状更新方向 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$来解决这一问题。若干方法为此采用式（4）中定义的黎曼形状梯度 $\boldsymbol{u}^\Gamma$。相应的一阶近似为

$$J(\Gamma^{i+1}) \approx J(\Gamma^i) + \alpha\, g_\Gamma(\boldsymbol{u}^\Gamma, \boldsymbol{\theta}^\Gamma). \tag{22}$$

设定 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\boldsymbol{u}^\Gamma$，可得

$$J(\Gamma^{i+1}) \approx J(\Gamma^i) - \alpha\, g_\Gamma(\boldsymbol{\theta}^\Gamma, \boldsymbol{\theta}^\Gamma), \tag{23}$$

这表明　这些方法同样会使目标函数减小，前提是 α 足够小　ll.

3.1.1 离散滤波方法

多位作者成功应用离散滤波技术来获得平滑的形状更新，例如参见 [91, 16, 48]。顾名思义，这些方法基于底层离散化进行构造，例如基于节点或点 $\boldsymbol{x}_n$ onΓ 以及这些点处的灵敏度 $s_n = s(\boldsymbol{x}_n)$。节点处的形状更新方向，即要在该处施加的位移方向，按以下方式计算

$$\boldsymbol{\theta}^\Gamma_n = \boldsymbol{\theta}^\Gamma(\boldsymbol{x}_n) = -\sum_{j \in N_n} w_{n,j}\, s_j\, \boldsymbol{n}_j. \tag{24}$$

其中，$w_{n,\,j}$ 表示权重，而 N_n 是节点 n邻域内节点的索引集合。我们在第 N_n 节介绍邻域 w_n和权重 j 的一种特定选取方式，并将其称为滤波灵敏度（FS）方法。

根据公式（24）定义的滤波器具有离散性，因此需要在节点位置处计算法向量 $\boldsymbol{n}_n$。由于 $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}_n)$ 未定义，因此必须采用一种特殊的启发式计算规则。在第 4节所考虑的示例中，节点 Γ 由线性边连接，我们将法向量 $\boldsymbol{n}_n$ 计算为相邻两条边的法向量 $\boldsymbol{n}^{e_1}$ 和 $\boldsymbol{n}^{e_2}$ 的平均值，

$$\boldsymbol{n}_n = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{n}^{e_1} + \boldsymbol{n}^{e_2}\right). \tag{25}$$

针对第5节所考虑的三维问题，建立了一条类比计算规则。在这一离散情形下，即使对于非光滑几何形状，也可以直接将灵敏度和法向量用作形状更新方向。这只是使用邻域 $N_n = \{n\}$ 和权重 $w_{n,n} = 1$时（24）的一个特例，其结果为 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma_n = -\boldsymbol{n}_n\, s_n$。由此得到的方法在此称为直接灵敏度（*DS*）方法。

我们想强调的是，连续情形下导致公式（21）的相应选择 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\boldsymbol{n}\, s$ 无法应用于使用计算网格时出现的分段线性形状——节点处的法向量根本没有定义。沿法向进行任何形状更新时也会遇到同样的问题。然而，我们仍将这类方法纳入研究，因为它们在文献中得到了广泛应用，并且与针对奇异点处法向的特殊计算规则（如公式（25））结合时，可以成功应用。需要注意的是，根据FS或DS方法计算出 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 后，还需按第3.2节所述，将其扩展到区域中，以获得 $\boldsymbol{\theta}$。

最后，我们想指出，在应用场景中，即使是连续推导出的形状更新方向，最终也会通过离散方式更新节点位置（第 4 节）或单元中心（第 5 节）。因此，所有方法——包括以下各节介绍的方法——最终都还要经过额外的离散滤波。

3.1.2 拉普拉斯-贝尔特拉米方法

一种常用的形状更新方法基于一阶 Sobolev 度量（见式（10））， 这将其转化为形状梯度的识别问题：

$$\text{Find } \boldsymbol{u}^\Gamma,\ \text{s.t.} \quad \int_{\Gamma^\mathrm{d}} A\, \nabla_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \nabla_\Gamma \boldsymbol{v}^\Gamma + \boldsymbol{u}^\Gamma \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma \,\mathrm{d}\Gamma^\mathrm{d} = J'(\Omega)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = \int_{\Gamma^\mathrm{d}} \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{v}^\Gamma\, s \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall \boldsymbol{v}^\Gamma \in V(\Gamma^\mathrm{d}). \tag{26}$$

这里我们将本构参数 A 称为导电率。强形式涉及切向 Laplace–Beltrami 算子 Δ_Γ，由此得名这一类方法。将其表述为边值问题，可写为

$$\boldsymbol{u}^\Gamma - A\,\Delta_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma = \boldsymbol{n}\,s \quad \text{in } \Gamma^\mathrm{d}, \tag{27}$$

$$\boldsymbol{u}^\Gamma = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \partial\Gamma^\mathrm{d}. \tag{28}$$

该辅助问题给出 $\boldsymbol{u}^\Gamma$ 于 Γ^d上，而在 $\Gamma \setminus \Gamma^\mathrm{d}$ 上，我们设定 $\boldsymbol{u}^\Gamma = \boldsymbol{0}$。第 3.2 节介绍了将 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\boldsymbol{u}^\Gamma$ 延拓到区域内以分别得到 $\boldsymbol{\theta}$和 $\boldsymbol{u}$的方法。我们将这种方法称为 向量拉普拉斯-贝尔特拉米（*VLB*）方法。由于 Δ_Γ 仅沿切向方向作用，$s\,\boldsymbol{n}$ 的各分量会发生混合，因此 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 不平行于 $\boldsymbol{n}$，详情请参见 [48, 91] 。

作为替代方案，我们考虑应用于 [37] 的 VLB 方法的标量变体，以下称为标量拉普拉斯-贝尔特拉米（*SLB*）。使用切向拉普拉斯-贝尔特拉米算子，并以灵敏度 s 作为右端项，计算标量场 $\bar{u}$：

$$\bar{u} - A\,\Delta_\Gamma \bar{u} = s \quad \text{in } \Gamma^\mathrm{d}, \tag{29}$$

$$\bar{u} = 0 \quad \text{on } \partial\Gamma^\mathrm{d}. \tag{30}$$

取 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma = -\bar{u}\,\boldsymbol{n}$ 作为形状更新方向。与 VLB 方法相同，在一定程度上实现了光滑化，即 $\bar{u}$ 比 s更光滑。不过，这种选择与任何平行于法向的方向一样，存在相同的缺点。还需指出，若式（24）中的权重根据钟形高斯函数选取，则第 3.1.1 节中的离散滤波方法等价于 VLB 方法的有限差分近似，参见 [16, 48]。

3.1.3 Steklov-Poincar´e 方法

如第 2 节所述，这些方法结合了对 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 的识别，以及计算其向区域内部的延拓。这将得到一个识别问题，类似于式（26），但此处使用定义在区域 $V(\Omega)$上的函数空间 Ω 以及定义在 $a(\cdot,\cdot)$ Ω 上的双线性形式，而非定义在 $g(\cdot,\cdot)$ 上的内积 Γ。选取式（14）中的第二个双线性形式后，形状梯度的识别问题可写为

$$\text{Find } \boldsymbol{u},\ \text{s.t.} \quad \int_\Omega \nabla\boldsymbol{u} \cdot \mathcal{D}\,\nabla\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\Omega = J'(\Omega)(\boldsymbol{v}) = \int_\Gamma \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v}^\Gamma\,s\,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall \boldsymbol{v} \in V(\Omega). \tag{31}$$

若 $\mathcal{D}$ 选作各向同性材料的本构张量，则式（31）可解释为线动量平衡的弱形式。在此线弹性语境下，$s\,\boldsymbol{n}$ 起到表面牵引力的作用。因此，该方法也称为牵引力法，例如参见 [6, 5]。为完成该表述，本构张量写作

$$\mathcal{D} = \lambda\,\mathcal{T} + 2\,\mu\,\mathcal{S}, \tag{32}$$

其中，$\mathcal{T}$表示产生迹（$\mathcal{T}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{tr}\,(\boldsymbol{A})\ \boldsymbol{I}$）的四阶张量，$\mathcal{S}$ 是产生对称部分（$\mathcal{S}\,\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^\mathrm{T}\right)$）的四阶张量，而 λ 和 μ 是拉梅´常数。这些参数的合适取值取决于具体问题，通常会尽可能选择能保持底层网格质量的取值。通过分部积分，可以得到识别问题的强形式；要进一步为其施加狄利克雷边界条件，从而得到

$$\mathrm{div}\,(\mathcal{D}\,\nabla\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0} \quad \text{in } \Omega, \tag{33}$$

$$\mathcal{D}\,\nabla\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}\,s \quad \text{on } \Gamma^\mathrm{d}, \tag{34}$$

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma \setminus \Gamma^\mathrm{d}. \tag{35}$$

下文将这种选择称为*Steklov-Poincar´e* 结构力学（*SP-SM*）。这种方法的一个优点是能够带来高质量的域变换：像弹性固体在表面载荷作用下那样发生扰动的区域，很可能仍能保持其离散化网格单元的质量。当然，位移必须足够小，因为这里不考虑几何或物理非线性。此外，该方法还可以使用第2.4节中提到的形状导数弱形式。为此，形状导数中的被积函数可在弹性力学背景下解释为体载荷，并作为右端项施加于（33）中。

存在多种采用前者有效简化形式的替代方法。在 [49] 中，忽略弹性理论引入的空间交叉耦合，并引入空间变化的标量导电率。该导电率

被定义为到边界的逆距离，使得

$$\mathcal{D} = \frac{1}{w+\varepsilon}\mathcal{I}, \tag{36}$$

其中 $\mathcal{I}$ 表示四阶单位张量，而 w 表示到边界的距离。对于位于壁面上的点，引入一个较小的值 ε 以避免奇异性。在下文中，我们将此变体称为*Steklov-Poincar´e* 壁面距离（*SP-WD*）。需要强调的是，此时求解的是扩散率或传热问题，而不是弹性问题。更准确地说，d 针对 $\boldsymbol{u} = [u_1\ u_2\ u_3]$的每个分量分别求解相互解耦的扩散率或传热问题——因为利用（36），偏微分方程（33）可化简为

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{w+\varepsilon} \nabla u_i \right) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{for } i = 1,2,3. \tag{37}$$

为完整起见，我们还想介绍 [70] 中的一种替代方案，该方案在识别问题（31）中引入了非线性。对于 $\mathcal{D}$ 所采用的 [80, 28]，另一种选择是 $\mathcal{D} = 2\,\mu\,\mathcal{S}$，其中 μ 在 Γ^{d} 上取用户定义的最大值，并在边界的其余部分取最小值。区域Ω 内部的值通过求解拉普拉斯方程计算得到，使给定的边界值能够平滑插值。然而，在第4 节和第5节的研究中，我们不考虑这些选择。

3.1.4 p 调和下降方法

如第 2.5 节末尾所述，p-调和下降方法（PHD）给出了另一个用于识别区域更新方向的识别问题 $\boldsymbol{\theta}^*$，如式（17）所示。稍作改写可得

$$\int_\Omega \left(\nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}\right)^{\frac{p-2}{2}} \left(\nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{v}\right)\, d\Omega = \alpha\, J'(\Omega)(\boldsymbol{v}) = \alpha \int_{\Gamma^{\mathrm{d}}} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}\, s \,\mathrm{d}\Gamma^{\mathrm{d}}. \tag{38}$$

该问题的强形式为

$$\operatorname{div}\left(\left(\nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}\right)^{\frac{p-2}{2}} \nabla \boldsymbol{u} \right) = \boldsymbol{0} \qquad \text{in } \Omega, \tag{39}$$

$$\left(\nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u}\right)^{\frac{p-2}{2}} \nabla \boldsymbol{u}\, \boldsymbol{n} = \alpha\, s\, \boldsymbol{n} \quad \text{on } \Gamma^{\mathrm{d}}, \tag{40}$$

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \qquad \text{on } \Gamma \backslash \Gamma^{\mathrm{d}}. \tag{41}$$

随后将区域更新方向取为 $\boldsymbol{\theta} = -\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{u}$。由于（39）的非线性，我们在此引入缩放参数 α。在优化算法的框架下，α 表示步长，可通过步长控制确定。上述其他方法均建立了 s 与 $\boldsymbol{\theta}$ 之间的线性关系，因此缩放可独立于辅助问题的解进行。对于 PHD 方法，可能需要反复求解问题（39 – 41），以找到所需的步长。

