高阶拓扑优化的延拓法

P. GanglM. Winkler约翰·拉东计算与应用数学研究所（*RICAM*），奥地利科学院

2026年1月8日

arXiv:2601.04003v1 [math.OC] 7 Jan 2026

摘要

我们的目标是求解一个拓扑优化问题，其中设计域内的材料分布由密度函数表示。为获得局部极小值的候选解，我们希望通过牛顿法求解一阶最优性系统。这要求初始猜测充分接近先验未知的解。引入步长规则通常可以放宽对初始猜测的限制，同时仍能保证收敛。在拓扑优化中，通常会遇到非凸问题，这种方法可能会失效。因此，我们采用同伦（延拓）方法，通过求解一系列参数化问题来逼近原问题的解。在基于密度的框架中，设计变量的取值下限为 0，上限为 1。将同伦法与障碍策略相结合，可确保满足这些约束。针对一个偏微分方程约束的柔度最小化问题所做的数值结果表明，这种组合方法既能保持密度函数的可行性，又能在无需事先了解解的情况下收敛到局部最优设计（的候选解）。

1 引言

拓扑优化方法旨在寻找设计区域内不同材料的最优分布，以最小化某个感兴趣量，同时也可能满足一些约束。最广泛使用的方法类别包括基于密度的方法 [6]，其中设计由一个连续密度变量表示，其取值位于区间 $[0,1]$ 内，并对中间值进行惩罚；以及水平集方法，其中连续水平集函数的符号决定局部材料分配 [2]。拓扑优化已成功应用于众多不同物理学科的问题，包括机械工程 [3,5]和电磁学 [8],，甚至耦合多物理场问题 [11,13]。

应用最广泛的数值优化算法基于一阶导数信息，包括（投影）梯度下降法或序列凸近似方法，例如移动渐近线法（MMA） [22]。尽管这些方法在实践中已证明有效，但可能需要大量迭代才能达到收敛。因此，人们也研究了用于拓扑优化的二阶方法，例如， [1] 介绍了一种内点法， [10] 介绍了一种状态空间牛顿法。除了局部收敛速度快之外，牛顿法还适用于需要通过预测校正格式跟踪解路径的应用。例如，在 [18], 中，通过去膨胀方法发现了多条解路径，并随后对其进行跟踪，从而得到非凸拓扑优化问题的不同局部解。作为激发本研究的第二个应用，我们提到多目标优化中帕累托曲线的追踪 [15,19]。

由于牛顿型方法仅具有局部收敛性，全局化策略至关重要。在本研究中，我们旨在通过利用牛顿法求解一阶

最优性系统，来确定拓扑优化问题的一个局部解。为实现收敛，我们采用同伦法 [4]。求解非线性方程组的同伦方法 $F(x) = 0$ 的基本思想是，通过定义一族问题，将目标问题与一个简单得多的问题 $G(x) = 0$联系起来；后者的解已知或易于求得。

$$H(x,t) = tF(x) + (1-t)G(x). \tag{1}$$

随后，从 $t = 0$ 开始，逐渐增大同伦参数 t，并将更新后的 t 代入新问题 (1)，以先前步骤的解为初值，应用牛顿法求解。该方法已成功用于求解具有挑战性的非线性方程组 [14] 或优化问题 [9]，近期也应用于形状优化领域 [7]。为纳入对密度变量的盒约束，我们将同伦方法与原始-对偶障碍法相结合。

本文其余部分安排如下：第2节介绍线弹性模型问题。第3节和第4节分别概述同伦方法与障碍法，随后在第5节将两种方法结合。最后，第6节通过数值实验展示该方法。

2 模型问题

我们考虑一个矩形计算域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$，其边界为 $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$，子边界为$\Gamma_D = \Gamma_D$,0 和 $\Gamma_N = \Gamma_N$, $_{g_N} \cup \Gamma_N$,0。Ω 上两种材料的分布由密度变量ρ 表示：$\Omega \to [0,1]$，其中 $\rho(x) = 0$ 和 $\rho(x) = 1$ 分别表示某点处不存在和存在材料。现在，我们在Γ_N,g_N上施加牵引力 g_N，固定边界 Γ_D，并希望以这样的方式分布材料，使机械结构的柔顺度最小化，或等价地，使其刚度最大化。给定材料分布 ρ 时，力 g_N 引起的小位移 u 由线弹性方程描述，其弱形式可表示为状态方程 $e(\rho, u) = 0$，其中，对于给定的设计空间Q 和 $u \in V$: $= (H^1_{0,\Gamma_D}(\Omega))^2$，有 $\rho \in Q$。为排除材料全部填满这一平凡解，我们要求体积 $\int_\Omega \rho\, dx$ 受到上限约束。为此，在目标函数中加入一个由正参数 $\gamma > 0$加权的体积控制项。

