不确定性条件下多材料隔热组件设计的可扩展算法

Jingye Tan[a,*], Danial Faghihi[a]

[a] *Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University at Buffalo, Buffalo, NY, USA*

arXiv:2304.01139v1 [math.OC] 3 Apr 2023

摘要

本文提出了一个可扩展的计算框架，用于不确定性条件下的最优设计，并将其应用于建筑围护结构的多材料隔热组件。正向模型由受耦合偏微分方程（PDEs）控制的多孔材料多相热-力学模型构成。设计参数（材料孔隙率）是一个不确定且随空间变化的场，经有限元离散后形成一个高维偏微分方程约束的不确定性优化问题。该稳健设计框架采用由设计目标的均值和方差组成的风险规避表述，以实现目标热学和力学性能并减轻不确定性的影响。为确保求解的效率和可扩展性，利用了均值和方差的二阶泰勒近似，以及设计目标预条件海森矩阵的低秩结构，从而揭示了高维不确定参数空间的低有效维数。此外，采用拉格朗日形式实现了一种基于梯度的优化方法，以推导关于设计参数和不确定参数的梯度与海森矩阵表达式。最后，通过延续数值方案采用近似的ℓ_0 正则化函数，以促进所设计孔隙率的稀疏性。通过建筑围护结构隔热场景的数值算例，展示了该框架的准确性、效率和可扩展性。

关键词： PD不确定性下的 E 约束最优设计、高维性、可扩展性 y

1. 引言

由偏微分方程（PDEs）模型支配的多材料构件，其基于仿真的设计颇具挑战性，原因在于设计和不确定参数具有高维性、需要控制材料间的界面厚度，以及在大规模系统中求解复杂偏微分方程的成本高昂。此外，模型参数（因实验噪声和模型不足而产生）及设计参数（在材料制造过程中引入）中不可避免的不确定性，会导致计算成本高得难以承受的优化问题。

本文提出了一种用于不确定性下偏微分方程约束最优多材料设计（DUU）的可扩展框架。该框架应用于建筑围护结构的隔热部件，以实现预期的隔热性能和机械强度。本文其余部分安排如下：第 2 节介绍热力学模型。第 3 节概述所提出的 DUU 框架的主要组成部分。第 4 节通过数值实验展示该框架的效率和可扩展性。第 5 节总结全文，并介绍我们为扩展该方法和数值实验所做的工作。

*学生贡献者*Email addresses:* jtan32@buffalo.edu (Jingye Tan), danialfa@buffalo.edu (Danial Faghihi)

2. 多相多孔材料热力学模型

我们的目标是设计由二氧化硅气凝胶制成的建筑围护结构隔热部件（热断桥）。二氧化硅气凝胶是一种具有超强隔热性能的介孔材料。我们采用连续介质混合理论 [1]对二氧化硅气凝胶的热力学行为进行建模。在稳态热传输和静态条件下，控制方程可简化为以下偏微分方程，

$$\begin{cases} -\nabla\cdot(\phi_s\,\kappa_s\,\nabla T_s) &= -h(T_s-T_f), \\ -\nabla\cdot(\phi_f\,\kappa_f\,\nabla T_f) &= h(T_s-T_f), \end{cases} \quad , \quad \begin{cases} C\,p = -(\nabla\cdot\mathbf{u}_s), \\ \nabla\cdot\mathbf{T}_s' + (2\,\phi_f-1)\,\nabla p = 0, \end{cases} \tag{1}$$

其中，状态变量 T_s, T_f, $\mathbf{u}_s$ 和 p 分别表示固体温度、流体温度、固体位移和流体压力。有效固体应力为 $\mathbf{T}_s' = 2\,\mu\,\boldsymbol{\epsilon}_s + \lambda\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{\epsilon}_s)\mathbf{I}$，其中 $\boldsymbol{\epsilon}_s = \frac{1}{2}\big(\nabla\mathbf{u}_s + (\nabla\mathbf{u}_s)^T\big)$ 表示固体应变。模型参数 $\boldsymbol{\theta} = (\bar{\kappa}_s, \kappa_f, h, K, C, \mu)$ 可由实验数据 [1] 确定。流体体积分数（孔隙率） $\phi_f = 1-\phi_s$ 的空间分布是设计变量。表示隔热 Q_T 和力学 Q_M 性能的关注量（QoIs），以及 j 对流和 k 牵引边界，为

$$\begin{cases} Q_T &= \frac{1}{2}\sum_{i=s,f}\big\langle\phi_i\,\kappa_i\,\nabla T_i, \nabla T_i\big\rangle_\Omega + \sum_{i=s,f}\sum_j\big\langle\phi_i(\frac{1}{2}T_i + T_j^{\mathrm{amb}}), T_i\big\rangle_{\Gamma_j}, \\ Q_M &= \frac{1}{2}\big\langle\mathbf{T}_s', \boldsymbol{\epsilon}_s\big\rangle + \sum_k\big\langle\mathbf{t}, \mathbf{u}_s\big\rangle_{\Gamma_k}, \end{cases} \tag{2}$$

其中 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 是表示在区域 Ω 内或边界 Γ上的这两项的积分 .

