arXiv:2303.09760v1 [cs.LG] 17 Mar 2023

DIF融合最优拓扑：一种生成式优化方法

Giorgio Giannone[1,2,*], Faez Ahmed[1]

[1]麻省理工学院，剑桥，马萨诸塞州[2]丹麦技术大学，灵比，丹麦

摘要

拓扑优化旨在寻找满足一组约束且系统性能最大化的最佳设计。传统的迭代优化方法（如 *SIMP*）计算开销较大，且容易陷入局部最优，从而限制了其在复杂或大规模问题中的适用性。为加速拓扑优化过程，研究人员开发了基于学习的方法，但当遇到分布外的约束构型时，这些方法可能生成含有悬浮材料、性能较低的设计。近年来，以生成对抗网络和扩散模型为代表、以约束和物理场为条件的深度生成模型展现出良好的应用前景，但它们需要大量预处理，并依赖代理模型来提升性能。为解决这些问题，我们提出一种生成式优化方法，将 *SIMP* 等经典优化方法作为精细化机制，用于优化深度生成模型生成的拓扑。我们还采用一种受经典常微分方程解启发、计算开销较低的近似方法，免去对物理场进行条件化的需求，并减少生成可行且高性能拓扑所需的步数。我们的方法能够高效生成优良拓扑，并明确引导其进入可制造性高、性能优异的区域，无需外部辅助模型或额外的标注数据。我们认为，该方法能够推动工程应用中结构设计与优化领域取得重大进展，并可应用于更广泛的性能导向型工程设计问题。

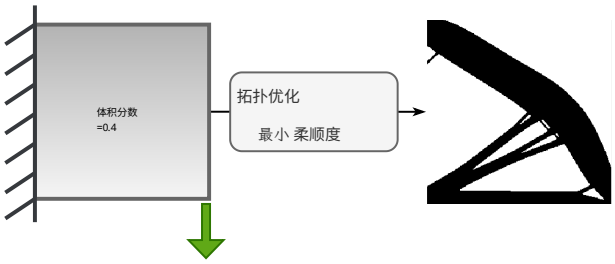

图 1： 最小柔度拓扑优化问题。给定一组约束（载荷、边界条件、体积分数），寻找能够使目标性能（结构柔度）最小化的最优拓扑。

1. 引言

拓扑优化（TO [1, 2]）是一种重要的工程工具，能够帮助找到满足性能目标和约束条件的最佳材料分布。约束可以有多种形式，例如载荷、边界条件和体积分数。拓扑优化可以显著提升效-

结构在航空航天、汽车、土木和机械工程等多个领域的效率、安全性、可靠性和耐久性。为推动新时期工程探索中的设计工程发展，对拓扑优化技术的改进需求日益增长。拓扑优化采用有限元分析（FEA），基于梯度的 [1]和无梯度方法 [3] 是两种主要途径。带惩罚的各向同性固体材料法（SIMP） [4, 5] 是应用最广泛的基于梯度的优化算法之一。SIMP采用迭代优化方法，对连续的基于密度的表示进行优化，以确定最佳材料分布。这类方法通过迭代调整给定区域内的材料密度，检查设计是否满足预期约束。

基于迭代优化的拓扑优化（TO）方法具有巨大潜力，但在实际应用中面临挑战，尤其是在大型问题上，其计算复杂度较高。SIMP 等迭代算法计算成本高昂，且容易陷入局部最优解，从而限制了对全局最优解的搜索。为应对这些挑战，近年来人们对用于拓扑优化的基于学习的方法产生了浓厚兴趣。这些方法使用机器学习（ML）算法（例如深度生成模型）来加速优化

*通讯作者：ggiorgio@mit.edu, faez@mit.ed u

预印本。

过程并生成更多样化的结构拓扑。通过利用现有设计的大型数据集，机器学习模型能够快速识别模式，并生成满足指定约束的新设计。与传统优化方法相比，机器学习方法能够处理高维数据、探索更广泛的设计方案，并提供以往可能未曾考虑过的更多样化结果。SolidWorks 等公司和 nTopology 等初创企业正在将深度生成式拓扑优化集成到其产品中，为设计师增添灵活性与创造力，并加快候选方案生成阶段。

用于拓扑优化的深度生成模型。 深度生成模型（DGMs [6]）已展现出以高保真度和多样性建模高维复杂数据模态（如图像或文本）的卓越能力。这种能力为未来几年各领域在创造力和生产力方面的显著提升开辟了道路。大型视觉模型 [7]）和语言模型 [8]）的最新进展大幅提升了我们处理非结构化数据的能力，并推动了多模态生成技术 [9]的发展。这些模型在增强工程设计 [10, 11]方面前景广阔。在这些成果的基础上，深度生成模型也已应用于工程领域中受约束的问题，重点在于改进设计流程。然而，这些应用主要关注重建质量等指标，尚未充分解决工程要求的满足问题。

用于拓扑优化的深度生成模型在性能和可制造性方面面临挑战，TopologyGAN [12], 通过以基于物理的信息进行条件化来应对这些挑战。通过引入冯·米塞斯应力、应变能密度和位移场等物理场，TopologyGAN 提高了生成样本对底层工程问题的符合程度。然而，计算这些物理场需要针对所考虑的每种载荷和边界条件配置执行计算成本高昂的有限元分析（FEA），尽管使用基础模型（条件生成对抗网络）采样新的拓扑结构速度很快。这种方法虽然已取得成功，但仍优化的是逐像素的重建损失，未考虑高性能和可行性等工程要求。尽管以物理场进行条件化，这些模型生成的许多设计仍存在妨碍可制造性的悬浮材料，以及多样性和分布外泛化能力有限等问题。

TopoDiff [13] 提出了一种条件扩散模型，以场作为条件，方式类似于 [12], ，并加入了额外的引导机制，促使生成过程在可制造性高且性能优异（在此特定情况下即柔顺度低）的区域进行采样。这项工作解决了与性能和可行性相关的一些问题，但代价是采样速度较慢，仍依赖计算成本高昂的物理场，并引入代理模型来评估性能和可制造性。在推理过程中，模型必须计算应变和力场：针对每种约束配置使用有限元分析（FEA）进行计算，并利用这些信息对模型进行条件化，使其能够生成满足指定要求的优化后拓扑结构。这一条件化步骤对于确保模型表现良好，并生成既可行又经过优化的输出至关重要，但同时也成本高昂，且难以扩展至更高维度、复杂结构和三维域。

总而言之，基于生成对抗网络的方法（例如 [12, 14] 中提出的方法）能够高效生成大量拓扑结构，但可能产生不可制造的拓扑结构，违反体积分数误差等软约束，并导致柔顺度更高的结构。另一方面，像 TopoDiff [13] 这样的基于扩散的方法能够生成更准确地满足约束的样本，但由于迭代采样、依赖物理场以及需要带有辅助标注数据的代理模型，计算成本较高。

为克服现有方法的局限性，我们提出了一种新方法，以解决采样速度慢、依赖物理场以及需要额外代理模型等问题。我们的方法通过减少采样所需的步数，利用基于经典常微分方程解且计算成本低廉的核来近似物理场，并结合 SIMP 等优化方法来细化生成的拓扑。只需少量优化步骤，明确引导生成的拓扑趋向可制造性高、柔顺度低的区域，即可高效采样出优质拓扑结构，而无需外部辅助模型、用于预处理的有限元求解器或额外的标注数据。

贡献。 我们的贡献如下：

- 在保持高性能的同时，我们降低了生成式拓扑优化的计算成本。为此，我们探索了适用于 TopoDiff 的更高效采样方法，将生成所需的步数减少了一个数量级，同时确保所有模型的性能损失都极小。

- 我们探索了替代性的条件化技术，无需计算力场和能量应变场，从而消除了优化过程中的一个主要瓶颈。因此，与基线方法相比，我们将生成的推理时间缩短了 53.93%。

- 我们提出了一种生成式优化方法，将条件扩散模型与传统拓扑优化算法相结合。快速条件扩散模型预测初步拓扑，随后仅需几步（5-10 次迭代）即可使用传统的基于拓扑优化的方法对其进行优化。对于分布内和分布外约束，该方法分别将可制造性和性能提升了 23.81% 和 25.64%。

2. 相关工作

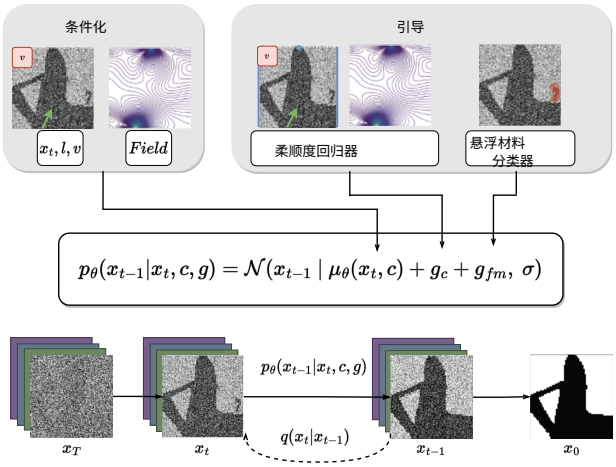

图 2： TopoDiff-GUIDED。TopoDiff 是一种由分类器和回归得分引导的条件扩散模型。条件化机制$\boldsymbol{c}$ 涉及载荷$\boldsymbol{l}$、体积分数$\boldsymbol{v}$以及应力场和能量场$\boldsymbol{f}$，即$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{l}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{f})$。引导机制包含一个用于判断是否存在悬浮材料的分类器，以及一个用于最小化生成的拓扑结构与优化后的拓扑结构之间合规误差的回归器。