这种选择在实践中的主要优势是参数 p，它使得我们可以任意接近双 Lipschitz 变换的情形 $W^{1,\infty}(\Omega\ \mathbb{R}^d)$。因此，可以任意精确地处理尖角，相关讨论见第 2 节，并在 [69, 19]中予以展示。文中还展示了另一个优点：PHD 方法能够获得相当好的网格质量。与 SP 方法类似，PHD 方法还允许直接利用形状导数的弱形式。

3.2 网格变形与步长控制

通常会采用多种方法，将通过 DS、FS、VLB 和 SLB 方法获得的形状更新方向 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 延拓到区域中。例如，可以使用径向基函数等插值方法，参见例如[37]。另一种典型选择是求解拉普拉斯方程，其中以 $\boldsymbol{\theta}$ 作为其状态，并将 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 作为该目的下在 Γ^{d} 上的狄利克雷边界条件，参见例如 [61]。我们采用类似的方法，并基于为 Steklov-Poincar´e 方法引入的一般偏微分方程进行延拓。在此背景下应用时需要求解的边值问题如下：

$$\operatorname{div}\left(\mathcal{D}\,\nabla\boldsymbol{\theta}\right) = \boldsymbol{0} \qquad \text{in } \Omega, \tag{42}$$

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^\Gamma \qquad \text{on } \Gamma^{\mathrm{d}}, \tag{43}$$

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{0} \qquad \text{on } \Gamma \setminus \Gamma^{\mathrm{d}}. \tag{44}$$

作为本构关系，我们再次选择线弹性（见公式（32））或逐分量热传递（见公式（36））。一旦整个区域内都获得了变形场，就可以更新其离散表示

根据公式（18）。这里需要指出，对于除 PHD 方法以外的所有方法，区域更新方向 $\boldsymbol{\theta}$ 均可独立于步长 α 计算；而对于 PHD 方法，它对 α存在非线性依赖，见第 3.1.4节。
为了比较不同的形状更新，我们采用步长控制。我们使用两种不同的方法来确定优化的合适步长 α。

1. 我们进行线搜索，其中 α 通过分治方法确定，使得 $J(\Omega^{i+1})$最小。根据算法的构造，它从下方逼近最优值，并得到能产生该局部最小值的最小 $\alpha > 0$。如果网格质量低于某个阈值，算法会在找到最小值之前停止，并返回网格仍可接受时的最大 α。对于所有考察的示例和形状更新方向，这都需要反复计算 J。对于 PHD 方法，还需要反复计算 $\boldsymbol{\theta}$。

2. 我们为第一次形状更新 $\theta^{\max} = \max_{\boldsymbol{x}\in\Omega_0} \|\alpha\,\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{x})\|$指定最大位移。这不需要计算 J，但对于 PHD 方法，则仍需反复计算 $\boldsymbol{\theta}$。对于所有其他方法，我们只需设置

$$\alpha = \theta^{\max}\left(\max_{\boldsymbol{x}\in\Omega_0}\|\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{x})\|\right)^{-1}. \tag{45}$$

由于我们的目标是比较计算形状更新的不同方法，而不是追求最速下降算法的最优效率，因此我们不采用 Armijo 回溯等高级步长控制策略。

如上一节所述，形状更新方向的评估取决于具体应用和所采用的数值方法。特别是，法向量 $\boldsymbol{n}$ 的计算是一个棘手的问题，可能决定某种方法是否适用。我们在第4 节和第5节中对用于此目的的方法进行了详细说明。

4 说明性测试案例

为了研究不同的形状更新和区域更新，我们考虑以下无约束优化问题。

$$\min_{\Gamma\in M} J(\Gamma) = \int_\Omega f(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\Omega, \tag{46}$$

其中

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1,x_2) = 2\,x_1^4 + x_2^4 - x_1^2 - 4\,x_2^2 - 3\,C_1\,|\max(x_1,x_2)| + \frac{1}{10}\,C_2\,(\sin(50\,x_1)+\sin(50\,x_2))\,. \tag{47}$$

的图像如图 f 4 所示，其中还标示了曲线； 其中 $f = 0$，即 f的水平集。由于在该曲线内部， $f \le 0$，而在外部 $f > 0$，因此该水平集正好是极小化区域的边界。通过与 C_1相乘的项引入了一个奇点——当 $C_1 \neq 0$ 时，最优形状有两个折点；而当 $C_1 = 0$时，形状是光滑的。通过与 C_2相乘的项引入了高频成分。应用形状导数的标准公式（例如参见 [2]），我们得到

$$J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^\Gamma) = \int_\Gamma f\,\boldsymbol{v}^\Gamma\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\Gamma \tag{48}$$

使得 $s = f$。
我们从一个光滑的初始形状开始优化过程——一个外半径为 $R = 1$、内半径为 $r = 0.3$的圆盘。设计边界 Γ^{d} 仅对应于外边界，中心孔固定不变。这确保了 SP-SM 方法的适用性；如所述，该方法只有在通过狄利克雷边界条件至少阻止刚体运动时才能应用。这要求在相应的辅助问题（方程（33–34））中满足 $\Gamma\backslash\Gamma^{\mathrm{d}} \neq \emptyset$。
我们采用迭代算法，通过使用第 3 节介绍的各种方法，依次更新形状（以及区域），以求解最小化问题。为公平比较不同的形状和区域更新，使用第 3.2 节概述的线搜索技术，针对给定的 α，寻找使 $J(\Gamma^{i+1})$ 最小化的步长；也就是说，在确定步长时，会考虑 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 向区域内的延拓 α。

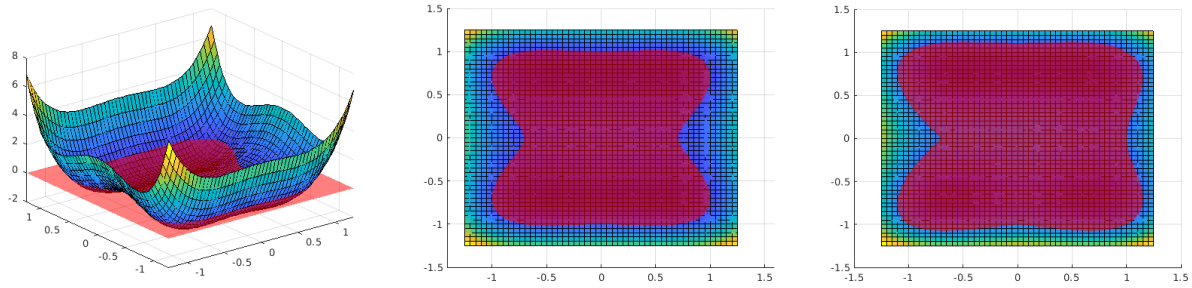


图4: 函数图像 f 由（46）描述，具有 $C_2 = 0$。左侧和中间： $C_1 = 0$。右侧： $C_1 =$ 1.

4.1 离散化

我们使用三角剖分对初始区域进行离散化，并在第一步中于整个优化过程中保持该网格不变。在第二步中，每进行三次优化迭代就重新网格划分一次；此外，每当线搜索方法得出的步长小于 10^{-6}时，也会重新网格划分。相应地，边界由线段（三角形边）离散表示。为了实际应用理论上不可行、且平行于边界法向量场的形状更新，网格变形基于节点进行。通过对两条相邻边的法向量取平均值，在所有边界节点处获得平滑法向量。灵敏度 s 也在节点处进行评估，随后结合相应的辅助问题，分别求得区域更新方向 $\boldsymbol{\theta}$和节点处的 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 。J 中的积分根据三角形中心处的值计算。

第 3.1.2 节中针对各项选择（VLB 和 SLB）所设的辅助问题采用有限差分法求解。给定$\boldsymbol{u}^\Gamma$，边界节点 j 处的切向散度根据相邻边界节点近似为

$$\Delta_\Gamma \boldsymbol{u}^\Gamma(\boldsymbol{x}_j) \approx 2\,\frac{\boldsymbol{u}^\Gamma(\boldsymbol{x}_{j+1}) - \boldsymbol{u}^\Gamma(\boldsymbol{x}_j)}{h_{j+1}\,(h_j + h_{j+1})} - 2\,\frac{\boldsymbol{u}^\Gamma(\boldsymbol{x}_j) - \boldsymbol{u}^\Gamma(\boldsymbol{x}_{j-1})}{h_j\,(h_j + h_{j+1})}, \tag{49}$$

其中 $h_j = \|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_{j-1}\|$ 表示节点 j 与 $j-1$之间的距离。

第 3.1.3 节和 3.1.4 节中所选用的辅助问题（SP-SM、SP-TM 和 PHD）采用有限元法求解。使用基于所选三角剖分、具有线性形函数的等参单元。通过消去相应的自由度来施加狄利克雷边界条件。

结合第42-44式的辅助问题，在第3.1节中所有仅提供 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ （DS、FS、VLB、SLB）的选项中均需要求解该问题，采用相同的有限元法。所有计算均在 MATLAB [62]中完成。代码可通过以下网址获取：
http://collaborating.tuhh.de/M-10/radtke/soul。

4.2 结果

图 5 展示了粗略离散化下进行和不进行重新网格化时的优化过程，以作概览。本例的平均边长设为 $h = 0.1$ 。下文中，除非另有说明，均使用满足 $h = 0.05$ 的更精细网格。基于 $h = 0.01$ 的解进行的初步研究表明，在评估 J 时，近似误差会降至 10^{-6} 以下。

首先，我们考虑不含高频内容的光滑情形，即 $C_1 = 0$ 和 $C_2 = 0$。图 6（左）展示了不同形状更新计算方法在优化迭代过程中 J 的收敛情况。对于这个特定示例，DS方法使 J下降最快，而 PHD 则最慢。为确保线搜索算法正常工作，且不会因网格退化而提前终止，我们进行了检查，如图 6 （右）所示。细线表示 J 对应的步长从 0 到 $2\,\alpha$的取值。可以看出，线搜索迭代并未提前退出，而是始终得到了最优步长。

区域更新方向的范数和步长的变化过程如图所示：7。更准确地说，我们绘出了边界上所有节点位移的平均范数，即

$$G = \frac{\alpha}{N^{\mathrm{n}}} \sum_{n=1}^{N^{\mathrm{n}}} \|\boldsymbol{\theta}_n\|_2, \tag{50}$$