3. A 面向不确定性下最优设计的可扩展框架（DUU）

尽管二氧化硅气凝胶具有优异的隔热性能，但其高孔隙率会导致力学失稳。我们的目标是确定热断桥内部孔隙率的空间分布，以实现所需的隔热性能和力学性能。然而，孔隙率及其空间分布都存在不确定性。为对不确定性建模，我们将设计参数 $d(\mathbf{x}) \in [0,1]$ 定义为一个线性映射 $f(\cdot)$，该映射插值得到二氧化硅气凝胶的孔隙率（$\phi_f(\mathbf{x}) = [0.1, 0.9]$），并包含不确定性，即 $\phi_f \equiv f(d+m)$。不确定参数 $m(\mathbf{x})$ 表示为高斯随机场，其协方差核为 Mat´ern $\mathcal{C} = \mathcal{A}^{-2}$ [2]，使得

$$\mathcal{A}\,m = \begin{cases} \gamma\,\nabla\cdot(\boldsymbol{\Theta}\,\nabla m) + \delta\,m & \text{in } \Omega \\ (\boldsymbol{\Theta}\,\nabla m)\cdot\mathbf{n} + \frac{\sqrt{\delta\,\gamma}}{1.42}\,m & \text{on } \Gamma \end{cases} \quad , \tag{3}$$

其中，γ 和 δ 控制方差和空间相关性，$\boldsymbol{\Theta}$ 为各向异性张量。

由于热学和力学 QoI（设计目标）取决于不确定参数 m，我们针对 DUU 问题采用风险规避型 PDE 约束优化表述 [3, 4] ，

$$\min_d \mathcal{J}(d) = \mathbb{E}[Q(d,m)] + \beta_V\,\mathbb{V}[Q(d,m)] + \beta_R\,R(d), \quad \text{subjected to (1)},\ d\in[0,1], \tag{4}$$

其中，$\mathbb{E}[\cdot]$ 和 $\mathbb{V}[\cdot]$ 分别表示均值和方差度量，$R(d)$是正则化函数。设计目标为 $Q = \beta_M\,Q_M - Q_T$，其中 β_M 是机械QoI相对于热QoI的权重，β_V 和 β_R 分别是方差项和正则化项的权重。

3.1. 设计目标的泰勒近似

在式（4）中，对均值和方差进行蒙特卡洛（MC）估计，需要针对每次优化迭代的 m 大量样本求解控制偏微分方程（1）。为减轻这一高昂的计算成本，我们通过在不确定参数均值 $\bar{m}$处对均值和方差 [3, 4],进行二阶泰勒近似，提出了一种高效算法，

$$\mathbb{E}[Q] \approx \bar{Q} + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\big(\bar{\mathcal{H}}_c\big),\ \mathbb{V}[Q] \approx \big\langle\bar{Q}_m, \mathcal{C}\,\bar{Q}_m\big\rangle + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\big(\bar{\mathcal{H}}_c^2\big),\ \text{with}\ \ \mathrm{tr}\big(\bar{\mathcal{H}}_c\big) \approx \sum_{n\geq 1}^{N}\lambda_n,\ \mathrm{tr}\big(\bar{\mathcal{H}}_c^2\big) \approx \sum_{n\geq 1}^{N}\lambda_n^2. \tag{5}$$

上述 Q、 Q_m和 $\mathcal{H}_c = \mathcal{C}\,\mathcal{H}$ 分别是在 $\bar{m}$处评估的设计目标、其梯度和协方差预条件海森矩阵。由于迹项 tr(·) 衰减迅速（见第4节图1(b)），因此使用协方差预条件海森矩阵 $\mathcal{H}_c$ 的 N 个主导特征值（λ_n）对其进行近似； λ_n 通过使用随机化算法 [5]求解广义特征值问题获得。