我们通过陈述相应的偏微分方程约束最小化问题的约化形式，总结前面的讨论：

$$\inf_{\rho \in Q} j(\rho) := j(\rho, u(\rho)) \quad \text{subject to} \quad 0 \le \rho \le 1 \text{ a.e. on } \Omega \tag{2}$$

其中，$j(\rho,\ u) := \int_{\Gamma_{N,\ g_N}} g_N \cdot u\, ds + \gamma \int_\Omega \rho\, dx$，并且 $u = u(\rho) \in V$满足状态方程 $e(\rho,\ u) = 0 \text{ in } V^*$，其形式为

$$\langle e(\rho,u), v\rangle_{V^*\times V} := \int_\Omega (\lambda^L(\rho)\text{div}\,(u)\, Id + 2\mu^L(\rho)\mathcal{E}(u)) : \mathcal{E}(v)\, dx - \int_{\Gamma_{N,g_N}} g_N \cdot v\, ds \tag{3}$$

对于 $v \in V$。这里，我们将 $\mathcal{E}(u) := \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^\top)$ 记为线性化应变张量，并根据材料分布定义拉梅参数的插值：对于给定的正 λ^L_0，λ^L_1，μ^L_0，μ^L_1 和 $p \ge 1$，分别令 $\lambda^L(\rho) := \lambda^L_0 + \rho^p(\lambda^L_1 - \lambda^L_0)$ 和 $\mu^L(\rho) := \mu^L_0 + \rho^p(\mu^L_1 - \mu^L_0)$，在下文中将其设为 $p = 3$。

在这种表述下，优化问题可能不存在解，从而可能导致数值不稳定性，例如棋盘格模式，或数值解的网格依赖性 [21]。我们选择基于金兹堡-朗道能量的正则化方法 $P^{0,}{}_{\varepsilon}{}^{1}(\rho) := \varepsilon \int_\Omega |\nabla\rho|^2\, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_\Omega \rho(1-\rho)\, dx$ 可以证明，该方法在 Γ-意义下收敛到周长泛函，$P^{0,}{}_{\varepsilon}{}^{1} \xrightarrow{\Gamma} \bar{P}^{0,}{}_{1}$ 当 $\varepsilon \searrow 0$时。更确切地说，极限 $P^{0,}{}_{1}(\rho)$ 对应于$\{\rho = 1\}$ 的周长，并对 ρ [16] 的取值施加二元 0-1 限制。因此，在目标函数中加入 $P^{0,}{}_{\varepsilon}{}^{1}(\rho)$，并赋予足够大的权重 $\beta > 0$ 以及固定的正值 ε，即可迫使密度变量仅取接近 0 或 1 的值（即消除中间材料），同时控制总周长，从而避免

棋盘格模式。由于这种正则化涉及 ρ的梯度，我们要求密度空间满足$Q := H^1(\Omega)$。

最终，正则化后的无限维约化偏微分方程约束问题可表示为

$$\min_{\rho \in Q} \mathcal{J}(\rho) := J(\rho, u(\rho)) \quad \text{subject to} \quad 0 \le \rho \le 1 \text{ a.e. on } \Omega \tag{4}$$

其中， $J(\rho, u) := j(\rho, u) + \frac{\beta}{2} P^0{}_{,\varepsilon}{}^1(\rho)$ 和 $u(\rho)$ 满足状态方程 (3)，与前文相同，给定设计变量 ρ。通过分片线性全局连续有限元对状态和设计变量进行离散化，得到 (4) 的离散化形式，其形式为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad a \le x \le b \tag{5}$$

其中 $a, b \in \mathbb{R}^n$ 使得 $a < b$ 逐分量成立。这里，向量 x 表示有限元系数向量ρ，其对应于 Ω 上 $\rho_h(y) = \sum_{i=1}^n \rho_i \varphi_i(y) \approx \rho(y)$ 的帽函数基。下文将讨论如何计算抽象离散化问题 (5) 的驻点。

3 同伦法

本节暂时忽略约束 $a \le x \le b$，转而关注如何计算无约束最小化问题 $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ 的驻点，其中目标函数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 可微但非凸。
这可以通过找到满足一阶必要最优性条件的点 x^* 来实现，即 $\nabla f(x^*) = 0$。更抽象地说，我们考虑方程组 $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \ F(x) = 0$，其中 F 连续可微但非凸。通过牛顿法计算根，要求初始猜测已足够接近解 x^*。通常无法预先获得这类知识。将牛顿法与线搜索策略结合，以扩大吸引域，也可能因对 F 的雅可比矩阵正则性作出某些假设而失败；这些假设在非凸情形下可能不成立 [20]。