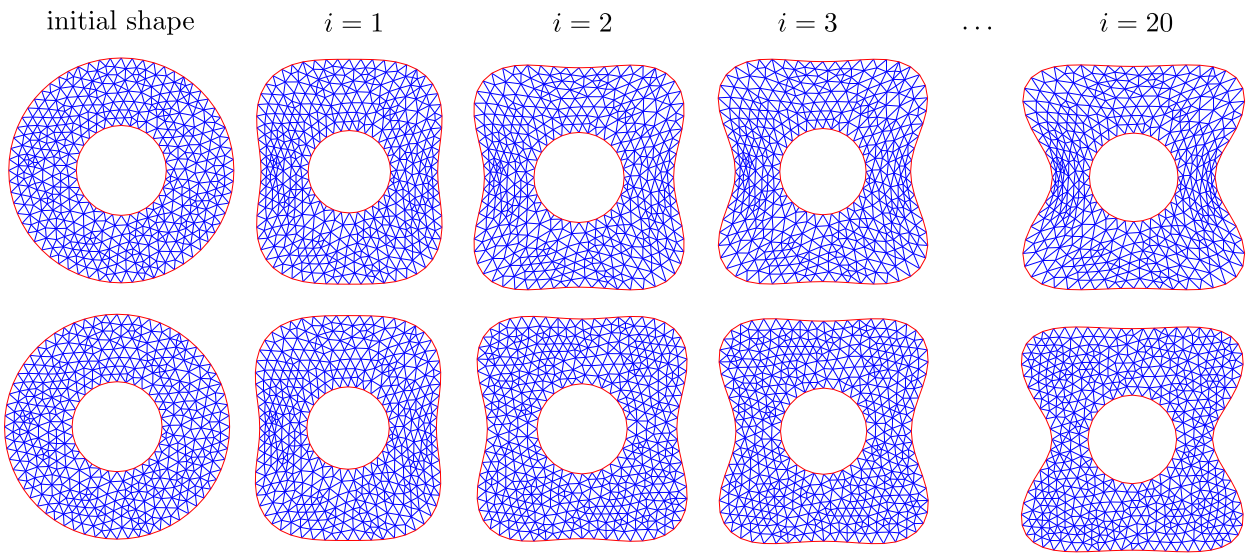


图5：使用 VLB 方法和粗网格 ($h = 0.1$)，不同初始形状在优化迭代过程中出现的形状。上：不进行重新网格化。下：每两次迭代进行一次重新网格化。

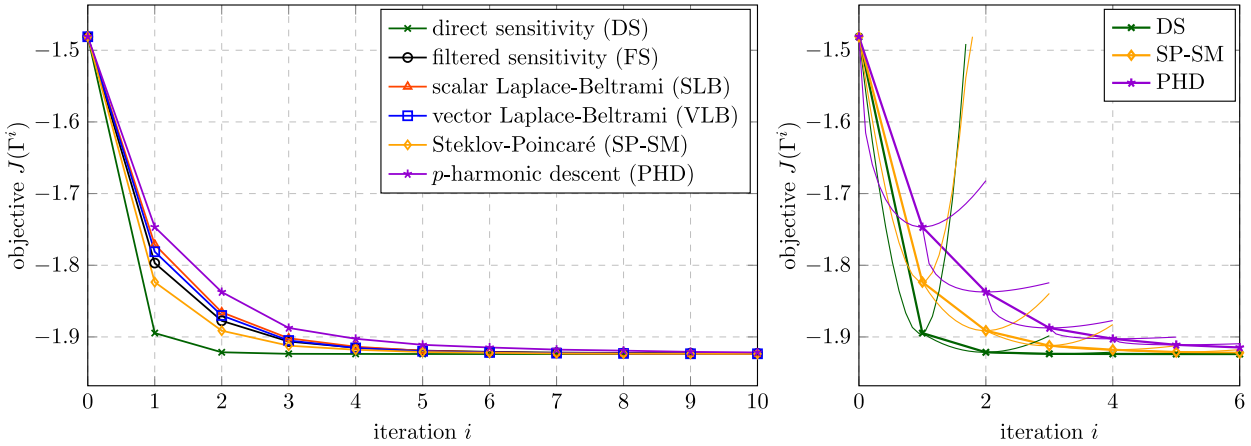


图6：在优化迭代过程中，采用不同形状更新时 J 的收敛情况，包括步长在 0 到 2α 之间的（未采用）步长值。

其中 N^{n} 是边界上的节点总数。正如预期，G 收敛至一个较小值，因此经过一定次数的迭代后，形状更新不再具有实际意义。

4.2.1 网格细化下的行为

虽然我们已在初步步骤中确保所考虑的离散化足够精细，能够准确计算代价泛函，但仍需更仔细地考察网格细化对计算所得最优形状的影响。为此，迄今考虑的情形 $C_1 = 0$ 和 $C_2 = 0$ 并未带来新的见解。所有方法均成功收敛到相同的最优形状，如图5所示，且其收敛行为与图 6所示的情况无法区分。无论是否进行重新网格化，均得到这一结果。

对于情形 $C_1 = 1$ 和 $C_2 = 0$ 存在尖角（见图4），观察到了不同的行为。图8展示了目标泛函的收敛情况（左图），以及采用不同形状更新得到的最终形状。除 x轴上靠近 $x = -1$ 处和 y轴上靠近 $y = -1$处的尖角区域外，所有形状都近似相同。图9放大展示了采用不同网格密度得到的最终形状中第一个尖角所在的区域。可以观察到，只有 DS 方法能够解析该尖角，而其他所有方法

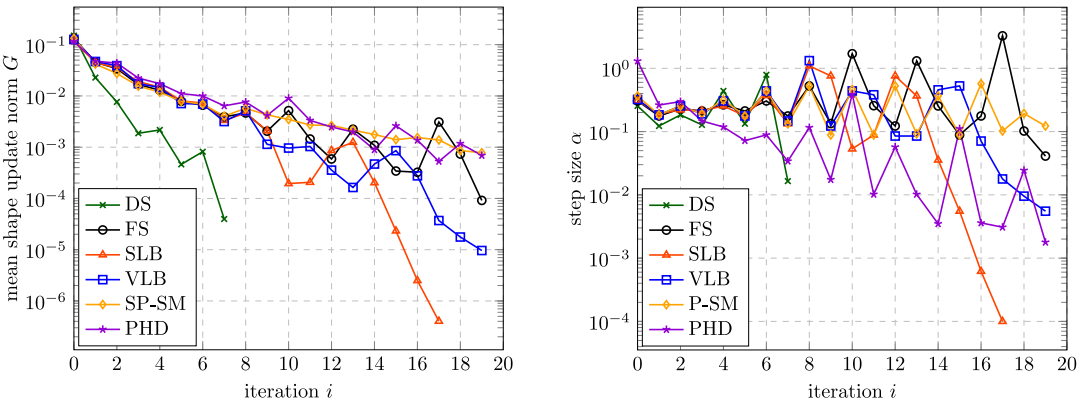


图7：左：节点边界位移的平均范数。右：最优步长。

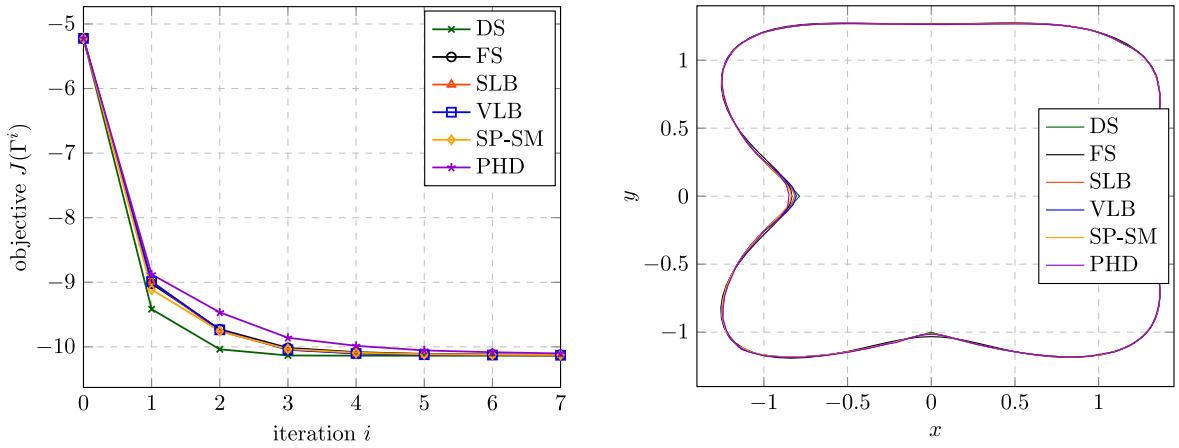


图8： $C_1 = 1$的结果。左：不同形状更新下， J 在前几次优化迭代中的收敛情况。右：迭代20次后得到的形状。

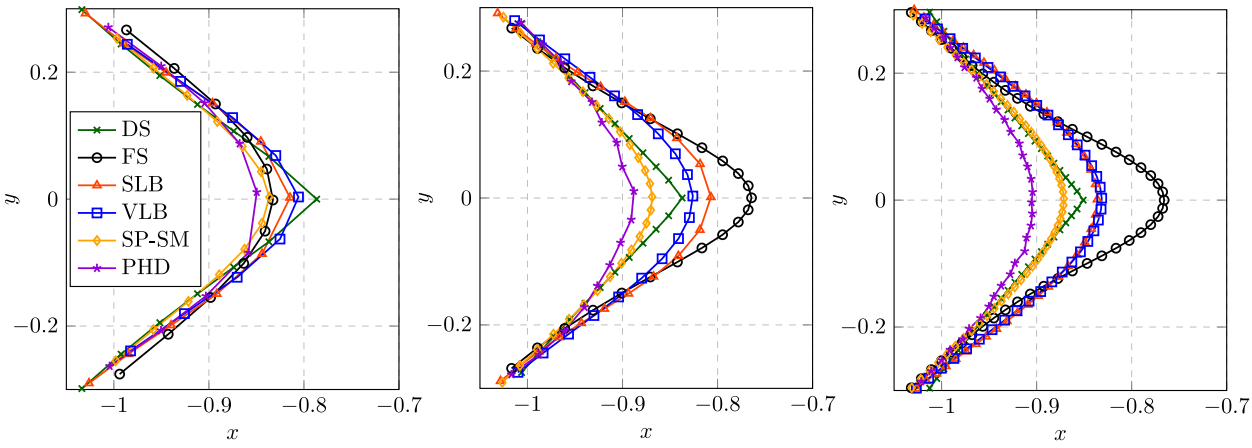


图9： $C_1 = 1$ 和 $C_2 = 0$得到的几何形状。左： $h = 0.05$的结果。中： $h = 0.025$的结果。右： $h = 0.0125$的结果。

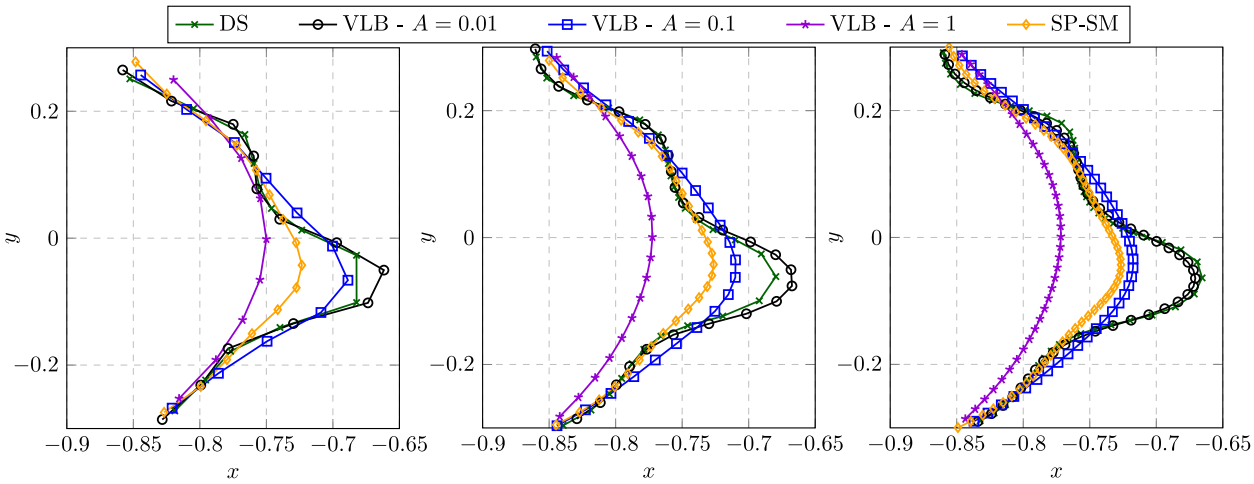


图1： $C_1 = 0$和 $C_2 = 1$得到的几何形状。左： $h = 0.05$的结果。右： $h = 0.025$的结果。

得到更平滑的形状。进一步进行网格细化后，所得形状与图9 （右）所示的形状已无法区分。

接下来，我们考虑情形 $C_1 = 0$ 和 $C_2 = 1$，它会在最优形状中引入高频成分。将其与现实世界的应用进行类比时，高频成分可以有两种不同的解释。

1. 它可能是数值伪影，由原问题和伴随问题的离散化产生（此时我们不希望在预测的最优形状中发现它）。2. 它可能代表物理波动，例如由取决于湍流场的灵敏度所致（此时我们不希望在预测的最优形状中发现它）。3. 它可能代表实际且期望得到的最优形状（我们希望在预测的最优形状中发现它）。

话虽如此，我们无法判断不同方法是否适用。根据不同的解读，是否希望收敛到包含高频成分的形状，可能会有不同答案。

图 10 展示了细化网格时采用若干选定方法得到的形状。由于 FS、SLB 和 PHD 方法得到的结果在定性上与 SP-SM 方法相同，即收敛到不含高频成分的平滑形状，因此未将它们纳入比较。为说明导电率的影响 A，我们针对 VLB 方法考虑了三种变体。导电率较大时 $A = 1$，得到的形状甚至比 SP-SM 方法得到的形状更加平滑；而 $A = 0.1$ （迄今所有研究中选用的值）得到的形状则与之相似。将导电率降低至 $A = 0.01$，得到的形状与 DS 方法得到的形状相似，后者确实能够分辨出高频成分。

4.2.2 非光滑初始形状的行为

最后，我们从一个非光滑初始形状开始优化过程，以测试不同形状更新的稳健性。相应的网格如图11 （左）所示。图 11 （右）中的收敛行为已经表明，并非所有方法都收敛到最优形状。相反，DS 和 SLB 方法得到的形状不同，且目标泛函的值高得多。

图 12 解释了这种收敛行为。第一次迭代后，在初始形状具有尖角的区域，DS 和 SLB 方法表现出严重的网格畸变（见图 11 （左））。为了至少避免三角形单元发生自穿透，后续迭代的步长变得非常小；在经过 9 次（DS）或 8 次（SLB）迭代后，找不到大于 10^{-6} 且能够降低目标泛函的步长。相比之下，FS 和 SP 方法得到的形状非常接近最优形状。不过，对于这两种方法，初始尖角仍然清晰可见，这不仅是由于内部网格发生畸变，也因为形状中仍保留了一个尖角；对于 FS 方法，这一现象更加明显。VLB 和 PHD 方法的表现与 SP 方法非常相似，因此这里不再展示。