拓扑优化。 工程设计是根据工程要求，为技术问题创造解决方案的过程 [15]。其目标是在满足所需约束的前提下，创造性能优异的设计。拓扑优化（TO [1]）是工程设计的一个分支，也是航空航天、汽车、制造业和软件开发等许多行业设计流程中的关键组成部分。自拓扑优化均匀化方法问世以来，人们提出了许多不同的方法，包括基于密度的方法 [4, 5], 水平集 [16],基于导数的方法 [17], 演化方法 [18], 以及其他方法 [19]。基于密度的方法应用广泛，采用基于节点的表示；水平集方法则利用形状导数来获得最优拓扑。拓扑优化已发展成为一门计算密集型学科，同时也涌现出高效的开源代码 [20, 21]。有关这一主题的更多内容，请参见 [21]；有关拓扑优化领域的全面综述，请参见 [2]。

用于拓扑优化的深度学习。深度学习（DL）在视觉领域取得成功后，近年来人们对将这些方法迁移到工程领域的兴趣日益高涨。具体而言，深度学习方法已用于直接设计 [22], 加速优化过程 [23],优化形状 [24], 超分辨率 [25, 26], 以及三维拓扑结构 [27]。在这些方法中，深度生成模型（DGMs）尤其有望提升工程设计中的设计多样性[28, 29]。此外，深度生成模型还被用于以约束（载荷、边界条件、结构情形的体积分数）为条件的拓扑优化问题，直接生成拓扑结构 [30, 31] 基于优化后拓扑结构的训练数据集，利用超分辨率方法提升保真度 [32], 采用滤波和迭代设计方法 [33] 以提升质量和多样性。针对三维拓扑结构的方法也已被提出 [14]。近期，基于生成对抗网络的方法通过以约束和物理信息为条件，在拓扑优化问题建模方面取得了成功 [12]。有关该领域的全面综述与评论，请参见 [34]。

条件扩散模型。提升扩散模型的采样速度是一个活跃的研究课题 [35]。近年来，蒸馏已被用于大幅减少采样步数 [36]。已有研究提出了对 DDPM 进行条件化的方法，包括在推理时间进行条件化 [37], 、学习类别条件得分 [38], 、显式地以类别信息为条件 [39], 、使用基于集合的特征 [40], 以及物理属性 [41]。近期提出的文生图扩散模型 [42] 可用于引导生成。近期，TopoDiff [13] 表明，条件扩散模型能够有效生成满足约束、具有高可制造性和高性能的拓扑结构。TopoDiff 利用物理信息和代理模型，引导采样生成性能良好的新型拓扑结构。

3. 背景

在此，我们简要介绍拓扑优化问题 [1], 扩散模型 [43], 这一类深度生成模型、扩散模型的条件化与引导机制，以及近期用于拓扑优化的深度生成模型 [12, 13]。

拓扑优化问题。拓扑优化（TO）是一种强大的计算设计方法，用于在给定一组约束的情况下，确定给定结构的最优配置。拓扑优化的目标是在确保结构满足特定性能要求的同时，找出材料的最高效用法。拓扑优化的一种常见方法是 SIMP（带惩罚的各向同性固体材料法）方法 [4]。SIMP方法通过密度场对材料属性进行建模，其中密度表示给定区域内材料所占的比例。优化过程通过迭代调整密度场来进行，同时满足应力和边界条件等各种约束。机械系统的一般最小柔顺度问题的目标是求出材料密度分布$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$，使其在规定的边界和载荷条件下将结构的变形降至最低 [2, 21]。给定一组设计变量$\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=0}^n$，其中 n 为域维数（在本例中 $n = 64{*}64$），最小柔顺度问题（图1）可写为：

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & c(\mathbf{x}) = F^T U(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & v(\mathbf{x}) = v^T \mathbf{x} < \bar{v} \\ & 0 \le \mathbf{x} \le 1 \end{aligned} \tag{1}$$

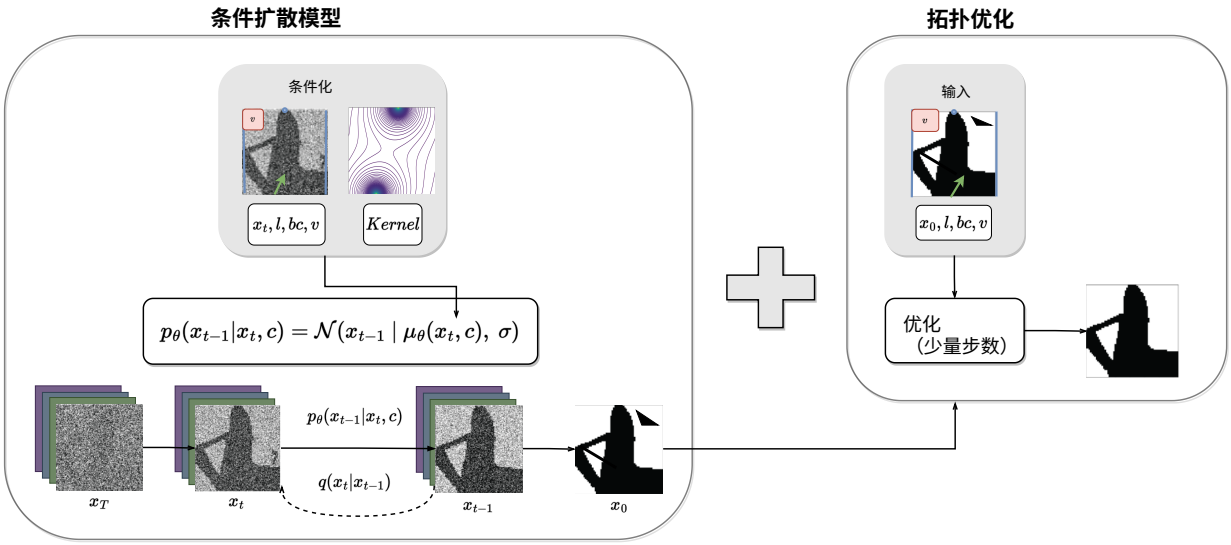

图 3： TopoDiff-FF + SIMP。TopoDiff-FF 流程是一种条件扩散模型，其条件输入是计算成本较低的核松弛，而不像 TopoDiff 那样使用计算成本高昂的有限元分析来获取应力和能量场。生成后，我们可以通过少量 SIMP 步数（5/10 次迭代）改进生成的拓扑，以去除悬浮材料并显式优化性能（最小化结构柔度）。

	载荷边界条件	核载荷	核边界条件	力场	能量场	体积分数	性能
SIMP [1]	✓	✓	✗	✗	✗	✗	✓	✓
TopologyGAN [12]	✓	✓	✗	✗	✓	✓	✓	✗
TopoDiff [13]	✓	✓	✗	✗	✓	✓	✓	✗
TopoDiff-GUIDED [13]	✓	✓	✗	✗	✓	✓	✓	✓
TopoDiff-FF（我们的）	✓	✓	✓	✓	✗	✗	✓	✗
TopoDiff-FF + SIMP（我们的）	✓	✓	✓	✓	✗	✗	✓	✓

表1： 不同优化方法和模型配置的条件化变量与引导变量。所有模型都直接或间接以载荷、边界条件和体积分数为条件。TopologyGAN、TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 还以应力和能量场为条件，而 TopoDiff-FF 则以核为条件。TopoDiff-GUIDED、TopoDiff- FF + SIMP 以及 SIMP 本身均由性能度量引导。

目标是找到使柔顺度 $c(\mathbf{x})$ 最小的设计变量，同时满足约束。 F 是施加的载荷张量， $U(\mathbf{x})$ 是节点位移，是平衡方程 $K(\mathbf{x})U(\mathbf{x})$ 的解，其中 $K(\mathbf{x})$ 是刚度矩阵，并且是所考虑材料的函数。$v(\mathbf{x})$ 是所需的体积分数。该问题是对拓扑优化任务的松弛处理，其中设计变量在 0 到 1 之间连续取值。通过简单的阈值机制，确定设计域中每个节点处是否存在材料。拓扑优化的一项重要优势是能够创建满足特定性能要求的优化结构。然而，拓扑优化的一大缺点是计算量可能很大，且可能需要大量计算资源。此外，某些拓扑优化方法生成高度复杂几何形状的能力可能有限，并且可能陷入局部极小值。

扩散模型。 令 $\mathbf{x}$ 表示观测数据，它可以是连续的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ 或离散的 $\mathbf{x} \in \{0, ..., 255\}^D$。令 $\mathbf{z}_1, ..., \mathbf{z}_T$ 表示 T 中的潜变量 $\mathbb{R}^D$。现在，我们介绍前向过程（即扩散过程） q、反向过程（即生成过程） p_θ 以及目标函数 L。前向过程（即扩散过程） q 定义为 [44]:

$$q(\mathbf{z}_{1:T}|\mathbf{x}) = q(\mathbf{z}_1|\mathbf{x}) \prod_{t=2}^{T} q(\mathbf{z}_t|\mathbf{z}_{t-1}), \tag{2}$$

$$q(\mathbf{z}_t|\mathbf{z}_{t-1}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_t|\sqrt{1-\beta_t}\,\mathbf{z}_{t-1}, \beta_t I) \tag{3}$$

β调度 β_1， β_2..... β_T 的选择方式使得最终的潜图像 $\mathbf{z}_T$ 近似于高斯噪声。生成过程或逆过程 p_θ 定义如下:

$$p_\theta(\mathbf{x}, \mathbf{z}_{1:T}) = p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1) p(\mathbf{z}_T) \prod_{t=2}^{T} p_\theta(\mathbf{z}_{t-1}|\mathbf{z}_t), \tag{4}$$

$$p_\theta(\mathbf{z}_{t-1}|\mathbf{z}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_{t-1}|\mu_\theta(\mathbf{z}_t, t), \sigma_t^2 I), \tag{5}$$