同伦法通过在目标问题 $F(x) = 0$ 中添加扰动项 $G(x)$，避免了对接近解的要求；其中 $G\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 连续可微，其根已知或易于计算，并进一步被定义为初始猜测 x_0。在该方法过程中，扰动项的作用逐渐减小，直至达到目标问题。换言之，需要通过同伦映射 $H\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n, \ (x, t) \mapsto H(x, t)$，在辅助问题 $G(x) = 0$ 与目标问题 $F(x) = 0$ 之间提供平滑过渡（延拓）。标量同伦参数 t 作为两个问题之间的权重，使得 $H(x, 0) = G(x)$，且 $H(x, 1) = F(x)$。

构造同伦映射的一种常见选择是凸同伦

$$H(x, t) := tF(x) + (1 - t)G(x) \tag{6}$$

其中，映射 $G\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 可以选择为 $G(x) := x - x_0$ 或 $G(x) := F(x) - F(x_0)$。在后一种情况下，所得的同伦映射称为全局同伦，其形式为

$$H(x, t) = tF(x) + (1 - t)(F(x) - F(x_0)) = F(x) - (1 - t)F(x_0). \tag{7}$$

在下文中，我们仅限于采用这一特定选择。

下面的示例说明了该方法的基本思想。

例 3.1. 我们考虑计算方程 $F(x) := 4x^3 - 3x^2 - 2x + 1 = 0$的根这一问题。选择 $x_0 = -1.2$ 会产生全局同伦映射 $H(x, t) = F(x) - (1 - t)F(x_0) = F(x) - (1 - t)c$，其中$c := = -7.8319$。因此，目标问题的扰动会引起由 t 参数化的平移。当 t 趋近

1 平移常数趋于零时， $H(x,t)$ 会逐渐变为目标函数。图 *1* 展示了同伦映射的零点在不同参数 t 下向 F 的根 x^* 移动的情况。

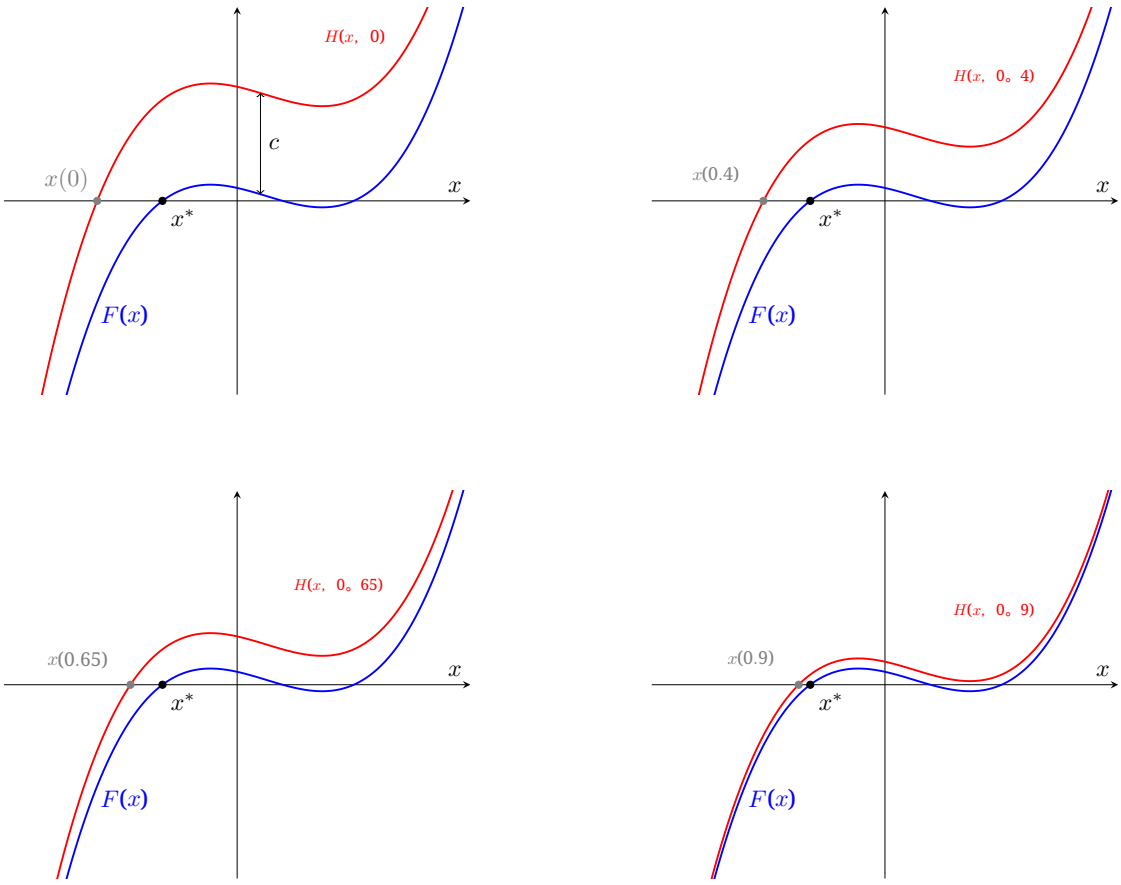
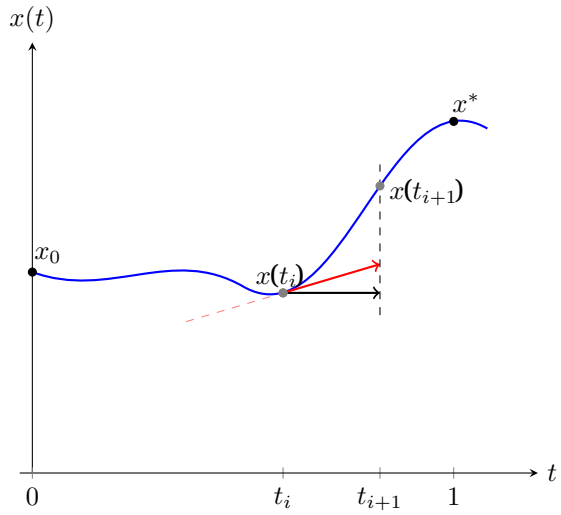