3.2. 基于梯度的优化

我们采用有限内存 Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno 优化算法。我们使用拉格朗日形式推导所需的导数，即式（5）中的 m-梯度和 m-海森矩阵of$Q$ ，以及式（4）中 $\mathcal{J}(d)$ 的二次近似的 d-梯度。

3.3. 通过延拓方案实现稀疏性约束正则化

为控制两种材料之间的界面厚度，我们将式（4）中的正则化项定义为蒂霍诺夫项与通过延拓方案得到的近似 ℓ_0 的加权和，

$$R(d) = \int_\Omega \beta_{R_{\text{tik}}}\left(\nabla d : \nabla d\right) + \beta_{R_0}\left(f_{\epsilon_0}(d)\right)\,\mathrm{d}\Omega, \text{ where, } f_{\epsilon_0}(d) = \begin{cases} d/\epsilon_0, & d \in [0, \epsilon_0/2] \\ p_3(d, \epsilon_0), & d \in (\epsilon_0/2, 2\epsilon_0) \\ 1, & d \in (2\epsilon_0, 1] \end{cases}, \quad (6)$$

其中， $p_3(d,\ \epsilon_0)$ 是关于 d 的三阶多项式，由 $\epsilon_0 \in (0,\ 1)$ 唯一确定，使 $f_{\epsilon_0}(d)$ 连续可微。延续数值方案首先使用 $\beta_{R_0} = 0$ 和 $\beta_{R_{\text{tik}}} = 1$ 进行优化，以实现快速收敛，从而得到一个可能非稀疏的最优设计 $d^{\text{tik}}_{\text{opt}}$。其次，我们设定 $\beta_{R_0} = 1$ 和 $\beta_{R_{\text{tik}}} = 0$，并在 $\{\epsilon_0^{(i)} = (\frac{1}{2})^i\}_{i=1}^{K}$ 个延续迭代中使用递减序列。第一次迭代中，使用 $d^{\text{tik}}_{\text{opt}}$ 以 $\epsilon_0^{(1)}$ 初始化延拓，从而获得 $d^{(1)}{}_{\text{opt}}$。每次使用 $\epsilon_0^{(i+1)}$ 进行的子序列优化都将从前一次最优设计 $d^{(i)}{}_{\text{opt}}$ 开始。在该方案中，还可以在非稀疏区域自适应地细化网格，以高效控制材料界面厚度。

4. 数值结果

我们展示所提出的 DUU 框架在 L 形绝缘部件上的一组初步结果。该部件的外边界受到热温度下的对流和均匀牵引载荷作用，内边界则受到冷温度下的对流和固定位移约束。

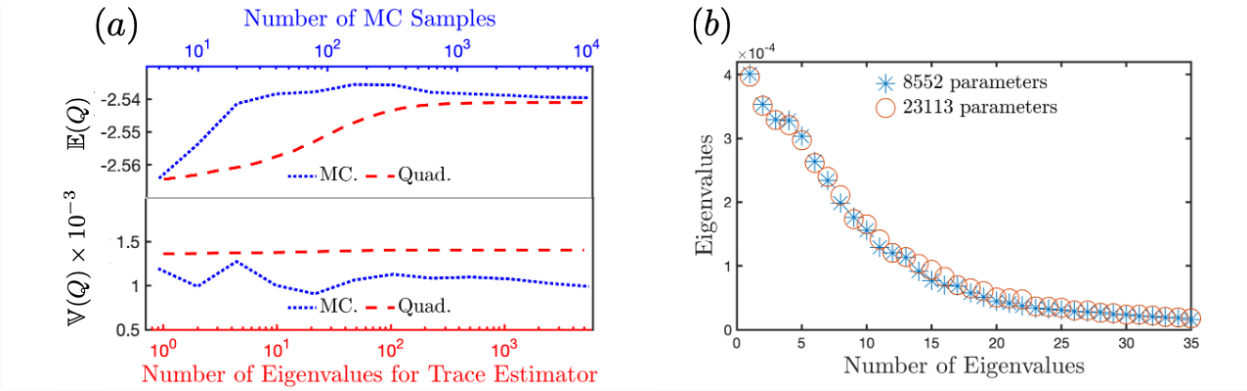

图 1: （a） Q 的二次泰勒近似（Quad）随主导特征值数量的收敛情况，并与蒙特卡洛估计（MC）进行比较。（b）不同不确定参数维度（网格离散）下协方差预条件海森矩阵特征值的衰减情况。

图1(a)展示了式(5)中 Q 的二次近似随主导特征值数量 λ_n变化的收敛情况。结果表明，使用前25个主导特征值时，二次近似相较于蒙特卡洛估计的相对误差低于0.5%