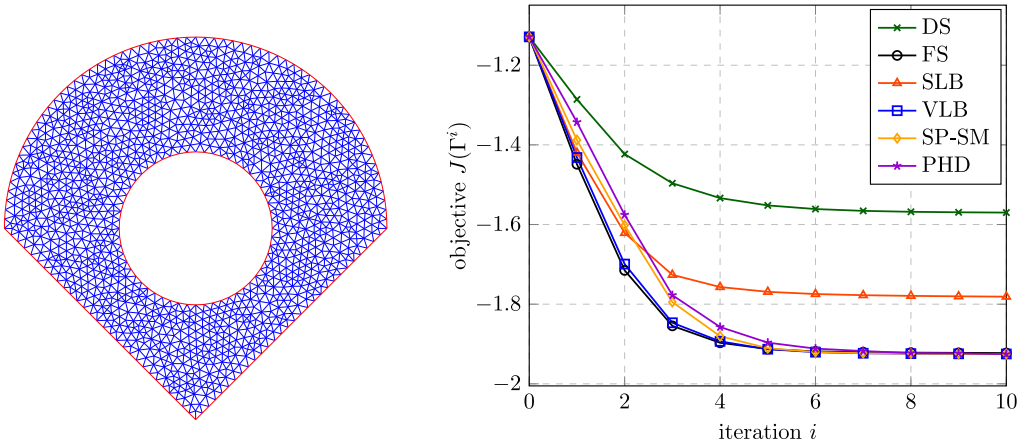


图11：左：带有尖角的初始形状。右：采用不同形状更新时， J 在优化迭代过程中的收敛情况。

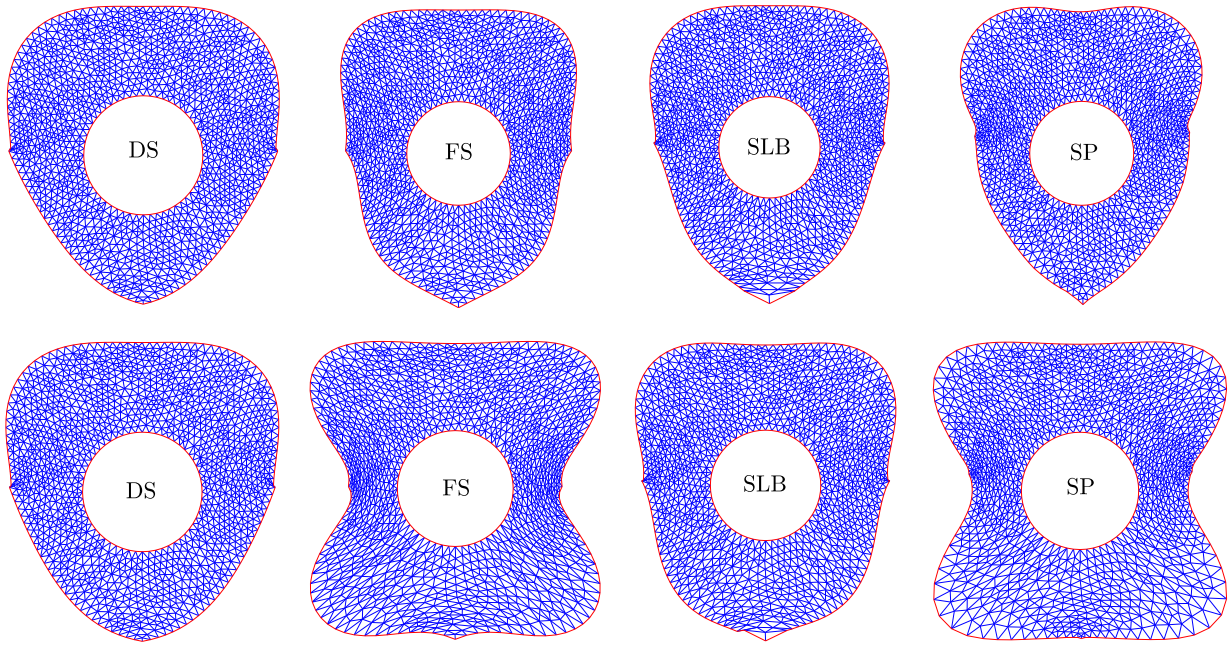


图12：基于非光滑初始形状、未进行重新网格化的部分优化过程中出现的网格。上：第一次迭代后的网格。下：迭代20次后的网格。

我们想强调的是，即使不同的方法得出近似相同的最优形状，中间形状（即优化过程中所经过的路径）也可能存在根本差异，如图12所示。在比较采用不同形状更新方法的优化结果时，尤其要牢记这一点，因为这些优化可能会提前终止，例如由于网格退化；下一节介绍的若干研究便属于这种情况。

5 个典型应用

本节将展示基于计算流体力学的形状优化在二维和三维几何形状上的应用，并探讨前文介绍的形状更新方法。我们着重讨论优化过程中出现的实际问题和限制。所研究的应用涉及稳态层流内流和外流。优化问题受不可压缩牛顿流体的纳维–斯托克斯（NS）方程约束，其密度为 ρ，动力黏度为 μ，即：

$$R^p = -\mathrm{div}(\boldsymbol{u}) = 0\,, \tag{51}$$
$$\boldsymbol{R}^{\boldsymbol{u}} = \rho\,\nabla\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{u} - \mathrm{div}(2\,\mu\,\boldsymbol{S} - p\,\boldsymbol{I}) = \boldsymbol{0}\,, \tag{52}$$

其中，$\boldsymbol{u}$、p、$\boldsymbol{S} = 1/2(\nabla\boldsymbol{u} + (\nabla\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}})$ 和 $\boldsymbol{I}$ 分别表示速度、静压、应变率张量和单位张量。(51)-(52)的伴随状态由伴随流体速度$\hat{}\boldsymbol{u}$ 和伴随压力$\hat{}p$ 定义，它们由以下方程求解得到：

$$R^{\hat{p}} = -\mathrm{div}(\hat{\boldsymbol{u}}) = 0, \tag{53}$$
$$\boldsymbol{R}^{\hat{\boldsymbol{u}}} = \rho\left((\nabla\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}\,\hat{\boldsymbol{u}} - \nabla\hat{\boldsymbol{u}}\,\boldsymbol{u}\right) - \mathrm{div}(2\,\mu\,\hat{\boldsymbol{S}} - \hat{p}\,\boldsymbol{I}) = \boldsymbol{0}\,, \tag{54}$$

其中，$\hat{}\,\boldsymbol{S} = 1/2(\nabla\hat{}\boldsymbol{u} + (\nabla\hat{}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}})$表示伴随应变率张量。
所采用的数值方法为隐式二阶精度有限体积法（FVM），使用任意形状/结构的多面体网格。分离式算法对所有输运性质采用单元中心、同位存储格式，参见 [77]。原始方程和伴随方程的压力-速度耦合已得到广泛验证与确认 [92, 47, 52, 50, 15], ，遵循SIMPLE 方法，并通过区域分解方法实现并行化 [101, 102]。原始方程 [和伴随方程] 的动量对流通量采用二次迎风 [下风]运动学插值（QUICK） [QDICK]格式近似 [92]，自伴随扩散通量则采用中心差分方法。

用于计算形状更新的各种方法中的辅助问题，均采用前述出版物中所述的有限体积策略进行数值求解。因此，$\boldsymbol{\theta}$ 首先在单元中心$\boldsymbol{c}_c$ 处计算。接着，需要将其映射到节点位置 $\boldsymbol{x}_n$，此过程采用反距离加权，也称为谢泼德插值 [86]。我们用 $\boldsymbol{\theta}_n$ 表示节点处的值

$$\boldsymbol{\theta}_n = \frac{1}{N_n^{\mathrm{c}}} \sum_{\mathrm{c}\in C_{\mathrm{n}}} \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{c}_c) \left(1 - \frac{||\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{c}_c||}{\sum_{d\in C_n} ||\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{c}_d||}\right). \tag{55}$$

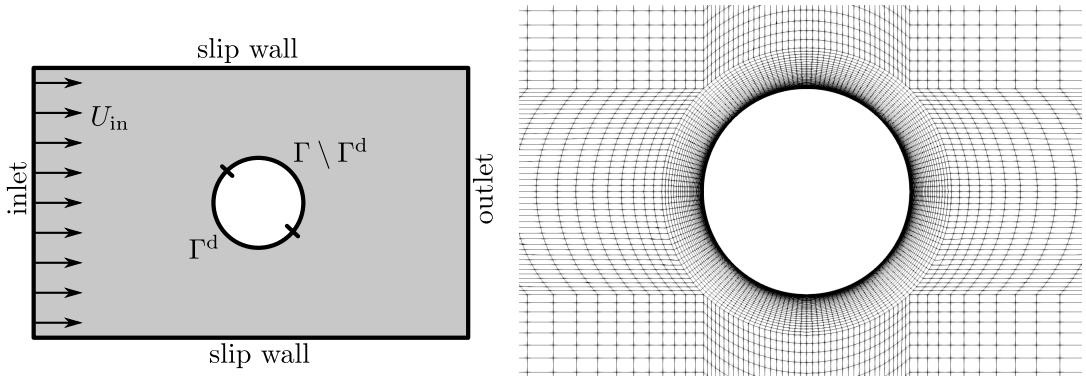
其中，C_n 包含节点 n处所有相邻单元的 N_n^{c} 索引。网格更新后，会重新计算每个有限体积单元的几何量。拓扑关系保持不变，仿真则从上一个优化步骤重新开始，以评估新的目标泛函值。由于采用了迭代优化算法且步长相对较小，两个连续形状的场解通常相近。与从头开始仿真相比，对于所考虑的应用，总计算时间有望缩短约一个数量级。

5.1 圆柱周围的二维流动

我们考虑一个基准问题：流体绕圆柱流动，如图所示。13(a)。本应用旨在通过优化圆柱部分形状来最小化其流动诱导阻力。目标函数 $J(\Gamma)$及其形状导数如下：

$$J(\Gamma) = \int_{\Gamma} (p\,\boldsymbol{I} - 2\mu\boldsymbol{S})\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e}_1 \mathrm{d}\Gamma \qquad \text{and} \qquad J'(\Gamma)(\boldsymbol{v}^{\Gamma}) = -\int_{\Gamma^{\mathrm{d}}} \underbrace{(\mu\,\nabla\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{n}\cdot\nabla\hat{\boldsymbol{u}}\,\boldsymbol{n})}_{s}\,\boldsymbol{v}^{\Gamma}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\Gamma\,, \tag{56}$$

其中 $\boldsymbol{e}_1$ 表示 x方向（主流方向）的基向量，详见 [52] 。请注意，目标函数沿整个圆形障碍物 Γ进行评估，但其形状导数仅在



(a) (b)

图13：圆柱（$\text{Re}_{\text{D}} = 20$）：（a）所研究的二维优化问题示意图，虚线表示可用于设计的区域（Γ^{d}）；（b）圆柱附近所用数值网格的细节。

表1：圆柱（$\text{Re}_{\text{D}} = 20$）：网格依赖性研究结果。为便于说明，这里记作$\hat{J}' = \int_{\Gamma^{\text{d}}} s \, d\Gamma$。索引 i 表示网格细化级别。注意 $\rho = 20\,\text{kg/m}^3$、 $\mu = 1\,\text{Pa}\cdot\text{s}$、 $U_{in} = 1\,\text{m/s}$和$D = 1\text{m}$。

加密级别	有限体积数	$\frac{2J_i}{\rho U_{in}^2 D^2}$	$\frac{2\hat{J}'_i}{\rho U_{in}^2 D}$	$\frac{J_i - J_{i-1}}{J_{i-1}}$ (%)	$\frac{\hat{J}'_i - \hat{J}'_{i-1}}{J'_{i-1}}(\%)$
M0	300	2.1197	-3.325	-	-
M1	1200	2.1433	-3.612	1.11	-8.64
M2	4800	2.1356	-3.822	-0.35	-5.81
M3	**19200**	**2.1334**	**-3.937**	**-0.11**	**-3.01**
M4	76800	2.1334	-3.932	-0.003	0.14
M5	307200	2.1334	-3.936	-0.001	-0.11

设计中的截面 Γ^{d} 如图 13(a)所示。选择优化障碍物形状的一部分而非完整形状，是为了避免出现奇异点或直线等平凡解，而无需施加额外的几何约束。稳态层流研究在$\text{Re}_D = \rho U_{\text{in}} D/\mu = 20$（基于圆柱直径） D 和来流速度 U_{in}下进行。二维计算域的长度和高度分别为 $40\,D$和 $20\,D$。入口处给定速度值，顶部和底部边界采用滑移壁面，出口处则设定压力值。