其中 $p(\mathbf{z}_T) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_T|0, I)$，且 σ_t^2通常是固定的（例如设为$\sigma_t^2 = \beta_t$）。神经网络 $\mu_\theta(\mathbf{z}_t, t)$ 在所有

时间步中共享，并以 t为条件。模型使用证据下界的重加权版本进行训练，该版本与去噪分数匹配相关 [45]。负证据下界 L 可写为

$$\mathbb{E}_q\left[-\log\frac{p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z}_{1:T})}{q(\mathbf{z}_{1:T}|\mathbf{x})}\right]=L_0+\sum_{t=2}^{T}L_{t-1}+L_T, \quad (6)$$

其中 $L_0=\mathbb{E}_{q(\mathbf{z}_1|\mathbf{x})}[-\log p(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1)]$ 是似然项（由离散高斯分布参数化），并且如果$\beta_1,...\beta_T$固定，则 $L_T=\mathbb{KL}[q(\mathbf{z}_T|\mathbf{x}),p(\mathbf{z}_T)]$ 是一个常数。对于 $t=2,...,T$，各项 L_{t-1} 可写为:

$$\begin{aligned}L_{t-1}&=\mathbb{E}_{q(\mathbf{z}_t|\mathbf{x})}\left[\mathbb{KL}[q(\mathbf{z}_{t-1}|\mathbf{z}_t,\mathbf{x})\mid p(\mathbf{z}_{t-1}|\mathbf{z}_t)]\right]\\&=\mathbb{E}_{q(\mathbf{z}_t|\mathbf{x})}\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\|\mu_\theta(\mathbf{z}_t,t)-\tilde{\mu}(\mathbf{z}_t,\mathbf{x})\|_2^2\right]+C_t\,,\end{aligned} \quad (7)$$

其中 $C_t=\frac{D}{2}\left[\frac{\tilde{\beta}_t}{\sigma_t^2}-1+\log\frac{\sigma_t^2}{\tilde{\beta}_t}\right]$。进一步应用重参数化技巧 [46]，后，各项 $L_{1:T-1}$ 可改写为对添加到$\mathbf{x}$ 中的噪声 ϵ 的预测，该噪声出现在 $q(\mathbf{z}_t|\mathbf{x})$ 中。使用噪声预测 ϵ_θ对 μ_θ 进行参数化，我们可以写成

$$L_{t-1,\epsilon}(\mathbf{x})=\mathbb{E}_{q(\epsilon)}\left[w_t\|\epsilon_\theta(\mathbf{z}_t(\mathbf{x},\epsilon))-\epsilon\|_2^2\right], \quad (8)$$

其中 $w_t=\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2\alpha_t(1-\bar{\alpha}_t)}$，这对应于证据下界目标函数 [47]。

条件化。同样，引入条件变量$\mathbf{c}$后，条件建模可写为

$$p_\theta(\mathbf{x},\mathbf{z}_{1:T}|\mathbf{c})=p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}_1,\mathbf{c})p_\theta(\mathbf{z}_T|\mathbf{c})\prod_{t=2}^{T}p_\theta(\mathbf{z}_{t-1}|\mathbf{z}_t,\mathbf{c}), \quad (9)$$

类似地，我们可以用噪声预测来写出逐层损失:

$$L_{t-1,\epsilon}^{c}(\mathbf{x})=\mathbb{E}_{q(\epsilon)}\left[w_t\|\epsilon_\theta(\mathbf{z}_t(\mathbf{x},\epsilon),\mathbf{c})-\epsilon\|_2^2\right]. \quad (10)$$

现在我们将讨论对模型进行条件化的不同方法。

引导。训练后，在条件扩散模型中使用引导来权衡样本保真度与模式覆盖率 [48, 49]。分类器引导 [48] 基于贝叶斯反演，以及逆问题在扩散模型中相对容易处理这一事实。具体而言，引导的目标是使模型均值 μ_θ 更接近目标引导$\mathbf{c}$。分类器引导的基本思路是利用贝叶斯反演

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{g})\propto p(\mathbf{g}|\mathbf{z})p(\mathbf{z}), \quad (11)$$

并注意到，训练条件模型 $p(\mathbf{z}|\mathbf{g})$ 等价于训练无条件模型 $p(\mathbf{z})$ 和分类器$p(\mathbf{g}|\mathbf{z})$。因此，训练信号将由模型的无条件分数和条件分数组合而成。通过求梯度可以看出，分类器引导会针对每个类别 [48] 调整无条件分数。我们可以利用类似的思路来处理可行与不可行设计。根据类似的推理，回归引导 [13], 旨在引导采样过程，使构型朝着回归误差较低的目标发展。具体而言，生成拓扑结构时，回归目标是降低预测柔顺度（由回归模型预测）与真实柔顺度（通过运行有限元求解器获得）之间的柔顺度误差。引导有助于减少模型生成的高柔顺度构型。

TopoDiff。条件扩散模型已被用于满足性能要求的受约束工程问题。TopoDiff [13] 提出了类似于 [12]的做法，以载荷、体积分数和场作为条件，学习受约束的生成模型（图2）。具体而言，生成模型可写为:

$$p_\theta(\mathbf{x}_{t-1}|\mathbf{x}_t,\mathbf{c},\mathbf{g})=\mathcal{N}(\mathbf{x}_{t-1}\mid\mu_\theta(\mathbf{x}_t,\mathbf{c})+\mathbf{g}_c+\mathbf{g}_{fm},\,\sigma), \quad (12)$$

其中，$\mathbf{c}$ 是一个条件项，是载荷l、体积分数 v和场 f 的函数，即 $\mathbf{c}=h(l,v,f)$。所考虑的场包括冯·米塞斯应力 $\sigma_{vm}=(\sigma_{11}^2-\sigma_{11}\sigma_{22}+\sigma_{22}^2+3\sigma_{12}^2)^{1/2}$ 和应变能密度场$W=(\sigma_{11}\epsilon_{11}+\sigma_{22}\epsilon_{22}+2\sigma_{12}\epsilon_{12})/2$。这里，$\sigma_{ij}$ 和ϵ_{ij} 分别是区域上的应力和能量分量。$\mathbf{g}$ 是一个引导项，其中包含引导采样过程朝向悬浮材料较少的区域的信息（使用分类器和$\mathbf{g}_{fm}$），以及朝向柔顺度误差较小的区域的信息；在这些区域中，生成的拓扑结构接近优化后的拓扑结构（使用回归模型和$\mathbf{g}_c$）。条件化$\mathbf{c}$始终存在并在训练期间应用，而引导机制$\mathbf{g}$ 是可选的，仅在推理时应用。

局限性。 TopoDiff 是一种有效的方法，可生成满足约束且柔顺度误差较小的拓扑结构。然而，该生成模型的计算开销较大，因为每个样本都需要对数百层进行采样。此外，该模型需要使用有限元求解器对构型进行预处理，这一过程同样计算开销大且耗时较长。这种方法高度依赖对区域输入的细粒度知识，因此在更具挑战性的拓扑问题中的适用性有限。此外，该模型需要训练两个代理模型（一个分类模型和一个回归模型），这有助于处理分布外配置。然而，训练回归模型需要额外的最优和次优拓扑结构，并假设能够获取训练集上的目标性能指标。同样，分类器也需要收集额外的标注数据。

4. 方法

我们的三个主要目标是：提高推理效率；在满足设计要求且尽可能减少性能下降的同时，缩短基于扩散的拓扑生成的采样时间；减少对力场和应变场作为条件信息的依赖，从而降低推理时间的计算负担，并减少为每个

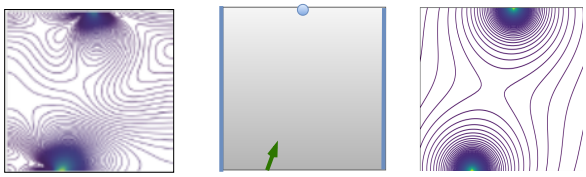

图 4： 场（左）与核（右）的条件化。计算场需要针对每种新配置求解一个计算成本高昂的迭代有限元分析问题，而计算核松弛只需一步，是一种计算开销低廉的近似方法，不依赖领域知识，且适用于任意分辨率或域结构。

类别	指标	Goal	是否具有挑战性?
硬约束	载荷违规	可行性	No
硬约束	悬浮材料	可制造性	Yes
软约束	体积分数	最低成本	No
功能性能	柔顺度误差	最大性能	Yes
建模要求	采样时间	快速推理	Yes

表 2： 用于拓扑优化的受约束生成模型的设计与建模要求。我们的目标是改进那些难以满足的要求。在这项工作中，我们重点改善悬浮材料问题、降低柔顺度误差并缩短采样时间。

问题和区域采用特设条件机制的需求；融合基于学习和基于优化的方法，对条件扩散模型生成的拓扑进行细化，从可制造性和性能方面改善最终解。我们旨在改进带约束的生成模型，并消除将计算成本高昂的有限元法（FEM）解用作条件机制的需要。我们将这种方法称为 Topo Diff-FF，即 Topology-Diffusion-Fields-Free 的简称；将采用基于优化的细化的方法称为 TopoDiff-FF +SIMP。

基于硬约束与软约束进行条件化。 所有模型均基于载荷、边界条件和体积分数进行条件化。此外，TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 还基于力场和能量应变进行条件化，而 TopoDiff-FF 则基于核松弛进行条件化，下一段将对此进行讨论（见图 4）。