（使用10240个样本）。图1(b)展示了两种有限元离散下特征值的快速衰减。这表明，二次近似所需的计算工作量（偏微分方程求解次数）不取决于不确定参数的高维度，而取决于预条件海森矩阵的秩所决定的有效低维度，从而使该算法具有可扩展性。图2展示了式(4)中三种不同方差权重下的最优设计结果。随着 β_V 增大，最优孔隙率的空间模式提供了更多机械支撑，同时通过权衡均值性能降低了 Q 的方差。

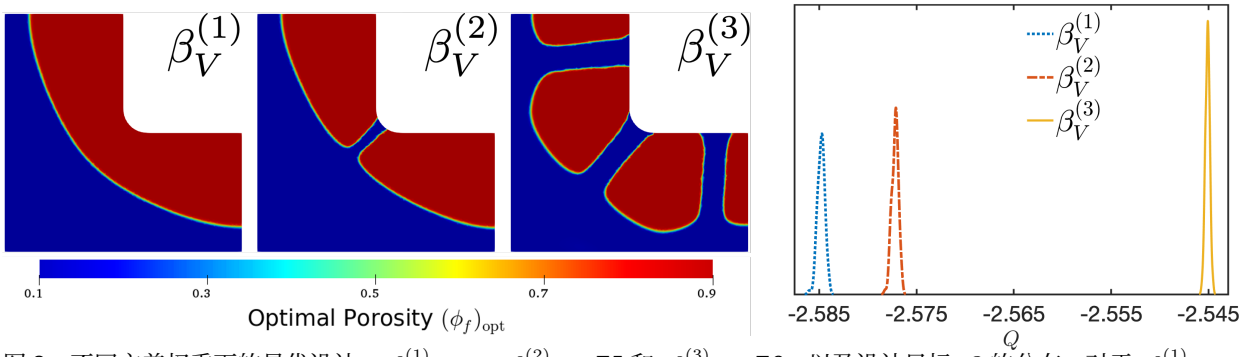

图 2：不同方差权重下的最优设计，$\beta_V^{(1)} = 0$、$\beta_V^{(2)} = 1\text{E}5$ 和 $\beta_V^{(3)} = 1\text{E}6$，以及设计目标 Q 的分布。对于 $\beta_V^{(1)}$、$\beta_V^{(2)}$ 和 $\beta_V^{(3)}$，Q 的方差分别为 1.3×10^{-7}、1.1×10^{-7} 和 4.7×10^{-8}。

5. 结论

我们开发了一种可扩展算法，用于优化气凝胶基隔热组件中的孔隙率分布。我们的方法采用稳健设计的风险规避型公式，并对设计目标的均值和方差进行泰勒近似。我们利用随机化算法估计设计目标的预条件海森矩阵的迹，并采用基于拉格朗日形式的基于梯度的优化方法。初步数值实验表明，该框架的计算工作量（所需的偏微分方程求解次数）不取决于离散化的高维不确定参数，而取决于由预条件海森矩阵的秩决定的有效低维空间，从而保证了算法的可扩展性。

我们目前的工作从两个方面补充了本文所述结果。首先，我们将设计目标的二次近似用作控制变量，与朴素的蒙特卡洛方法相比，显著降低了计算开销；与仅使用二次近似相比，则提高了数值精度。其次，我们将该框架应用于更复杂的情形，即在建筑围护结构和柱系统中采用气凝胶热断桥；这需要将针对 ℓ_0-稀疏化设计的延拓方案与自适应网格细化无缝结合，以控制两种不同材料孔隙率之间的界面厚度。

6. 致谢

来自……的支持。　美国国家科学基金会CAREER奖 CMMI-2143662的支持谨致谢意 .

参考文献

[1] J. Tan, P. Maleki, L. An, M. Di Luigi, U. Villa, C. Zhou, S. Ren, D. Faghihi, 计算力学 69 (6) (2022) 1457–1479。[2] F. Lindgren, H. Rue, J. Lindstr¨om, 英国皇家统计学会杂志：B辑（统计方法）73 (4) (2011) 423–498。[3] A. Alexanderian, N. Petra, G. Stadler, O. Ghattas, SIAM/ASA不确定性量化杂志 5 (1) (2017) 1166–1192。[4] P. Chen, U. Villa, O. Ghattas, 计算物理学杂志 385 (2019) 163–186。[5] A. K. Saibaba, J. Lee, P. K. Kitanidis, 应用数值线性代数 23 (2) (2016) 314–339。