为确保目标泛函 J 及其形状导数 J' 在方程（56）中与空间离散无关，首先进行了网格研究，如表 1所示。由于从加密级别 4 起，监测积分量没有显著变化，因此后续所有优化均采用级别 3。图 13 （b）展示了所用结构化数值网格的局部细节，该网格包含约 19000 个控制体。圆柱沿圆周方向离散为 200 个表面片段。

与理论框架不同，为了实现数值优化过程，我们现在还必须考虑其他实际因素。在任何计算流体力学模拟中，都必须考虑的一个关键因素是所用数值网格的质量。随着优化的推进，网格会在过程中动态变形，而不是采用重新网格化方法。因此，我们必须确保网格质量得到充分保持，使数值解能够收敛并产生可靠的结果。确保网格质量不会严重恶化的一种直观方法是采用较小的步长 α，以限制大幅变形。

在二维算例的数值研究中，整个优化过程中步长保持恒定，并通过指定第一次迭代中的最大位移（$\theta^{\max}$）来确定，如第3.2节所述。根据作者在此特定算例中的经验，我们将其设为圆柱直径的百分之二，即 $\theta^{\max} = 0.02\,D$，参见 [53]。附录A介绍了结合线搜索方法进行的进一步研究。

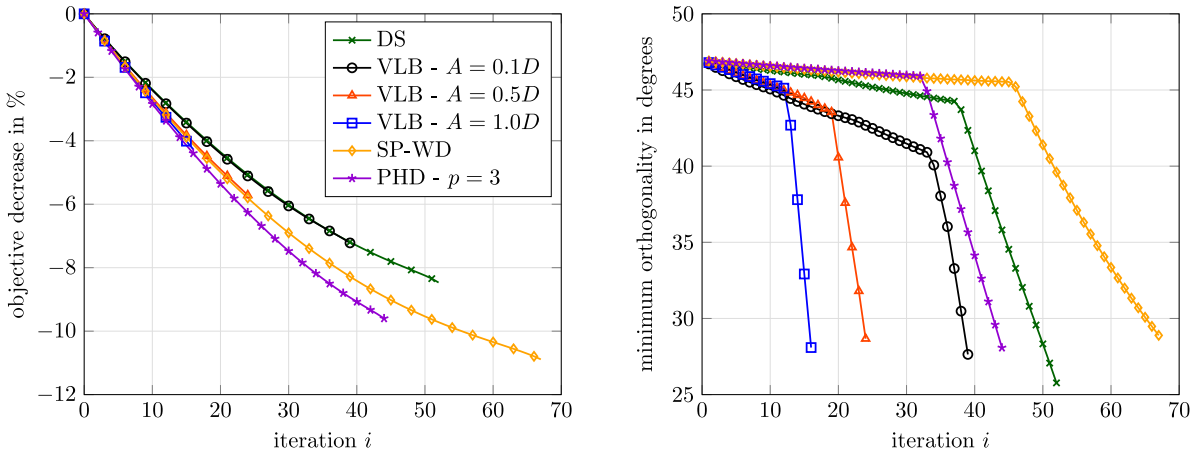


图14：圆柱（$\mathrm{Re_D} = 20$）：(a) 目标函数（$J(\Omega)$）的相对下降（$J_i - J_0$）$/J_0 \cdot 100\%$。(b) 计算网格的最小单元正交性。图(a)和图(b)共用同一图例。

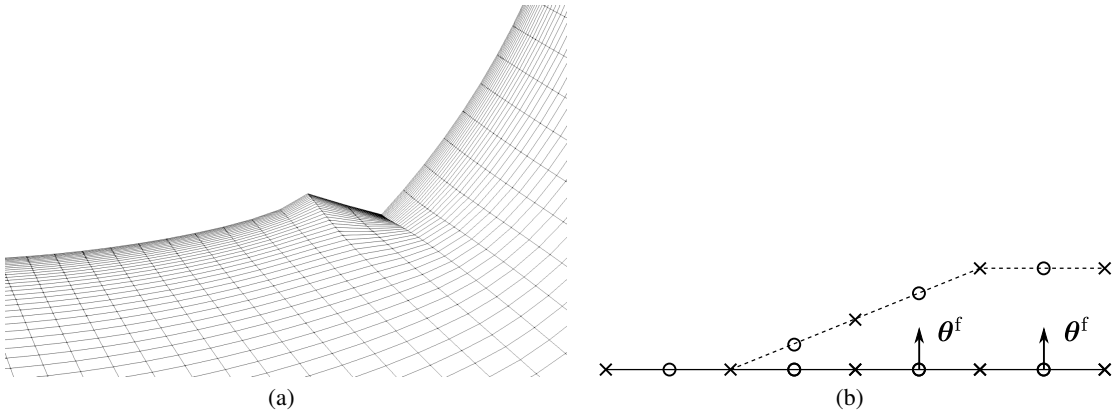
5.1.1 结果

所研究的方法包括DS方法、采用 $A = 0.1D$的VLB、采用 $A = 0.5D$的VLB、采用 $A = D$的VLB、SP-WD和PHD。对于所有仅产生 $\boldsymbol{\theta}^\Gamma$ 的方法，向区域内的延拓按照第3.2 节所述进行（见式（42））， 其本构关系基于式（36）。图14（a）显示了上述所有方法相对于初始形状的 J（Γ）相对下降情况。如图所示，所研究的域表达式SP-WD和PHD实现了超过9%的下降，而其余边界表达式的效果较差，DS方法的最大下降幅度为8.2 %。从同一幅图中还可以看出，采用恒定步长时，没有一种方法能够达到收敛状态。图14（b）监测了优化过程中计算网格的最小正交性，揭示了这一不足的原因。在所有算例中，优化算法的最后几步都会严重损害网格质量，导致计算网格无法使用。这部分归因于所选的设计边界（Γ^d）以及式（55）所述的网格更新方法。根据式（55），一个自然的问题是：连接设计表面片和非设计表面片的节点处会发生什么？为此，我们给出图15，展示优化过程结束时VLB - $A = 0.1D$中圆柱右侧最边缘的连接段在离散后的情况，该连接段位于上述表面片之间。如图所示，设计曲面与非设计曲面的连接处出现了尖锐的人工折角。这是因为连接顶点的位移是根据所有相邻表面片的贡献计算得出的，如图15（b）所示。因此，如果我们的辅助问题所产生的形状更新在设计边界与非设计边界的连接处未能平滑衰减至零，就必然会出现折角。由此造成的周围网格严重劣化，会因原始求解器或伴随求解器发散而导致计算研究提前终止。尽管所有形状更新都会出现这种现象，但其在整个优化过程中出现的早晚各不相同。

此外，值得注意的是，不同度量得到的形状及其生成路径均存在显著差异。如图16所示。我们注意到，SP-WD和PHD得到的解更加平滑，而VLB方法生成的形状随着 A 减小而变得越来越不平滑。注意，当 $A \to 0$时，VLB等价于DS（见式（27））。

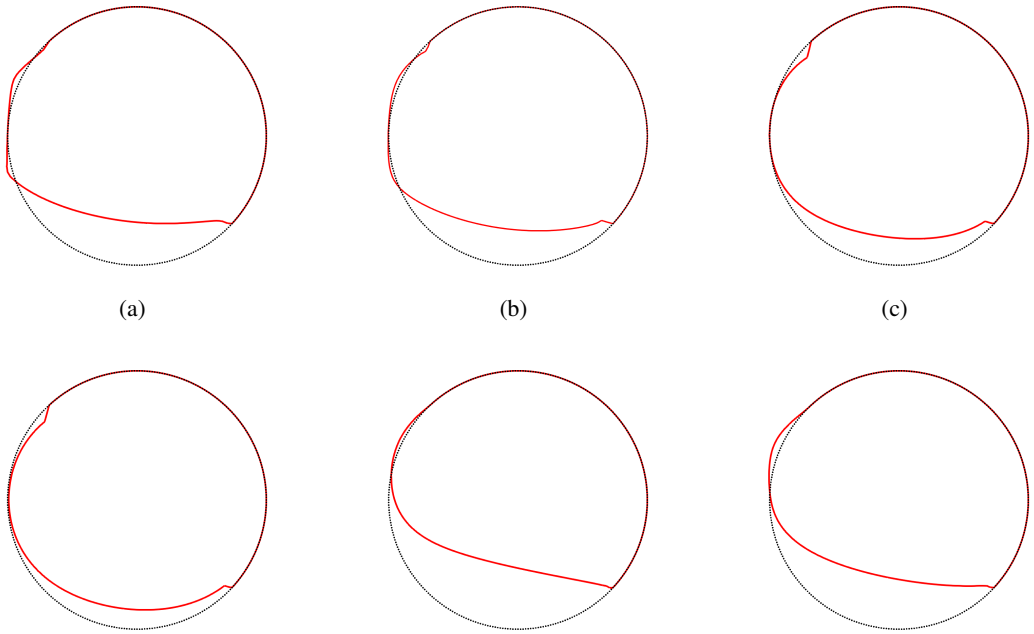
5.1.2 通过线搜索控制步长

与第 4 节的说明性测试案例类似，我们采用第 3.2 节所述的线搜索技术，为二维圆柱应用寻找最优步长。由于测试不同步长需要付出大量数值计算，因此我们将研究范围限定为 SP-WD 和 DS 方法。图 17 (a) 展示了前两次优化迭代中目标泛函 $J(\Gamma^{i+1})$ 随步长的变化情况。与说明性测试案例不同，我们无法找到一个使 J 开始增大的步长。相反，由于网格质量较差，线搜索提前结束。具体而言，我们监测最小网格正交性，并在其达到阈值 $45°$ 时停止。图 17 (b) 所示的结果证实了这一选择：对于大多数下降方向，在 $45°$ 之后，网格质量会迅速恶化。这项研究凸显了开展基于计算流体力学的形状优化研究时可能面临的重大数值限制。尽管我们倾向于为每个下降方向采用最优步长，但最终不可避免地受到所用网格质量的限制。就此而言，我们不禁要问，究竟



(a) (b)

图15：圆柱（雷诺数$_{\mathrm{D}} = 20$）：（a）最后一次优化迭代中，$\Gamma \backslash \Gamma^{\mathrm{d}}$ 与Γ^{d} 之间最右侧连接点处数值网格的细节，采用方法 VLB - $A = 0.1D$。（b）网格更新的一维示例（见公式（55））。面中心以圆圈表示，顶点以 $\times$ 标记表示。箭头表示面中心处的形状更新方向，$\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{f}}$。实线表示初始形状，虚线表示变形后的离散形状。



(a) (b) (c)

(d) (e) (f)

图16：圆柱（雷诺数$_{\mathrm{D}} = 20$）：优化后的形状（红色）与初始形状（黑色）的轮廓对比。（a）DS，（b）VLB - $A = 0.1D$，（c）VLB - $A = 0.5D$，（d）VLB - $A = D$，（e）SP-WD 和（f）PHD。

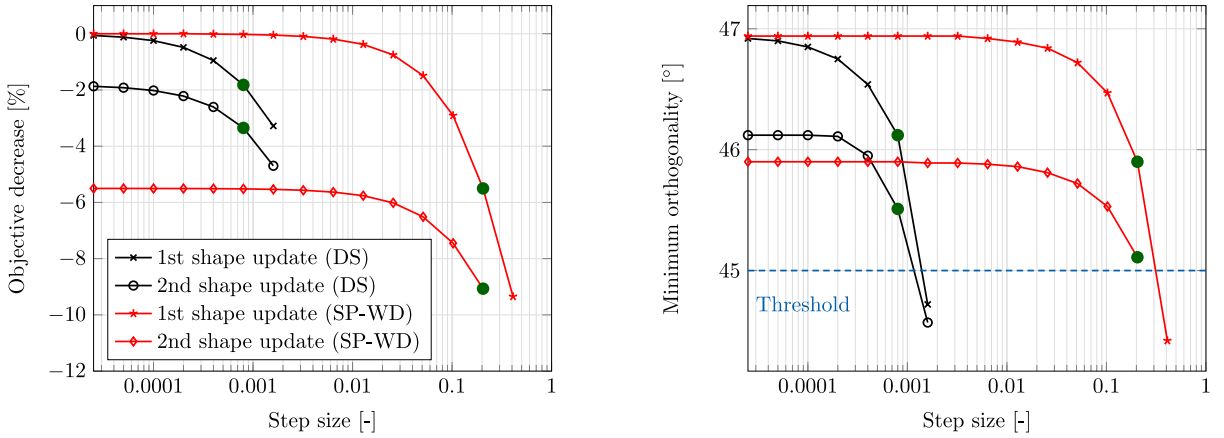


图17：采用基于线搜索技术的最优步长控制进行的前两次优化迭代。绿色实心圆表示采用最优选定步长获得的结果。（a）目标函数的相对下降。（b）所采用计算网格的最小单元正交性。图（a）和（b）共用同一图例。