格林函数。 为了提高基于扩散的拓扑生成效率，并尽量减少对力场和应变场的依赖，我们旨在利用核来近似这些约束作用于区域的方式，从而放宽边界条件和载荷。核结构的一种可能选择受格林方法启发 [50],，该方法定义了积分函数，这些函数是时不变泊松方程的解 [51],；泊松方程是针对点源激励的拉普拉斯方程的一般化。泊松方程可写为 $\nabla_x^2 f(x) = h$，其中h 是强迫项，f 是定义在区域$\mathcal{X}$ 上的通用函数。该方程支配着自然界中的许多现象，其中一个特例是强迫项$h = 0$，此时得到拉普拉斯方程

这一公式常用于传热问题。格林方法是一种数学构造，可在事先不了解区域的情况下求解偏微分方程。通过这种方法得到的解称为格林函数 [52]。虽然一般而言，通过这种方法得到的解可能较为复杂，但对于一大类涉及约束和力、且可用点近似的物理问题，借助源与汇的概念可以推导出简单的函数形式。考虑一个以可行方式受到约束的层状域（例如梁或板）。若在该区域施加一个点源（例如作用在梁边缘或板中心的向下的力），如x_f所示，这种力可用狄拉克δ函数表示，$\delta(x - x_f)$。δ函数高度不连续，但具有强大的积分性质。特别是，$\int f(x)\,\delta(x - x_f)dx = f(x_f)$在区域$\mathcal{X}$ 上成立。受点集中力作用的时不变泊松方程，其解可写成格林函数解；该解仅取决于力的施加点与所考察位置之间的距离。具体而言：

$$\mathcal{G}(x, x') = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{|x - x'|}, \tag{13}$$

其中 $r = |x - x'| = \sqrt{|x_i - x_i'|^2 + |x_j - x_j'|^2}$。我们提出使用基于格林函数构建的核松弛，来近似作用于拓扑结构的力和载荷。尽管这种表述可能无法为一般载荷和边界条件提供正确解，但它使我们能够以较低的计算成本提供条件信息，同时遵循原有的物理和工程约束。通过利用这些思路，我们旨在增加用于对模型进行条件化的信息量，最终改进带约束的生成模型。

核松弛。 我们可以利用这些核构建一种核松弛方法，以对生成模型进行条件化（图 4）。其思路是将核用作边界条件和载荷作用于区域的方式的近似。具体而言，我们可以利用核将边界条件和载荷在区域内产生的影响表示为平滑函数。此方法无需通过计算成本高、耗时长的有限元分析（FEA）来提供条件信息。应用核松弛方法时，我们首先确定区域内源和汇的位置。然后，分别计算与载荷和边界条件对应的核。最后，将所得的核用作生成模型的条件信息。具体而言，我们将载荷视为源，将边界条件视为汇。对于载荷或源 p，以及 $r = |x - x^p| = \sqrt{|x_i - x_i^p|^2 + |x_j - x_j^p|^2}$，我们有：

$$K_l(x, x^p; \alpha, \beta) \propto (1 - e^{-\alpha/r^\beta})\,\bar{p}, \tag{14}$$

其中，$\bar{p}$ 是二维中一般力的模。请注意，对于 $r \to 0$，$K_l(x, x^p) \to p$，而对于 $r \to \infty$，$K_l(x, x^p) \to 0$。对于边界条件或汇：

$$K_{bc}(x, x^{bc}; \alpha, \beta) \propto e^{-\alpha/r^\beta}. \tag{15}$$

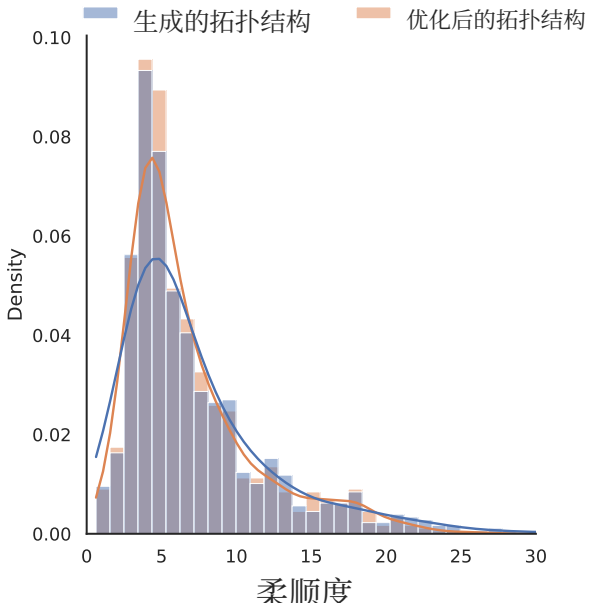

图 5： 任务2（未知约束）的生成与优化柔顺度经验分布直方图。可以看出，对于未见过的约束配置，生成的拓扑结构很好地匹配了柔顺度分布。

我们注意到，靠近边界时核为零，而离边界越远，核越趋近于 1。请注意，核中 α 和 β 参数的选择会影响核函数的平滑度和作用范围。通过调整这些参数，我们可以控制准确性与计算成本之间的权衡。此外，这些核是各向同性的，这意味着它们与应用方向无关。总的来说，核松弛方法提供了一种计算成本低廉的方式，可基于边界条件和载荷对生成模型进行条件约束，使其更适用于实际的工程和设计场景。

5. 实验

设置。 我们在 64×64 区域上使用 30000 个优化后的拓扑结构训练所有模型 200k 步。超参数、条件结构和训练流程均按照 [13]中的建议设置。所有模型都以体积分数和载荷作为条件。TopoDiff 还以应力场和能量场作为条件。TopoDiff-FF 以边界条件和核作为条件。TopoDiff-GUIDED 利用柔顺度回归器和悬浮材料分类器引导（CLS+REG）。所有实验均采用较少的采样步数。表 2 概述了本研究所考虑的不同模型和方法所使用的条件变量与引导变量。

数据集。 我们使用 [13] 中提出的 SIMP 优化方法收集的优化后拓扑结构数据集。对于每个拓扑结构，我们都掌握其加载条件、边界条件、体积分数和最优柔顺度信息。此外，对于每种构型，预处理步骤会计算力

截断值	10	25	50	100
$F(x)$	0.9871	0.9963	0.9985	0.9990

表3： 训练集上柔顺度截断值的累积分布函数。可以看到，训练集中超过99.90%的样本柔顺度低于100。

以及应变能场（见图4）。

评估。 我们采用工程指标和生成指标来评估模型的有效性。指标涵盖物理、工程和建模方面的要求，用于确定模型的整体性能。我们测量体积分数误差（VFE），即生成的拓扑结构体积与规定体积之间的偏差。我们还使用悬空材料（FM）评估模型的可制造性。对于性能评估，我们采用结构柔顺度指标 [2],，用于衡量指定约束下的总体位移。最小化柔顺度是拓扑优化的主要目标之一。我们计算所有任务的平均柔顺度和中位数柔顺度（平均 C、中位数 C）。我们还使用柔顺度误差（CE）评估工程性能，该指标用于确定 SIMP 优化方法计算出的柔顺度与扩散模型生成的柔顺度之间的偏差。此外，我们分析推理时间（包括预处理时间和采样时间），以确定模型快速创建概念设计的速度。为评估生成模型的性能，我们设计了三个测试任务：任务-1、任务2和任务-3。我们根据约束条件和预期的最优性能，将测试配置划分为不同组。表 4列出了这些任务。我们注意到，所有模型的载荷偏离（LD）均为零，这表明深度生成模型很容易满足这一硬性约束。

- 任务-1：任务-1测试集中的约束与训练集中的约束相同。在衡量此任务的性能时，我们会过滤掉生成的高柔顺度构型。
- 任务2：任务2测试集中的约束与训练集中的约束不同。在衡量此任务的性能时，我们会过滤掉生成的高柔顺度构型。
- 任务-3：任务-3 测试集中的约束与任务2中的相同。在衡量此任务的性能时，我们考虑所有生成的低柔顺度和高柔顺度构型。

这些任务旨在评估机器学习模型在分布内和分布外的泛化能力。通过在难度各异的不同测试集上测试模型，我们可以评估模型在新的、未见数据上的表现。更重要的是，我们希望了解在约束未知时，力场和能量应变所起的作用有多重要。

task	约束	性能	平均 C	中位数 C
任务-1	分布内	分布内	7.73	5.54
任务2	分布外	分布内	6.84	5.29
任务-3	分布外	分布外	6.85	5.31

表 4： 按模型面临的挑战程度排列的任务。我们预计模型在任务-1上表现良好，在任务2上表现尚可，而在任务-3上表现不佳。我们还报告了不同数据集上的平均柔顺度和中位数柔顺度，以衡量生成的拓扑结构的最优性。

5.1 分布内约束下的性能

表5 展示了不同模型变体在任务1的分布内约束下的评估结果，采用了柔顺度、柔顺度误差、体积分数误差和悬浮材料等多项指标。所有指标均是越低越好。评估的模型包括 TopoDiff、TopoDiff-GUIDED、TopoDiff-FF 和 TopoDiff-FF + SIMP (10)，其约束类型和引导方式各不相同。TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 以应力场和能量场为条件，其中 TopoDiff-GUIDED 利用代理模型（分类器和回归器）进行引导；TopoDiff-FF 则以核松弛为条件。表中显示，与 TopoDiff-FF 相比，TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 在柔顺度、柔顺度误差、体积分数误差和悬浮材料的大多数指标上数值更低。正如预期，TopoDiff-FF 模型的柔顺度误差较高，但 VFE 和 FM 与之相当，说明轻量级核松弛是一种可行的条件设定方式。此外，TopoDiff-FF + SIMP (10) 的柔顺度误差、体积分数误差和悬浮材料指标值最低。表中还报告了各模型的采样、预处理和推理耗时。即使将 TopoDiff 的采样步数减少至 100，TopoDiff-FF 的预处理和整体推理耗时仍显著更短，这是因为它无需进行有限元分析预处理。总体而言，结果表明，在分布内约束下，TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 的表现优于 TopoDiff-FF；而 TopoDiff-FF（以及 TopoDiff-FF+SIMP）在采样时速度快得多，并且在有限元分析不切实际或计算上不可行时，是一种可行的数据驱动替代方案。TopoDiff-FF+SIMP 的结果表明，结合深度生成模型与简化的迭代方法（SIMP），即使在分布内场景下与 TopoDiff 的差距并不显著，也能在柔顺度和设计要求方面取得更好的结果。