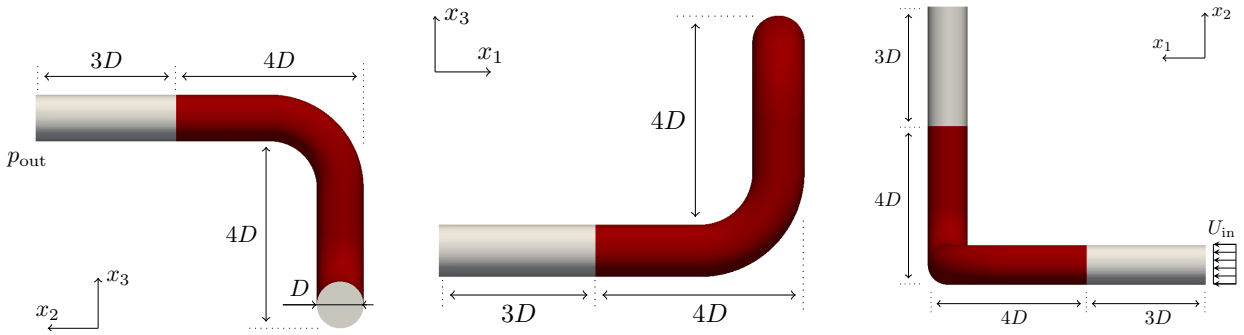


图18：双弯管（$\text{Re}_{\text{D}} = 500$）：初始几何形状的多个视图，其中红色区域表示可进行设计的区域。

在大幅网格细化（这意味着增加计算开销）与基于经验直接选择步长之间取得最佳平衡。这个问题的答案取决于当前优化的目标以及用户可用的计算资源。

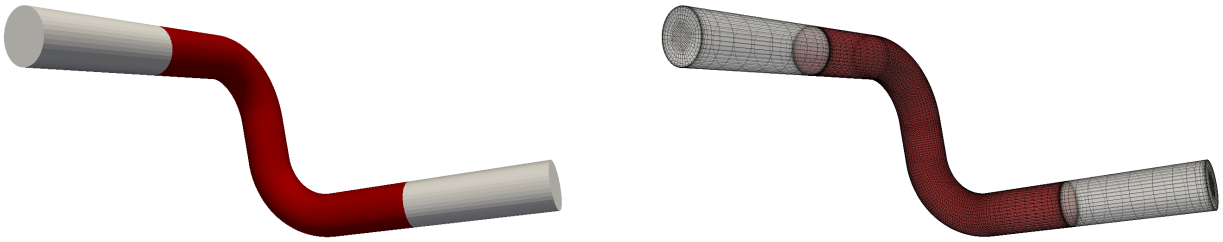
5.2 通过双弯管的三维流动

第二个测试案例研究了一个更复杂的三维双弯管道，如图所示。18。流动的体积雷诺数为$\text{Re}_{\text{D}} = \rho U D/\mu = 500$ 其中 U 和 D 分别表示平均流速和入口直径。入口处施加均匀速度分布，并在出口处规定压力为零。管道几何形状针对总功率损失进行优化，即

$$J(\Gamma) = -\int_{\Gamma} \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{u}\left(p + \frac{\rho}{2}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}\right)\,\mathrm{d}\Gamma, \tag{57}$$

相应的形状导数 $J'(\Gamma)(\boldsymbol{\theta})$ 与上一节中的形状导数相同，见公式（56）。关于伴随问题（包括边界条件）的详细说明见[92, 51]。

与二维流动的情形类似，首先进行网格研究，结果见表 2。为确保研究在计算上可行，同时可靠地估算目标函数，以下所有情形均采用级别2。这对应于一个包含90000个控制体的结构化数值网格。从入口下游三个直径处开始，曲线区域可用于设计，并由5600个表面单元离散；此外，数值网格在设计壁面与非设计壁面之间的过渡区域附近进行了加密，如图 19所示。在三维情形的优化过程中，步长在整个过程中保持不变，并通过指定



(a) (b)

图19：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：初始几何形状（a）和所用数值网格（b）。红色区域表示设计区域。

表2：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：网格依赖性研究结果。为便于说明，此处记作 $\hat{} J' = \int_{\Gamma_d} s \, d\Gamma$。索引 i 表示网格细化级别。注意 $\rho = 500\,\mathrm{kg/m^3}$、$\mu = 1\,\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$、$U = 1\,\mathrm{m/s}$ 和 $D = 1\mathrm{m}$。

加密级别	有限体积数量	$\frac{2\,J_i}{\rho U^3 D^2}$	$\frac{2\,\hat{} J'_i}{\rho U^3 D}$	$\frac{J_i - J_{i-1}}{J_{i-1}}$ (%)	$\frac{\hat{J}'_i - \hat{J}'_{i-1}}{J'_{i-1}}(\%)$
M0	11250	2.18	-5.55	-	-
M1	**90000**	**3.091**	**-11.44**	**41.73**	**106.13**
M2	720000	3.15	-11.38	1.91	-0.53
M3	5760000	3.17	-11.38	0.41	0.0

第一次迭代中的最大位移（$\theta^{\max}$）来确定，具体说明见第 3.2 节。我们将其设为初始管道直径的百分之一，即 $\theta^{\max} = 0.01D$。所研究的形状更新和区域更新包括 DS、SLB（$A/D = 1$）、VLB（$A/D = 1$）、SP-WD 以及 PHD（$p = 4$）。这里的 A 用法与第 5.1 节中的类似。所有研究的形状更新均像二维情形那样延伸至整个区域。

5.2.1 结果

图 20(a) 显示了相对于初始形状的 $J(\Omega)$ 相对下降。当两次区域更新之间目标泛函的相对变化低于 0。1%时，优化过程满足停止准则，即 $(J_i - J_{i-1})/J_{i-1} \cdot 100\% < 0.1\%$。所研究的基于边界的方法 SLB 和 VLB 实现了超过 40% 的下降，这与 SP-WD 的收益相当。PHD 方法将代价泛函降低了 $\approx 36\%$，但仍比 DS 方法高出 10%；DS 方法因原始求解器在 42 次迭代后发散而终止。终止的原因是网格质量不足导致原始求解器发散，正如上一节所述。请注意，所有优化过程中各次模拟的求解器设置（如松弛参数等）均相同。

从图中形状更新方向的表示可以预见，DS过程中的网格质量会有所下降。21 与（b）SLB、（c）SP-WD 和（d）PHD 中的形状更新相比，$p = 4$，DS方法的形状更新场明显较为粗糙，尤其是在两个管道弯曲段之间的直线区域。需要注意的是，该图基于单元中心有限体积近似，结果必须使用公式（55）插值到控制体顶点。这一过程会产生平滑效果，使数值过程至少能够执行几次形状更新，而不会导致求解器立即发散。与DS方法相比，采用滤波宽度为 $A/D = 1$的SLB方法，其形状更新明显更加平滑，参见图21 （b）。其他方法产生的形状变化更加平滑；在管道弯曲段之间的区域，SP-WD与PHD各自变形场之间的差异相对较小。

四种不同方法得到的最终形状的透视图如图所示。22。同样可以看出，DS方法（a）在弯管之间的区域产生了局部凹陷，这最终导致 SIMPLE求解器在经过几次迭代后发散。另一方面，SLB、SP-WD 和 PHD 方法的形状更新都很平滑，但仍存在明显差异。

图22中的结果与预期一致：体积增加应伴随着压降降低。不同形状更新方法得到的最终形状各不相同，这一点也可以通过追踪管道体积来观察。为此，图20 （b）展示了相对体积

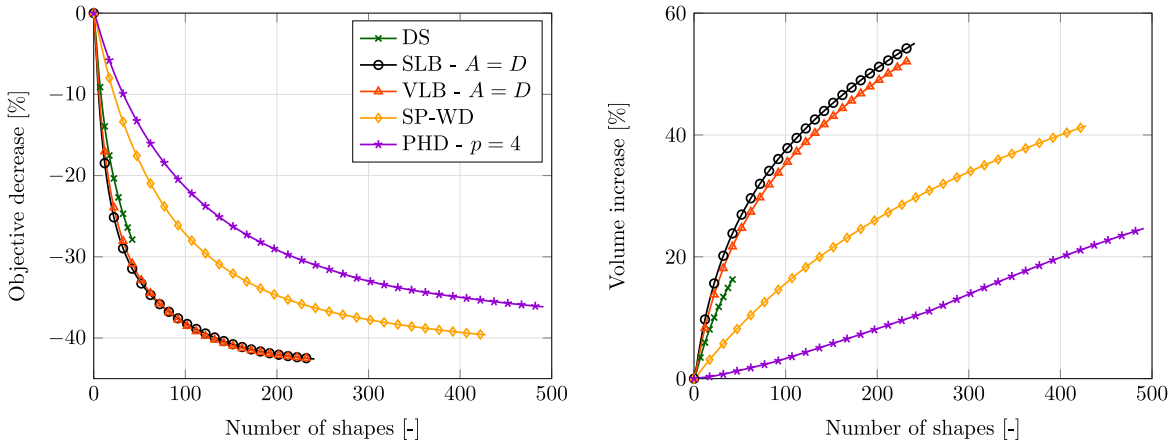


图20：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：(a) 如图$J(\Omega)$14所示优化过程中的目标函数相对下降。(b) 每次形状更新的全局体积$(V_i - V_0)/V_0 \cdot 100\%$ 增幅。图(a)和(b)共用同一图例。

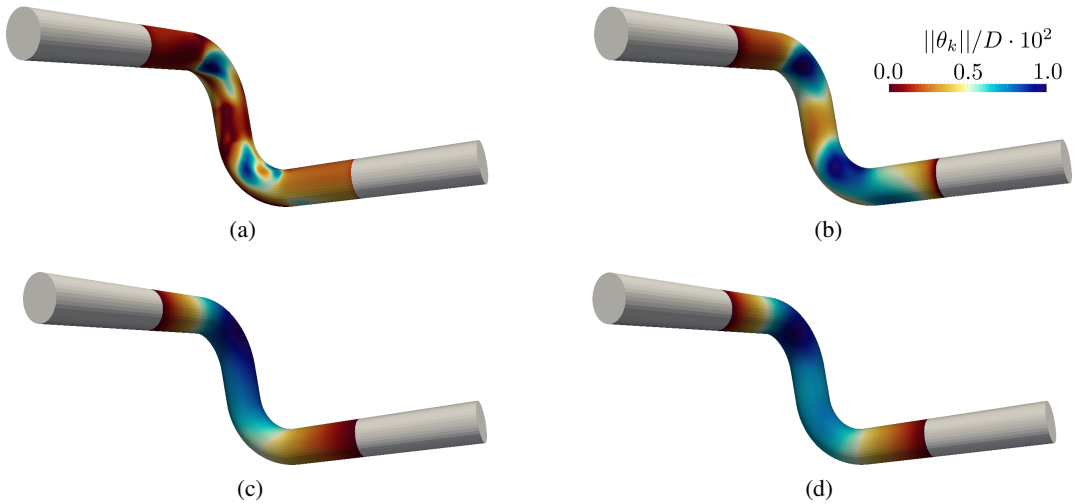


图21：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：沿设计区域的第一次形状更新的归一化位移幅值，分别对应(a) DS、(b) SLB（$A = D$）、(c) SP-WD和(d) PHD（$p = 4$）方法。

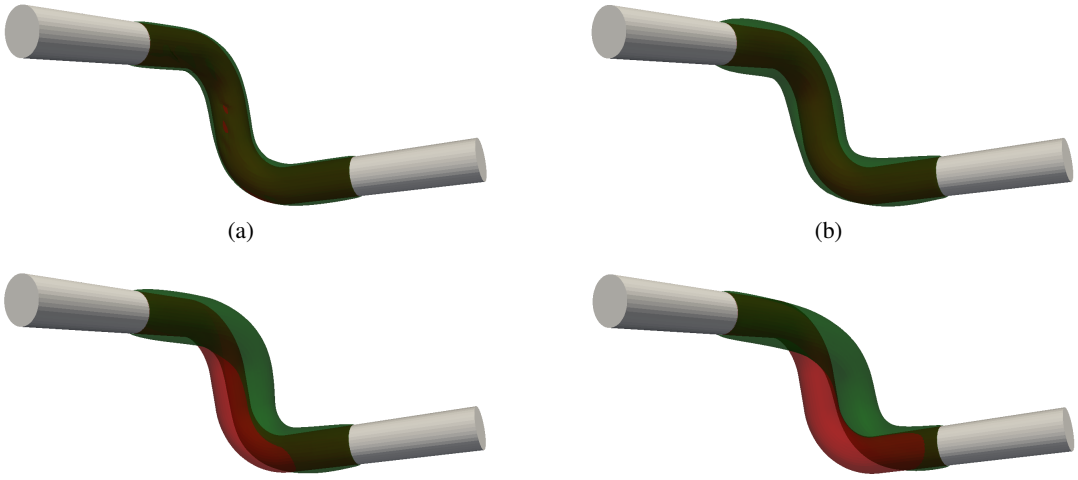


图22：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：基于（a）DS、（b）SLB（$A = D$）、（c）SP-WD 和（d）PHD（$p = 4$）方法的初始形状（红色）和优化后形状（绿色）。

表3：双弯管（$\mathrm{Re_D} = 500$）：五项优化研究的测得计算时间（CPUh）（$n^{\mathrm{opt}} \cdot \overline{t}^{\mathrm{wc}} \cdot n^{\mathrm{CPU}}$），其中 t^{wc}指每次原始/伴随运行的平均实际运行时间， n^{opt}和 n^{CPU}分别表示执行的优化步骤数和使用的CPU核心数。

方法	n^{opt} [-]	原始问题 $\overline{t}^{\mathrm{wc}}$[小时]	伴随问题 $\overline{t}^{\mathrm{wc}}$[小时]	CPU小时总计 [小时]
DS	42	0.1325	0.1176	10.5042
SLB ($A/D = 1$)	241	0.1005	0.0994	48.1759
VLB ($A/D = 1$)	235	0.0991	0.0981	46.342
SP-WD	441	0.1255	0.1109	86.9652
PHD（$p = 4$）	491	0.1914	0.1070	146.5144

所有方法的形状变化量（即所有有限体积之和）与形状变化次数的关系如图所示。基于 LB 的方法需要将相对体积增加约 55%，才能使相对代价泛函降低约 43%。另一方面，SP-WD 方法将约 40% 的相对体积变化几乎直接转化为同样约 40% 的相对目标函数下降。只有 PHD 和 DS 方法使代价泛函的降幅显著大于体积增幅。因此，PHD [DS] 方法在相对体积增加约 25% [17%]的情况下，实现了约 36% [26%]的相对目标函数下降。

由于本研究所需的计算开销高于前文所示的二维示例，因此比较各方法的计算时间颇有意义。表 3 对此进行了比较，并区分了原始模拟和伴随计算时间的平均值。对于所研究的过程，每次原始模拟前都会调整网格，因此，原始模拟的平均时间包括计算形状更新以及求解原始纳维–斯托克斯系统所需的时间（51）-（52）。所有情况下，伴随模拟的平均时间均约为 0.1 CPU小时。有趣的是，基于拉普拉斯–贝尔特拉米方法的优化，其数值略低于这一数值，而其他所有方法的数值则略高于这一数值。各原始纳维–斯托克斯近似的模拟时间大致相同，而基于体积的方法的计算时间则显著增加。其中，PHD 方法的计算开销尤其大，因为式（39）中的非线性方程需要通过皮卡线性化进行大量迭代，从而大幅增加了总模拟时间。

5.3 讨论

总的来说，本文展示的数值研究凸显了：对于同一个基于计算流体力学的优化问题，不同的形状更新不仅会影响目标函数下降曲线的陡峭程度，也会影响最终形状。从实践角度来看，我们发现，保持网格质量是所采用方法的瓶颈。事实上，可以通过辅助技术维持更好的网格质量，甚至推动未收敛的优化过程继续进行，

例如重新网格化或额外的人工平滑，不过这超出了本文的讨论范围。此外，值得注意的是，每次形状更新的计算成本并不相同；随着所用形状更新的复杂度增加，计算成本也会随之上升。最后，根据所呈现的结果，我们想强调，本文的目的并非全面比较不同形状更新的性能。相反，我们希望展示，多种实用的形状更新可能产生不同的形状，因为通常由于网格畸变问题，优化过程必须在达到最优形状之前停止。哪种形状更新能在网格严重劣化之前实现最大的下降，取决于具体应用。例如，通过比较本文展示的应用可以发现，VLB 在双弯管案例中的表现远优于在圆柱案例中的表现。

6 总结与结论

我们介绍了六种方法，用于在迭代优化算法中根据给定的灵敏度分布计算形状更新。为此，我们先从数学角度阐述了形状空间和黎曼形状梯度的理论，再从工程角度介绍这些方法。我们纳入了两种基于拉普拉斯-贝尔特拉米算子的经典希尔伯特方法变体，它们可产生一阶索伯列夫梯度（SLB 和 VLB）。作为比较，我们还考察了离散滤波技术和灵敏度的直接应用（FS 和 DS）。此外，我们研究了另外两种尚未广泛用于工程应用的方法（SP 和 PHD）。这两种方法可直接得出区域更新方向，因此无需额外步骤将形状更新方向扩展至区域内部。

通过一个说明性示例，我们展示了这些方法的典型表现。FS 方法和 DS 方法即使在不光滑或曲率较大的区域，也能找到最优形状；而 SP 方法得到的形状在这些区域则有所不同。对于 PHD、VLB 和 SLB 方法，可以使用参数 p 和 A来调节所得形状的光滑性。由于这一相对简单的问题可以进行重新网格化，因此网格质量并非问题。
对于未进行重新网格化的计算流体力学问题模拟，网格质量下降成了一个严重问题，阻碍了优化算法收敛。对于二维情形，PHD 方法使目标泛函下降得最快；然而，采用 SP 方法得到的目标泛函值最小，因为与所有其他方法相比，该方法能够在更多次迭代中保持合理的网格质量。对于三维情形，在目标泛函下降速度以及网格质量变得岌岌可危之前所能达到的最小值方面，VLB 和 SLB 方法均优于其他所有方法。

总之，我们观察到，这些方法的表现与所考虑的问题密切相关。我们建议优先采用 SP 方法，因为与 PHD 方法相比，其计算复杂度较低，而且无需像 SLB 和 VLB 方法那样，在第二步中将形状更新延拓至区域内部。对于特定应用场景，仍应比较后两种方法的表现——尽管需要单独执行延拓步骤，但由于下降速度更快，其总体计算成本仍可能低于 SP 方法。最后，我们建议不要采用 DS 方法，因为无论所处理的问题是什么，其网格质量表现都弱于其他所有方法。

致谢

本研究是研究生培训组“基于仿真的不确定条件下动态系统设计优化”（SENSUS）的一部分，该项目由汉堡州通过州级研究资助计划提供资助，项目编号为 LFF-GK11。

作者谨此感谢 NHR 中心 ZIB 和 G¨ottingen 提供 Lise 和 Emmy 高性能计算机的计算时间。这些中心由联邦教育与研究部以及参与 NHR 的各州政府共同支持（www.nhr-verein.de/unsere-partner）。

贡献

Lars Radtke: 构思、软件、形式分析、调查、撰写——初稿（第 1、3、4、6 节）、撰写——审阅与编辑、可视化、项目管理。**Georgios Bletsos, Niklas K¨uhl:** 构思、软件、形式分析、调查、撰写——初稿（第 5 节）、撰写——审阅与编辑、可视化。**TimSuchan:** 构思、形式分析、撰写——初稿（第 2 节）、撰写——审阅

与编辑 **Kathrin Welker:** 构思、形式分析、撰写——审阅与编辑、监督、项目管理、经费获取。**Thomas Rung, Alexander D¨uster:** 撰写——审阅与编辑、监督、项目管理、经费获取。

参考文献

[1] P.-A. Absil、R. Mahony 和 R. Sepulchre。矩阵流形上的优化算法。普林斯顿大学出版社，普林斯顿，新泽西州，2008。[2] G. Allaire、C. Dapogny 和 F. Jouve。形状与拓扑优化。载于 A. Bonito 和 R. Nochetto（编），《几何偏微分方程》，第二部分。爱思唯尔，2021。[3] G. Allaire、F. Jouve 和 A. Toader。使用灵敏度分析和水平集方法进行结构优化。《计算物理学杂志》，194(1):363–393，2004。[4] L. Ambrosio、N. Gigli 和 G. Savar´e。具有度量和可微结构的梯度流及其在 Wasserstein空间中的应用。《林琴科学院纪事：数学与应用》，15(3-4):327–343，2004。[5] H. Azegami 和 K. Takeuchi。形状优化的平滑方法：使用 Robin条件的牵引力法。《国际计算方法杂志》，3(01):21–33，2006。[6] H. Azegami 和 Z. Wu。线弹性问题中的区域优化分析：采用牵引力法的方法。《日本机械学会国际期刊》A辑，力学与材料工程，39(2):272–278，1996。[7] M. Bauer。《形状空间上的几乎局部度量》。博士论文，维也纳大学，2010。[8] M. Bauer、M. Bruveris 和 P. Michor。形状空间与微分同胚群几何概述。《数学成像与视觉杂志》，50(1-2):60–97，2014。[9] M. Bauer、P. Harms 和 P. Michor。曲面形状空间上的索博列夫度量。《几何力学杂志》，3(4):389–438，2011。[10] M. Bauer、P. Harms 和 P. Michor。形状空间上的索博列夫度量，II：加权索博列夫度量与几乎局部度量。《几何力学杂志》，4(4):365–383，2012。[11] M. Beg、M. Miller、A. Trouv´e 和 L. Younes。通过微分同胚的测地流计算大变形度量映射。《国际计算机视觉杂志》，61(2):139–157，2005。[12] J.-D. Benamou 和 Y. Brenier。Monge-Kantorovich质量传输问题的计算流体力学解法。《数值数学》，84(3):375–393，2000。[13] J.-D. Benamou、Y. Brenier 和 K. Guittet。Monge-Kantorovitch质量传输及其计算流体力学表述。《国际流体数值方法杂志》，40(1-2):21–30，2002。[14] S. Blauth。基于 Steklov– Poincar´e 型度量的偏微分方程约束形状优化非线性共轭梯度法。《SIAM 优化学报》，31(3):1658–1689，2021。[15] G. Bletsos、N. K¨uhl 和 T. Rung。用于最大限度减少生物医学应用中流致溶血的基于伴随方法的形状优化。《计算流体力学工程应用》，15(1):1095–1112，2021。[16] K.-U. Bletzinger。用于灵敏度滤波和最优形状顶点分配形变的一致框架。《结构与多学科优化》，49(6):873–895，2014。[17] F. Bookstein。标志点数据的形态测量工具。剑桥大学出版社，1997。[18] T. Cootes、C. Taylor、D. Cooper 和 J. Graham。主动形状模型——其训练与应用。《计算机视觉与图像理解》，61(1):38–59，1995。[19] K. Deckelnick、P. Herbert 和 M. Hinze。一种新的 $W^{1,\infty}$ Lipschitz区域形状优化方法。《ESAIM：控制、优化与变分法》，28(2):29，2021。[20] M. Delfour 和 J.-P. Zol´esio。形状与几何：度量、分析、微分学与优化。工业与应用数学学会，2011。[21] M. do Carmo。黎曼几何。Birkh¨auser，1992。[22] M. Droske 和 M. Rumpf。图像形态的多尺度联合分割与配准。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》，29(12):2181–2194，2007。[23] S. Durrleman、X. Pennec、A. Trouv´e 和 N. Ayache。基于流的曲线与曲面集合统计模型。《医学图像分析》，13(5):793–808，2009。