5.2 分布外约束下的性能

表6 报告了任务2在分布外约束下的结果。所考虑的模型、条件化和引导机制与第 5.1 小节中所述相同。结果表明，在分布外场景中，TopoDiff-GUIDED 模型优于 TopoDiff，其合规误差和 VFE 更低。TopoDiff-FF 在 VFE 和悬浮材料方面表现良好，但柔顺度表现不佳，合规误差较高。然而，TopoDiff-FF + SIMP (10) 模型显著提升了在任务2中各项指标均达到所有模型中的最低值，包括合规误差、VFE 和悬浮材料。对于任务-1，TopoDiff- FF 和 TopoDiff-FF+ SIMP 的推理时间远优于完整模型。总体而言，该表显示，使用引导和 SIMP 等优化技术，能够显著提升拓扑优化模型的性能，尤其是在面对分布外约束时。参见图9 ，其中以置信区间直观展示了五次运行的结果。

5.3 分布外约束和离群值下的性能

表7展示了任务-3在分布外且未滤除离群值（即柔顺度高、性能低的构型）情况下的结果。高柔顺度构型（>50/100）在训练集的柔顺度分布中属于分布外性能。特别是，表3显示，超过 99.8% 的构型柔顺度低于 50。这意味着，当我们获得柔顺度如此高的生成样本时，模型未能完全满足设计约束。所考虑的模型、条件化方式和引导机制与第5.1节所述相同。本表结果与任务2类似：在合规误差方面，TopoDiff-GUIDED 优于 TopoDiff，而 TopoDiff-FF 能实现高柔顺度。然而，使用 TopoDiff-FF+SIMP 不仅能改善所有指标，还能彻底消除这类离群构型，因此只需几次迭代，优化过程就能轻松修正生成的高柔顺度构型。相比之下，其他所有方法始终会产生柔顺度高且难以修正的拓扑结构离群值，这充分说明，在具有挑战性的场景中，将深度生成模型与拓扑优化相结合具有重要意义。

5.4 柔顺度分析

在此，我们讨论并研究柔顺度如何影响生成的拓扑质量。柔顺度大小似乎是影响所提设计的生成质量和可制造性的最重要因素。图5展示了定性信息，并给出了生成的拓扑结构与优化后的拓扑结构的经验性柔顺度分布。图7 和图6 柔顺度误差随柔顺度增大而增大，这表明模型难以生成满足设计要求的高柔顺度拓扑结构。数据集显示，具有高柔顺度的构型极少，这进一步佐证了这一点。这些发现凸显了高精度、高准确性地建模柔顺结构的难度，并表明可能需要采用其他技术或对模型进行修改来应对这一挑战。此外，模型生成高柔顺度拓扑结构的能力有限，可能会对现实应用产生重要影响，因为柔顺结构往往是工程设计中的关键组成部分。因此，提升模型生成高柔顺度拓扑结构的能力，是推动该领域最新技术水平发展的重要研究方向。

	任务	步数	约束	引导	平均 C ↓	中位数 C ↓	% 合规误差 ↓	% VFE ↓	% 悬浮材料 ↓	采样 ↓	处理 ↓	推理↓
TopoDiff	任务-1	100	场	COND	8.01	5.60	5.46	1.47	5.79	2.23	3.31	5.54
TopoDiff-GUIDED	任务-1	100	场	CLS+REG	8.15	5.63	5.93	1.49	5.82	2.46	3.31	5.87
TopoDiff-FF	任务-1	100	核	COND	9.76	6.31	24.90	2.05	8.15	2.23	0.12	**2.35**
TopoDiff-FF +SIMP(10)	任务-1	100	核	COND	8.05	5.77	**4.16**	**1.16**	**5.61**	2.23	0.32	2.55

表5： 不同模型变体在分布内约束下的评估。我们移除柔顺度为 >100 的样本。C：柔顺度。CE：柔顺度误差。VFE：体积分数误差。FM：悬浮材料。所有模型均使用 100 个采样步数。SIMP (10) 表示运行 SIMP 10 次迭代。结果为 5 次运行的平均值。有关带置信区间的总体概览，请参见图 9。

	任务	步骤	约束	引导	平均 C ↓	中位数 C ↓	% 合规误差 ↓	% VFE ↓	% 悬浮材料 ↓	采样 ↓	处理 ↓	推理↓
TopoDiff	任务2	100	场	COND	7.80	5.49	12.02	1.49	6.65	2.23	3.31	5.54
TopoDiff-GUIDED	任务2	100	场	CLS+REG	7.80	5.57	10.55	1.47	7.39	2.46	3.31	5.87
TopoDiff-FF	任务2	100	核	COND	11.65	6.94	58.36	1.97	7.86	2.23	0.12	**2.35**
TopoDiff-FF +SIMP(10)	任务2	100	核	COND	7.65	5.70	**7.84**	**1.29**	**6.53**	2.23	0.32	2.55

表6： 不同模型变体在分布外约束下的评估。我们移除了柔顺度 >100的样本。C：柔顺度。CE：柔顺度误差。VFE：体积分数误差。FM：悬浮材料。所有模型均使用100个采样步数。SIMP (10)表示我们运行SIMP 10次迭代。结果为5次运行的平均值。置信区间概览见图9右侧。

高柔顺度构型。高柔顺度构型通常与机械不稳定结构相关，这意味着它们在载荷作用下容易坍塌或变形。因此，实际工程设计通常优先考虑实现稳定、高效且轻量化的低柔顺度解。然而，研究高柔顺度构型仍然很重要，因为它们能够为了解结构系统的行为和局限性提供宝贵见解，也能启发新的设计概念和方法。图11展示了一些高柔顺度构型及其高柔顺度误差的示例。关于低柔顺度构型及其低柔顺度误差，请参见图12。

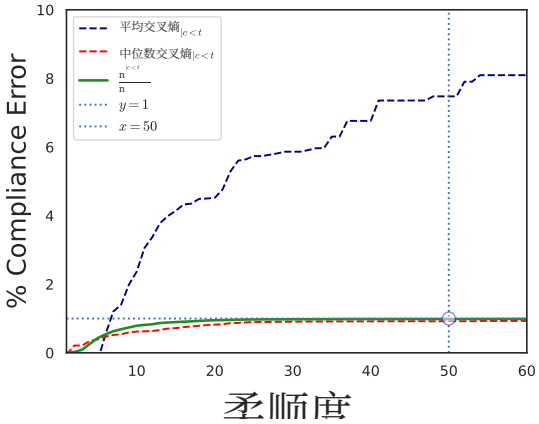

图6： 不同柔顺度阈值下的平均和中位数柔顺度误差。我们发现，超过99.8%的
柔顺度低于 50 的数据，以及均值柔顺度误差随柔顺度增加的变化情况，其中中位数柔顺度误差趋于平稳。

5.5 推理时间

其中， [13]已表明，基于 TopoDiff 的模型大幅优于基于拓扑 GAN 的模型 [12]

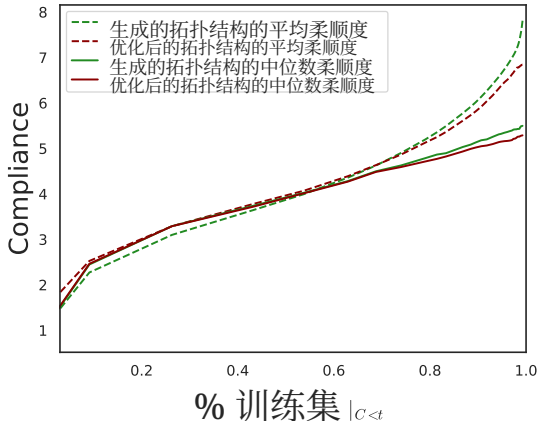

图 7： 任务2（未知）约束下，均值和中位数柔顺度随训练集比例变化的情况。使用 TopoDiff 生成的拓扑结构在低柔顺度值下表现良好。柔顺度方面的大部分损失发生在高柔顺度值下。

在分布内和分布外场景下的设计性能（合规误差、VFE、悬浮材料）方面，基于 GAN 的模型的推理时间仍远优于基于扩散的模型。本文提出了一种提高 TopoDiff-FF 推理效率的方法，并通过预处理时间和采样时间来衡量效率。具体而言，我们重点关注优化的两个方面：I）减少采样所需的步数，以缩短总体采样时间。II）利用核松弛技术，避免计算力场和能量场，从而缩短预处理时间。为展示该方法的有效性，我们在图中比较了 TopoGAN、TopoDiff 和 TopoDiff-FF 的预处理时间与采样时间。8。结果表明，TopoDiff-FF 能够生成高质量的样本，满足既定约束且性能优异，同时

	任务	步数	约束	引导	平均 C ↓	中位数 C ↓	% 合规误差 ↓	% VFE ↓	% 悬浮材料 ↓	采样 ↓	处理 ↓	推理 ↓
TopoDiff	任务-3	100	场	COND	8.91	5.52	31.04	1.49	6.61	2.23	3.31	5.54
TopoDiff-GUIDED	任务-3	100	场	CLS+REG	8.23	5.58	17.69	1.47	7.36	2.46	3.31	5.87
TopoDiff-FF	任务-3	100	核	COND	19.01	7.22	144.23	2.00	8.70	2.23	0.12	**2.35**
TopoDiff-FF +SIMP(10)	任务-3	100	核	COND	7.65	5.70	**7.84**	**1.29**	**6.53**	2.23	0.32	2.55

表7： 不同模型变体在分布外约束下的评估。我们不会过滤掉柔顺度较高的样本。C：柔顺度。CE：柔顺度误差。VFE：体积分数误差。FM：悬浮材料。所有模型均使用 100 个采样步数。SIMP (10) 表示我们对 SIMP 执行 10 次迭代。结果为 5 次运行的平均值。

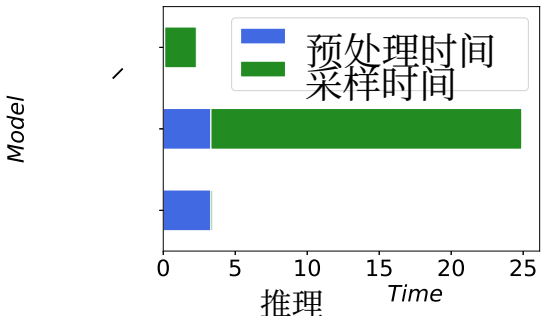

图 8： 采样时间。在此图中，我们比较了 TopoDiff、TopologyGAN 和 TopoDiff-FF 的总推理时间（预处理和采样时间）。可以看出，使用核松弛完全消除了预处理时间这一部分。此外，减少采样步数还能进一步缩短采样时间，使 TopoDiff-FF 相对更快，但代价是生成的构型比 TopoDiff 和 TopoDiff-GUIDED 具有更高的柔顺度。

与 TopoDiff 相比，预处理和采样所需时间均显著减少；与 TopoGAN 相比，所需时间也略少。提高效率是 TopoDiff- FF 的一项关键目标，因为这简化了条件化过程，并加快了推理速度。

5.6 衡量性能的相对差距

为了更好地总结模型在分布内和分布外约束下的结果，我们提出根据模型之间的相对设计差距来评估模型，采用全局指标考量表中列出的所有要求：2。我们还考察所考虑模型之间的相对排名（平均排名）。差距和排名是全局指标，考量了柔顺度、柔顺度误差、体积分数误差、悬浮材料、处理和推理时间。对于平均差距（平均差距），我们使用平均柔顺度和柔顺度误差。对于中位数差距（中位数差距），则使用相应的中位数值。设计差距是衡量与最优设计距离的代理指标；在最优设计中，所有要求都得到完美满足，柔顺度误差为零，推理时间可忽略不计。表 2比较了不同生成式设计条件化配置在任务-1和任务2上的性能。表中还显示了配置是否包含核和场约束。总体而言，各模型在任务-1上的平均差距和中位数差距相近，其中 TopoDiff-FF+SIMP (10) 的总体表现最佳。

在任务2上，TopoDiff-FF 因分布外数据上的合规误差较大，在平均差距方面表现较差。有趣的是，考察平均排名时，差距有所缩小，这是因为 TopoDiff-FF 的处理和推理时间较短。与此前的实验结果一致，采用 SIMP 的 TopoDiff-FF 在两项任务的设计质量和相对性能方面均优于所有其他模型，这表明将 SIMP 与深度生成模型结合，是生成高质量拓扑优化设计的一种有前景的方法。

	任务	核	场	中位数差距 ↓	平均差距 ↓	平均排名 ↓
TopoDiff	任务-1	✗	✓	3.12	4.38	2.2
TopoDiff-GUIDED	任务-1	✗	✓	3.16	4.52	3.2
TopoDiff-FF	任务-1	✓	✗	4.37	7.86	2.8
TopoDiff-FF +SIMP	任务-1	✓	✗	**2.69**	**3.57**	**1.6**
TopoDiff	任务2	✗	✓	3.35	5.58	2.2
TopoDiff-GUIDED	任务2	✗	✓	3.55	5.54	3.2
TopoDiff-FF	任务2	✓	✗	5.86	13.69	2.8
TopoDiff-FF +SIMP	任务2	✓	✗	**3.08**	**4.27**	**1.6**

表 8： 不同条件配置的全局概览，展示生成式设计与理想最优设计之间的差距。对于分布内配置，我们的方法非常有效。对于分布外配置，性能仍存在差距。通过添加少量 SIMP 步数（10 步）进行细化，可以有效提升设计质量。

5.7 深度生成模型与优化的融合

表9 展示了使用三种算法开展的实验结果：SIMP、TopoDiff-FF 和 TopoDiff-FF +SIMP，并在特定的数据划分上进行了测试。该表列出了每种算法在不同迭代次数下的两个指标值：平均 C 和柔顺度误差。显然，增加迭代次数可以提升所有算法的性能。此外，TopoDiff-FF 与 SIMP 的组合优于其他算法，在两项实验中均取得了最低的平均 C 和 CE 值。这些结果表明，使用 TopoDiff-FF 与 SIMP 的组合，可以在无需代理模型或引导的情况下，对模型施加性能约束。此外，我们可以确定某些物理属性得到了满足；通过快速且相对廉价的细化（5/10 次迭代），FM、VFE 和 CE 均有所降低。

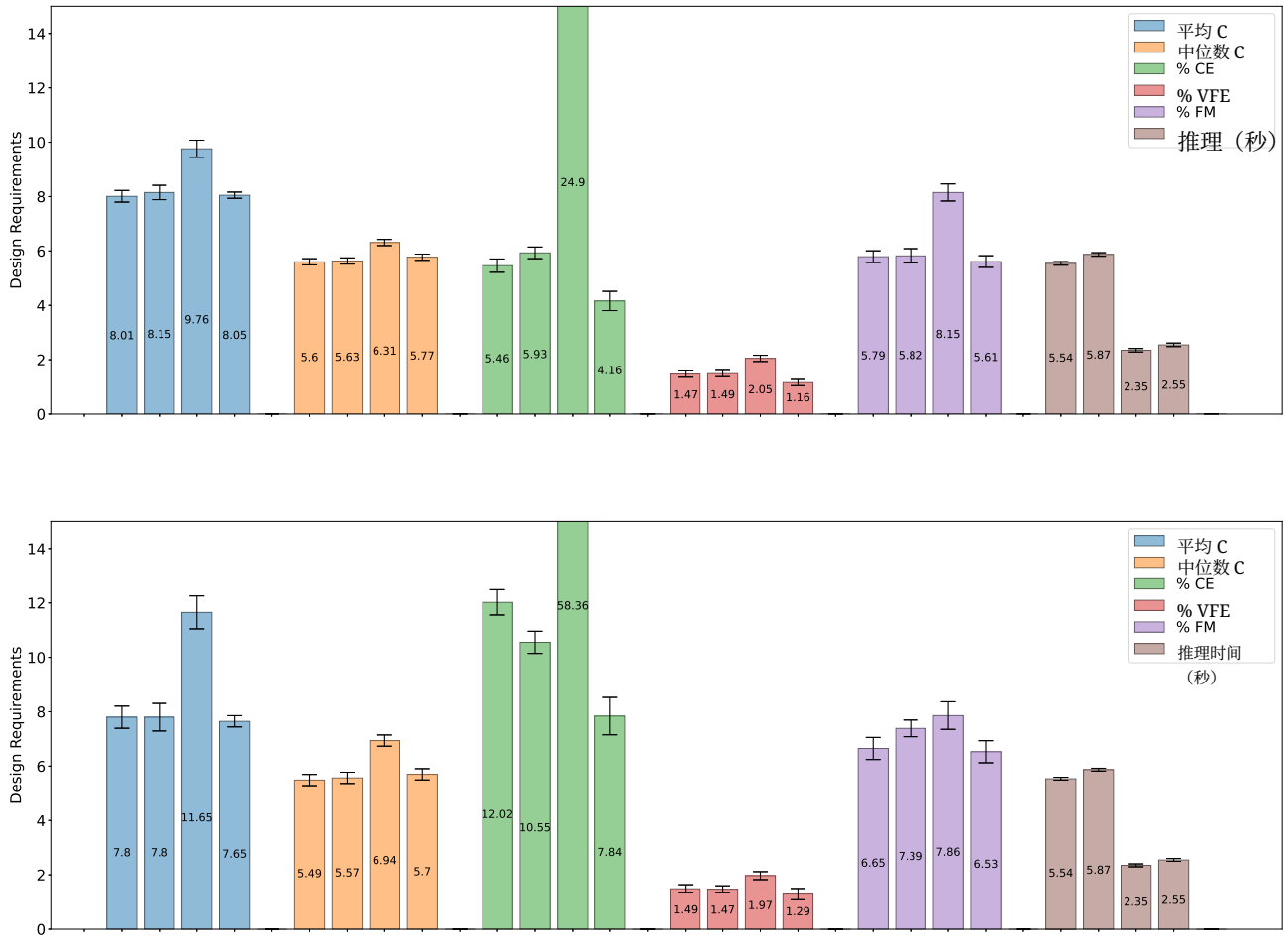

图9： 所考虑模型的设计要求概览：任务-1（分布内约束，顶部）和任务2（分布外约束，底部）。从左到右依次为：蓝色表示平均柔顺度，橙色表示中位数合规性，绿色表示柔顺度误差，红色表示体积分数误差，紫色表示悬浮材料，棕色表示推理时间。所有指标均越低越好。