[24] S. Durrleman、X. Pennec、A. Trouv´e、P. Thompson 和 N. Ayache。从流的微分同胚变形推断脑部变异性：一种综合方法。《医学图像分析》，12(5):626–637，2008。[25] R. Errico。什么是伴随模型？《美国气象学会公报》，78(11):2577–2591，1997。[26] L. Evans。某些退化椭圆偏微分方程解的局部 $c^{1,\alpha}$ 正则性的新证明。《微分方程杂志》，45(3):356–373，1982。[27] M. Fuchs、B. J¨uttler、O. Scherzer 和 H. Yang。基于弹性变形的形状度量。《数学成像与视觉杂志》，35(1):86–102，2009。[28] C. Geiersbach、E. Loayza-Romero 和 K. Welker。随机建模下界面识别问题的计算方面，2019。[29] C. Geiersbach、E. Loayza-Romero 和 K. Welker。偏微分方程约束形状优化：迈向乘积形状空间与随机模型。载于 K. Chen、C.-B. Sch¨onlieb、X.-C. Tai 和 L. Younes（编），《计算机视觉与成像中的数学模型和算法手册》。Springer，2021。已接受发表。[30] C. Geiersbach、E. Loayza-Romero 和 K. Welker。形状空间优化的随机逼近。《SIAM 优化学报》，31(1):348–376，2021。[31] K. Giannakoglou 和 D. Papadimitriou。《形状优化的伴随方法》。载于 D. Th´evenin 和 G. Janiga（编），《优化与计算流体动力学》。Springer Berlin Heidelberg，2008。[32] M. Giles 和 N. Pierce。设计伴随方法简介。《流动、湍流与燃烧》，65(3):393–415，2000。[33] J. Glaun`es、A. Qiu、M. Miller 和 L. Younes。大变形微分同胚度量曲线映射。《国际计算机视觉杂志》，80(3):317–336，2008。[34] N. Goldammer 和 K. Welker。通过推广黎曼概念探索微分空间上的优化技术，2020。[35] J. Hadamard。《关于弹性固支板平衡分析问题的回忆录》。巴黎：国家印刷局，1909。[36] B. J. Hafner、S. G. Zachariah 和 J. E. Sanders。利用主成分表征三维解剖形状：在胫骨近端中的应用。《医学与生物工程及计算》，38(1):9–16，2000。[37] J. Heners、L. Radtke、M. Hinze 和 A. D¨uster。管道流流固耦合的伴随形状优化。《计算力学》，页码 1–18，2017。[38] M. Hinze、R. Pinnau、M. Ulbrich 和 S. Ulbrich。《偏微分方程约束优化》，第23卷。施普林格科学与商业媒体，2008。[39] S. Hofmann、M. Mitrea 和 M. Taylor。Lipschitz区域、Semmes-Kenig-Toro 区域及其他有限周长区域类别的几何与变换性质。《几何分析杂志》，17(4):593–647，2007。[40] D. Holm、A. Trouv´e 和 L. Younes。变形理论的 Euler-Poincar´e 理论。《应用数学季刊》，67(4):661–685，2009。[41] P. Iglesias-Zemmour。《微分学》。美国数学学会，2013。[42] H. Ishii 和 P. Loreti。当 p-拉普拉斯方程的 p 趋于无穷时解的极限及相关变分问题。《SIAM 数学分析杂志》，37(2):411–437，2005。[43] C. Kapellos、E. Papoutsis-Kiachagias、K. Giannakoglou 和 M. Hartmann。用于最小化流致声辐射的非定常连续伴随方法。《计算物理学杂志》，392:368–384，2019。[44] D. Kendall。形状流形、普罗克鲁斯提斯度量与复射影空间。《伦敦数学学会公报》，16(2):81–121，1984年3月。[45] M. Kilian、N. Mitra 和 H. Pottmann。形状空间中的几何建模。《ACM 图形学汇刊》（SIGGRAPH），26(3):#64，1–8，2007。[46] A. Kriegl。《整体分析的便利框架》。美国数学学会，1997。[47] J. Kr¨oger、N. K¨uhl 和 T. Rung。用于船舶水动力优化的伴随流体体积法。《船舶技术研究》，65(1):47–68，2018年1月。

[48] J. Kr¨oger 和 T. Rung。采用一致的基于核的灵敏度滤波实现无CAD流体动力学优化。《船舶技术研究》，62(3):111–130，2015。[49] N. K¨uhl。湍流两相纳维–斯托克斯系统约束下的基于伴随方法的形状优化。博士论文，汉堡工业大学，2021。[50] N. K¨uhl、J. Kr¨oger、M. Siebenborn、M. Hinze 和 T. Rung。流体体积法在不相溶流动中的伴随补充方法。《计算物理学杂志》，440:110411，2021。[51] N. K¨uhl、P. M¨uller 和 T. Rung。通用壁面动量定律的伴随补充方法。《流动、湍流与燃烧》，2021。[52] N. K¨uhl、P. M¨uller、A. St¨uck、M. Hinze 和 T. Rung。基于伴随方法的流体动力学形状优化中控制目标与力目标的解耦。《AIAA 学报》，57(9):4110–4114，2019。[53] N. K¨uhl、T. T. Nguyen、M. Palm、D. J¨urgens 和 T. Rung。自由漂浮船舶的伴随节点形状优化。《结构与多学科优化》，65:247，2022。[54] S. Kurtek、E. Klassen、Z. Ding 和 A. Srivastava。用于三维物体形状分析的新型黎曼框架。载于《2010 年 IEEE计算机学会计算机视觉与模式识别会议》。IEEE，2010。[55] S. Kushnarev。Teichons：通用 Teichm¨uller 空间上的类孤子测地线。《实验数学》，18(3):325–336，2009。[56] J. Kwak 和 S. Hong。《线性代数》。Birkh¨auser Boston，1997。[57] S. Lang。《微分几何基础》。Springer New York，1999。[58] J. Lee。《光滑流形导论》。Springer New York，2012。[59] H. Ling 和 D. Jacobs。使用内距离进行形状分类。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》，29(2):286–299，2007。[60] R. L¨ohner、O. Soto 和 C. Yang。用于CFD优化问题的基于伴随方法的设计方法。载于《第 41 届航空航天科学会议暨展览会》，内华达州里诺，第 299 页，2003。[61] R. L¨ohner 和 C. Yang。运动物体的改进ALE网格速度。《工程数值方法通讯》，12(10):599–608，1996。[62] MATLAB。版本 9.11.0 (R2021a)。MathWorks公司，美国马萨诸塞州纳蒂克，2021。[63] P. Michor 和 D. Mumford。子流形和微分同胚空间上的测地距离消失。《 Documenta Mathematica 》，10:217–245，2005。[64] P. Michor、D. Mumford、J. Shah 和 L. Younes。具有显式测地线的形状空间度量。《林琴科学院纪事：数学与应用》，19，2007 年 7 月。[65] P. Michor 和 M. Mumford。平面曲线空间上的黎曼几何。《欧洲数学学会杂志》，第 1–48 页，2006。[66] P. W. Michor 和 D. Mumford。使用哈密顿方法概述曲线空间士的黎曼度量。《应用与计算调和分析》，23(1):74–113，2007。[67] W. Mio、A. Srivastava 和 S. Joshi。关于平面弹性曲线的形状。《国际计算机视觉杂志》，73(3):307–324，2006。[68] B. Mohammadi 和 O. Pironneau。《流体应用形状优化》。牛津大学出版社，2010。[69] P. M¨uller、N. K¨uhl、M. Siebenborn、K. Deckelnick、M. Hinze 和 T. Rung。一种新型 p调和下降方法及其在流体动力学形状优化中的应用。《结构与多学科优化》，2021。[70] S. Onyshkevych 和 M. Siebenborn。利用非线性延拓算子保持网格质量的形状优化。《优化理论与应用杂志》，189(1):291–316，2021。[71] C. Othmer。用于计算管道流拓扑和表面灵敏度的连续伴随公式。《国际流体数值方法杂志》，58(8):861–877，2008。[72] E. Papoutsis-Kiachagias、V. Asouti、K. Giannakoglou、K. Gkagkas、S. Shimokawa 和 E. Itakura。基于连续伴随的汽车多工况气动形状优化。《结构与多学科优化》，59:675–694，2019 年 2 月。[73] D. Perperidis、R. Mohiaddin 和 D. Rueckert。心脏解剖结构四维统计图谱的构建及其在分类中的应用。载于 J. Duncan 和 G. Gerig 编，《计算机科学讲义》，第 402–410 页。Springer Berlin Heidelberg，2015。

[74] W. Ring 和 B. Wirth。黎曼流形上的优化方法及其在形状空间中的应用。《SIAM 优化学报》，22(2):596–627，2012。[75] M. Rumpf 和 B. Wirth。一种非线性弹性形状平均方法。《SIAM 影像科学学报》，2(3):800–833，2009。[76] M. Rumpf 和 B. Wirth。形状分析中的变分方法。载于 O. Scherzer 编，《数学成像方法手册》，第 1819–1858 页。Springer New York，2015。[77] T. Rung、K. W¨ockner、M. Manzke、J. Brunswig、C. Ulrich 和 A. St¨uck。海事计算流体力学应用的挑战与展望。《造船技术学会年鉴》，103:127–139，2009。[78] S. Schmidt、C. Ilic、V. Schulz 和 N. Gauger。基于形状微积分的三维大规模气动形状优化。《AIAA 学报》，51(11):2615–2627，2013。[79] S. Schmidt、E. Wadbro 和 M. Berggren。大规模三维声学号角优化。《SIAM 科学计算学报》，38(6):B917–B940，2016。[80] V. Schulz 和 M. Siebenborn。偏微分方程约束形状优化中表面度量的计算比较。《应用数学计算方法》，16(3):485–496，2016。[81] V. Schulz、M. Siebenborn 和 K. Welker。一种新型 Steklov-Poincar´e 型度量，可用于形状空间中的高效偏微分方程约束优化。arXiv，第 1–17 页，2015。[82] V. Schulz、M. Siebenborn 和 K. Welker。抛物型扩散问题中的结构化反问题建模。《SIAM 控制与优化学报》，53(6):3319–3338，2015。[83] V. Schulz、M. Siebenborn 和 K. Welker。基于 Steklov-Poincar´e 型度量的高效偏微分方程约束形状优化。《SIAM 优化学报》，26:2800–2819，2016。[84] V. Schulz 和 K. Welker。形状空间中的优化传递算子。载于 V. Schulz 和 D. Seck 编，《形状优化、均匀化与最优控制》，第 259–275 页。Springer International Publishing，2018。[85] E. Sharon 和 D. Mumford。使用保角映射进行二维形状分析。《国际计算机视觉杂志》，70(1):55–75，2006。[86] D. Shepard。用于非规则间距数据的二维插值函数。载于《1968 年第 23 届 ACM 全国会议论文集》，第 517–524 页，1968。[87] M. Siebenborn 和 K. Welker。形状空间优化中多重网格方法的算法方面。《SIAM 科学计算学报》，39(6):B1156–B1177，2017。[88] M. S¨ohn、M. Birkner、D. Yan 和 M. Alber。基于器官变形主特征模态的个体几何变化建模：实现与评估。《医学与生物学物理》，50(24):5893–5908，2005。[89] J. Sokolowski 和 J.-P. Zol´esio。《形状优化导论》。计算数学，第 16 卷。Springer，纽约，第一版，1992。[90] O. Soto 和 R. L¨ohner。流动灵敏度的边界计算，第 1–11 页。美国航空航天学会，2004。[91] E. Stavropoulou、M. Hojjat 和 K.-U. Bletzinger。针对基于节点的形状优化问题的平面内网格正则化。《计算力学与工程方法》，275:39–54，2014。[92] A. St¨uck 和 T. Rung。黏性有限体积压力修正方法的伴随补充方法。《计算物理学杂志》，248:402–419，2013。[93]A. Trouv´e 和 L. Younes。通过李群作用实现形变。《计算数学基础》，5(2):173–198，2005。[94] B. Upadhyay、S. Sonigra 和 S. Daxini。结构形状优化中的数值分析视角：2000 年以来的综述。《工程软件进展》，155:102992，2021。[95] M. Vaillant 和 J. Glaun`es。通过流进行曲面匹配。载于 G. Christensen 和 M. Sonka 编，《计算机科学讲义》，第 381–392 页。Springer Berlin Heidelberg，2005。[96] J. Vassberg 和 A. Jameson。气动形状优化第一部分：理论背景。《优化与多学科设计导论》，第 1–30 页，2006。[97] J. Vassberg 和 A. Jameson。气动形状优化第二部分：示例应用。《优化与多学科设计导论》，第 1–41 页，2006。[98] K. Welker。形状空间中的高效偏微分方程约束形状优化。博士论文，特里尔大学，2016。

[99] K. Welker. 适用于形状优化的空间。《应用数学与优化》，84(1):869–902, 2021.[100] B. Wirth, L. Bar, M. Rumpf, and G. Sapiro. 形状空间中测地线的连续介质力学方法。国际计算机视觉杂志，93(3):293–318, 2010.[101] S. Yakubov, B. Cankurt, M. Abdel-Maksoud, and T. Rung. 用于空化建模的欧拉–拉格朗日方法的MPI/OpenMP混合并行化。《计算机与流体》，80:365–371, 2013.[102] S. Yakubov, T. Maquil, and T. Rung. 使用基于压力的CFD方法对空化流进行欧拉–欧拉模拟的经验。《计算机与流体》，111:91–104, 2015.[103] J.-P. Zol´esio. 移动区域控制、形状稳定化与变分管状区域表述。载于K. Kunisch, J. Sprekels, G. Leugering, and F. Tr¨oltzsch（编），《数值数学国际丛书》，第329–382页。Birkh¨auser Basel，2007。