	Task	Iter	平均 C ↓	% 合规误差 ↓
SIMP	任务2	+5	9.87	35.13
TopoDiff-FF	任务2	-	19.01	58.36
TopoDiff-FF +SIMP	任务2	+5	**8.67**	**20.34**
SIMP	任务2	+10	8.57	17.61
TopoDiff-FF	任务2	-	19.01	58.36
TopoDiff-FF +SIMP	任务2	+10	**7.65**	**7.84**

表 9： 比较了 SIMP、TopoDiff-FF 和 TopoDiff-FF+ SIMP。我们发现，将使用条件扩散模型生成的拓扑与 SIMP 结合进行细化，仅需 5 或 10 次 SIMP 迭代，即可在平均柔顺度和柔顺度误差方面取得最佳结果。

5.8 可制造性

如果拓扑满足所有约束、没有悬浮材料，且柔顺度低于 100，我们就将其定义为可制造。在图10中，我们展示了可制造性（以符合这些标准的构型百分比衡量）如何随性能变化。我们评估了分布外约束，并比较了基于原始载荷和边界条件训练的模型与基于核松弛训练的模型。结果表明，生成拓扑的性能越高（即平均柔顺度越低），其可制造性就越好。值得注意的是，以核松弛为条件时，可制造拓扑的比例更高，这支持了我们的假设：核能够有效近似载荷和边界。

核消融。该表展示了 TopoDiff-FF 模型的核消融研究结果。我们对模型进行了短时训练。评估了四种具有不同指数的反距离核，并通过柔顺度误差（CE）、体积分数误差（VFE）、悬浮材料（FM）、载荷偏离（LD），以及柔顺度值小于 100 的符合柔顺度要求的样本所占百分比（$conf|c < 100$）来衡量其性能。对于

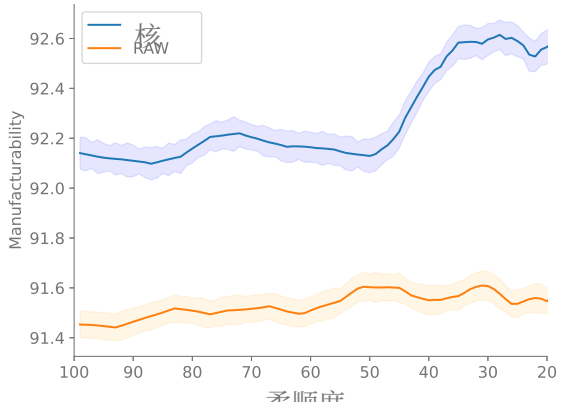

图 10： 以悬浮材料缺失、无载荷违约且分布外约束下柔顺度低于 100 为衡量标准的可制造性。

CE、VFE、FM 和 LD，数值越低表示性能越好；而 $conf|c < 100$ 数值越高，则表示越符合给定的约束。结果表明，使用 β学习幂时，$1/r^2$ 核的整体表现良好，CE 和 VFE 数值最低，且 $conf|c < 100$ 百分比最高。$1/r^\beta$ 核也表现良好，FM 数值最低；而 $1/r$ 核在所有指标上的表现最差。

	CE ↓	VFE ↓悬浮材料	↓LD	↓ $conf|_{c<t}$ ↑	
$K(1/r)$	189.76	15.54	8.60	1.4	48.80
$K(1/r^2)$	47.62	2.38	9.23	0.0	94.32
$K(1/r^4)$	55.01	2.35	8.15	0.0	95.90
$K(1/r^\beta)$	36.20	2.22	8.63	0.0	95.66

表10： TopoDiff-FF 的核消融。所有指标均以 **%** 表示。我们在部分训练数据上训练模型，训练时间较短。

6. 讨论

必须认识到纯数据驱动方法的局限性，例如 TopoDiff-FF 难以推广到分布外场景，因为这类模型无法推广到训练过程中未遇到的新情况。相比之下，TopoDiff 融合了通过数值分析和问题底层物理获得的额外条件信息，使模型能够推广到训练数据未涵盖的区域。为 TopoDiff-FF 提出的核具有通用性，可轻松应用于任意区域、分辨率和材料，因此是工程设计中的宝贵工具。相反，有限元条件化需要深入理解问题，且难以适应更高的分辨率和更复杂的问题。因此，TopoDiff-FF 是一种强大的工程设计替代方案，尤其适用于有限元条件化不可行或效果不佳的情况。此外，我们的结果表明，将 TopoDiff-FF 生成的拓扑与少量迭代次数 SIMP 结合起来，能够取得优于纯数据驱动方法或物理信息方法的结果，这表明此类模型在工程设计中的表达能力可以得到提升。

局限性。 用于拓扑优化的深度生成模型是提升工程设计效率、可扩展性和多样性的一个有前景的方向，但仍存在局限性 [34]。总体而言，数据驱动方法有三个主要目标：直接设计、加速和上采样。文献 [34]中的作者批评了用于直接设计的端到端方法，指出文献中提出的大多数方法会产生较差的设计，而且成本高昂，并且能够处理的问题和网格分辨率种类有限。这确实是一个很好的批评，因为大多数方法都专注于特定区域和分辨率。作者认为，拓扑优化的迭代特性并非使其不切实际的原因，真正的问题在于每次迭代中高成本组件带来的计算负载。他们建议应将重点转向减轻这一计算负载。作者还指出，学习方法的主要贡献应在于加快迭代优化过程中的中间步骤计算，或对优化结果进行后处理以提高可制造性。尽管这些批评大多准确，但新一代生成模型正在应对这些挑战，并解决或缓解了大多数相关问题，包括采样效率低下、依赖特定区域，以及基于优化的细化和具有性能感知的直接设计 [10]。

7. 结论

总而言之，我们采用核近似作为生成模型的条件化，并通过优化技术进行精炼的方法，在提升精度、约束满足、可制造性和性能方面展现出了潜力。为进一步改进我们的方法，未来的研究可以探索如何在保持精度和约束满足的同时维持多样性。此外，还应研究我们的方法在更大、更复杂问题上的可扩展性。总之，我们相信，我们的工作为推动拓扑优化和工程设计中的生成式设计提供了新的可能性。

参考文献

[1] Bendsøe, Martin Philip 和 Kikuchi, Noboru。“使用均匀化方法生成结构设计中的最优拓扑结构。”*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*第 71 卷第 2 期（1988）：第 197–224 页。[2] Sigmund, Ole 和 Maute, Kurt。“拓扑优化方法：比较综述。”结构与多学科优化第 48 卷第 6 期（2013）：第 1031–1055 页。[3] Ahmed, Faez、Bhattacharya, Bishakh 和 Deb, Kalyanmoy。“基于构造实体几何和进化算法的拓扑优化。”第七届生物启发计算国际会议：理论与应用（*BIC-TA 2012*）论文集：第 227–238 页。2013。Springer。

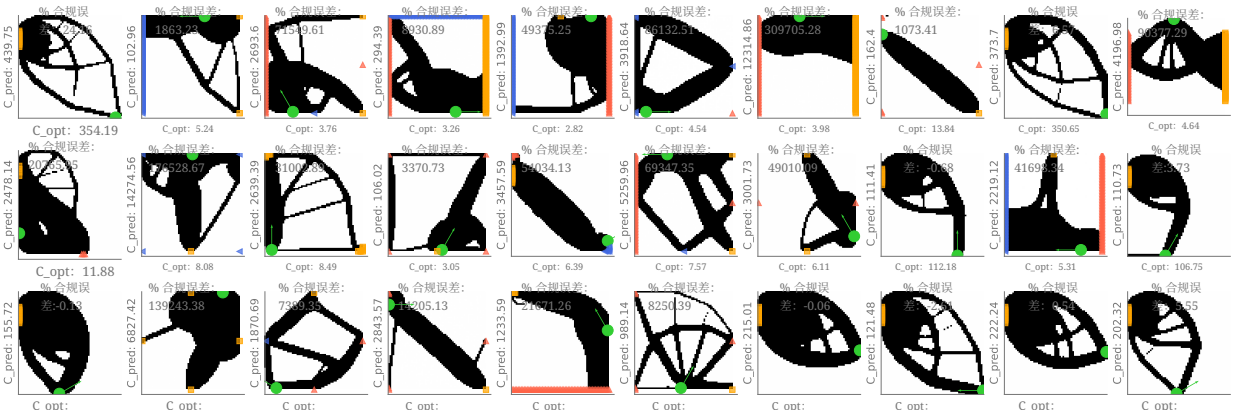

图11：性能较差的生成拓扑结构示例。

[4] Bendsøe, Martin P。“将最优形状设计视为材料分布问题。”结构优化 第 1 卷（1989）：第 193–202 页。[5] Rozvany, George IN、Zhou, Ming 和 Birker, Torben。“无需均匀化的广义形状优化。”结构优化 第 4 卷（1992）：第 250–252 页。[6] Bond-Taylor, Sam、Leach, Adam、Long, Yang 和 Willcocks, Chris G。“深度生成建模：变分自编码器、生成对抗网络、归一化流、基于能量的模型和自回归模型的比较综述。”*IEEE* 模式分析与机器智能汇刊 （2021）。[7]Rombach, Robin、Blattmann, Andreas、Lorenz, Dominik、Esser, Patrick 和 Ommer, Björn。“使用潜在扩散模型进行高分辨率图像合成。”*arXiv* 预印本 *arXiv:2112.10752*（2021）。[8] Brown, Tom B、Mann, Benjamin、Ryder, Nick、Subbiah, Melanie、Kaplan, Jared、Dhariwal, Prafulla、Neelakantan, Arvind、Shyam, Pranav、Sastry, Girish、Askell, Amanda 等。“语言模型是少样本学习者。”*arXiv* 预印本 *arXiv:2005.14165*（2020）。[9] Ramesh, Aditya、Pavlov, Mikhail、Goh, Gabriel、Gray, Scott、Voss, Chelsea、Radford, Alec、Chen, Mark 和 Sutskever, Ilya。“零样本文本生成图像。”国际机器学习会议：第 8821–8831 页。2021。PMLR。[10] Regenwetter, Lyle、Nobari, Amin Heyrani 和 Ahmed, Faez。“工程设计中的深度生成模型：综述。”*Journal of Mechanical Design* 第 144 卷第 7 期（2022）：第 071704 页。[11] Song, Binyang、Zhou, Rui 和 Ahmed, Faez。“工程设计中的多模态机器学习：综述与未来方向。”*arXiv* 预印本 *arXiv:2302.10909*（2023）。[12] Nie, Zhenguo、Lin, Tong、Jiang, Haoliang 和 Kara, Levent Burak。“Topologygan：基于初始域物理场的生成对抗网络拓扑优化。”*Journal of Mechanical Design* 第 143 卷第 3 期（2021）。[13] Maze, Francois 和 Ahmed, Faez。“TopoDiff：一种性能与约束引导的拓扑优化扩散模型。”*arXiv* 预印本 *arXiv:2208.09591*（2022）。[14] Behzadi, Mohammad Mahdi 和 Ilieş, Horea T。“通过深度迁移学习实现三维实时拓扑优化。”计算机辅助设计第 135 卷（2021）：第 103014 页。[15] Shigley, Joseph Edward、Mitchell, Larry D 和 Saunders, H。“机械工程设计。”（1985年）。

[16] Allaire, Grégoire、Jouve, François 和 Toader, Anca-Maria。“一种用于形状优化的水平集方法。”*ComptesRendus Mathematique* 第334卷第12期（2002）：第1125–1130页。[17] Sokolowski, Jan 和 Zochowski, Antoni。“论形状优化中的拓扑导数。”*SIAM journal on control andoptimization* 第37卷第4期（1999）：第1251–1272页。[18] Xie, Y Mike、Steven, Grant P、Xie, YM 和 Steven, GP。《基础进化结构优化》。Springer（1997）。[19] Bourdin, Blaise 和 Chambolle, Antonin。“拓扑优化中的设计相关载荷。”*ESAIM: Control, Optimisa- tion andCalculus of Variations* 第9卷（2003）：第19–48页。[20] Hunter, William 等。“Topy——基于 Python 的拓扑优化。”（2017）。[21] Liu, Kai 和 Tovar, Andrés。“一个使用 Matlab 编写的高效三维拓扑优化代码。”*Structural andMultidisci-plinary Optimization*第50卷（2014）：第1175–1196页。[22] Abueidda, Diab W.、Koric, Seid 和 Sobh, Nahil A。“使用深度学习优化具有非线性的二维结构拓扑。”*Computers & Structures* 第237卷（2020）：第106283页。[23] Banga, Saurabh、Gehani, Harsh、Bhilare, Sanket、Patel, Sagar 和 Kara, Levent。“使用卷积神经网络进行三维拓扑优化。”*Preprint*（2018）。[24] Hertlein, Nathan、Buskohl, Philip R.、Gillman, Andrew、Vemaganti, Kumar 和 Anand, Sam。“用于增材制造拓扑优化早期设计灵活性的生成对抗网络。”*Journal of Manufacturing Sys- tems* 第59卷（2021）：第675–685页。[25] Elingaard, Martin Ohrt、Aage, Niels、Bærentzen, J akob Andreas 和 Sigmund, Ole。“利用卷积神经网络进行去均质化。”*Computer Methods in Applied Me- chanics andEngineering* 第388卷（2022）：第114197页。[26] Napier, Nicholas、Sriraman, Sai-Aksharah、Tran, Huy T. 和 James, Kai A。“一种拓扑优化方法：从低分辨率输入生成高分辨率设计的人工神经网络方法。”*Journal of Mechanical De- sign* 第142卷第1期（2020）。[27] Kench, Steve 和 Cooper, Samuel J。“利用基于生成对抗网络的维度扩展，从二维切片生成三维结构。”*Nature Machine Intelligence*第3卷第4期（2021）：第299–305页。[28] Jiang, Jiaqi、Chen, Mingkun 和 Fan, Jonathan A。“用于光子器件评估与设计的深度神经网络。”*Nature Reviews Materials* 第6卷第8期（2021）：第679–700页。

[29] Rawat, Sharad 和 Shen, M. H. Herman。“一种采用集成深度学习网络架构的新型拓扑设计方法。” *Preprint*（2018）。[30] Rawat, Sharad 和 Shen, MH Herman。“对抗网络在三维结构拓扑优化中的应用。”技术报告，第 SAE 技术论文编号。2019。[31] Sharpe, Conner 和 Seepersad, Carolyn Conner。“利用条件生成对抗网络进行拓扑设计。” *In-ternational Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*，第59186卷：第V02AT03A062页。2019。美国机械工程师学会。[32] Yu, Yonggyun、Hur, Taeil、Jung, Jaeho 和 Jang, In Gwun。“无需迭代即可确定近最优拓扑设计的深度学习方法。” *Structural and Multidisciplinary Optimization* 第 59 卷第 3 期（2019）：第787–799页。[33] Berthelot, David、Schumm, Thomas 和 Metz, Luke。“BEGAN：边界均衡生成对抗网络。” *arXiv preprint arXiv:1703.10717*（2017）。[34] Woldseth, Rebekka V、Aage, Niels、Bærentzen, J Andreas 和 Sigmund, Ole。“论人工神经网络在拓扑优化中的应用。” *Structural and Multidisciplinary Op- timization*第65卷第10期（2022）：第294页。[35] Kong, Zhifeng 和 Ping, Wei。“论扩散概率模型的快速采样。” *arXivpreprintarXiv:2106.00132*（2021）。[36] Meng, Chenlin、Gao, Ruiqi、Kingma, Diederik P、Ermon, Stefano、Ho, Jonathan 和 Salimans, Tim。“论引导扩散模型的蒸馏。” *arXivpreprint arXiv:2210.03142*（2022）。[37] Choi, Jooyoung、Kim, Sungwon、Jeong, Yonghyun、Gwon, Youngjune 和 Yoon, Sungroh。“ILVR：一种用于去噪扩散概率模型的条件化方法。” *arXiv preprint arXiv:2108.02938*（2021）。[38] Song, Yang、Sohl-Dickstein, Jascha、Kingma, Diederik P、Kumar, Abhishek、Ermon, Stefano 和 Poole, Ben。“通过随机微分方程进行基于分数的生成建模。” *arXiv preprint arXiv:2011.13456*（2020）。[39] Nichol, Alexander Quinn 和 Dhariwal, Prafulla。“改进的去噪扩散概率模型。” *International Con- ference onMachine Learning*：第8162–8171页。2021。PMLR。[40] Giannone, Giorgio、Nielsen, Didrik 和 Winther, Ole。“少样本扩散模型。” *arXiv preprint arXiv:2205.15463*（2022）。[41] Xie, Tian、Fu, Xiang、Ganea, Octavian-Eugen、Barzilay, Regina 和 Jaakkola, Tommi。“用于周期性材料生成的晶体扩散变分自编码器。” *arXiv preprint arXiv:2110.06197*（2021）。[42] Ramesh, Aditya、Dhariwal, Prafulla、Nichol, Alex、Chu, Casey 和 Chen, Mark。“利用 CLIP 潜变量进行层次化文本条件图像生成。” *arXiv preprint arXiv:2204.06125*（2022）。[43] Sohl-Dickstein, Jascha、Weiss, Eric、Maheswaranathan, Niru 和 Ganguli, Surya。“利用非平衡热力学进行深度无监督学习。”Bach, Francis 和 Blei, David（编）。*Proceedings of the 32nd International Confer- ence on Machine Learning*，第37卷：第2256–2265页。2015。PMLR，法国里尔。[44] Ho, Jonathan、Jain, Ajay 和 Abbeel, Pieter。“去噪扩散概率模型。”*Advances in Neural Information Processing Systems 33*。2020。[45] Song, Yang 和 Ermon, Stefano。《通过估计数据分布的梯度进行生成建模》。神经信息处理系统进展 *32*。2019年。[46] Kingma, Diederik P 和 Welling, Max。《自动编码变分贝叶斯》。*arXiv* 预印本 *arXiv:1312.6114*（2013）。[47] Jordan, Michael I、Ghahramani, Zoubin、Jaakkola, Tommi S 和 Saul, Lawrence K。《图模型变分方法简介》。机器学习 第 37 卷第 2 期（1999）：第 183–233 页。[48] Dhariwal, Prafulla 和 Nichol, Alexander。《扩散模型在图像合成方面胜过生成对抗网络》。神经信息处理系统进展 第 34 卷（2021年）。[49] Ho, Jonathan 和 Salimans, Tim。《无分类器扩散引导》。*NeurIPS 2021* 深度生成模型及下游应用研讨会。2021年。[50] Garabedian, PR。《复数域中含两个以上自变量的偏微分方程》。数学与力学杂志 （1960年）：第 241–271 页。[51] Hale, Jack K 和 Lunel, Sjoerd M Verduyn。《泛函微分方程导论》。第 99 卷。施普林格科学与商业媒体（2013年）。[52] Keldysh, Mstislav Vsevolodovich。《关于某些非自伴方程类的特征值与特征函数》。苏联科学院通报，第 77 卷。第 1 期：第 11–14 页。1951年。

附录 A. 生成的拓扑结构示例



图 12：性能良好的生成的拓扑结构示例。

,