图 1： $t = 0$,0.4, 0.65 和 0.9 的同伦映射，与 F 的图形形成对比

由所有满足 $x = x(t)$ 且 t 满足 $H(x,t) = 0$ 的元组 (x,t) 构成的路径，称为同伦映射 H的零曲线。因此，要通过同伦法求解 $F(x) = 0$，需从 $(x(0), 0) = (x_0, 0)$ 出发，对同伦方程 $H(x,t) = 0$ 的零曲线进行数值追踪，直至到达 $(x(1), 1) = (x^*, 1)$。更具体地说，从曲线上的给定点 $(x(t_i)\ t_i)$ 出发，可通过适当的更新规则 θ：$[0,1] \to [0,1]$，将 t_i 更新为$t_{i+1} = \theta(t_i)$，从而得到下一个点；例如，对于固定或自适应选取的增量 Δt，可采用 $\theta(t_i) = \min(t_i + \Delta t, 1)$。随后，对于固定的 t_{i+1}，从零阶预测值 $(x(t_i)\ t_{i+1})$ 给出的初始猜测出发，求解校正方程 $H(x, t_{i+1}) = 0$ （见图 2，其中预测值以黑色箭头表示）。

光滑零曲线存在的主要假设是，对于所有 $t \in \mathbb{R}$，0 都是 $H(x,\ t)$ 的正则值；也就是说，对于任意给定的 t，雅可比矩阵 $H_x(x,\ t)$ 在所有满足 $H(x,\ t) = 0$ $[4, 20]$ 的点 x 处都是正则的。一个直接推论是，解曲线可以关于同伦参数 t 进行参数化。此外，根据连续性论证，对于零曲线附近的点，牛顿法是良定义的，因此可以用于求解校正方程。由此得到的嵌入同伦法中的预测校正格式总结于算法 1 中。



算法 1 同伦法

输入： $x_0 \in \mathbb{R}^n$，更新规则 θ： $[0,1] \to [0,1]$
输出： $x^* \in \mathbb{R}^n$，其中 $F(x^*) = 0$

```
x ← x_0, t ← 0
当 t < 1 时执行
    t ← θ(t)
    当 ‖H(x,t)‖ > tol 时执行
        求解 H_x(x,t)Δx = −H(x,t)
        x ← x + Δx
    结束循环
结束循环
```

图 2：追踪 H的零曲线的可视化

注3.2。对于足够小的步长 $\Delta t = \theta(t) - t$，零阶预测器 $(x,\ t + \Delta t)$ 靠近同伦曲线，因此用于求解校正方程的牛顿法能够收敛。为提高预测器的精度（从而允许采用更大的步长），可以将元组 $(x,\ t + \Delta t)$ 替换为一阶（或切向）预测器 $(\tilde{x},\ t + \Delta t)$，其中 $\tilde{x} = x + \Delta t\, x'(t)$，且 $x'(t) \in \mathbb{R}^n$ 满足方程

$$H_x(x,t)x'(t) = -H_t(x,t). \tag{8}$$

预测方程 (8) 由对 $H(x(t)\ t) = 0$ 关于 t求导得到。如图 *2* 所示，与零阶预测器相比，一阶预测器（红色箭头所示）对零曲线上下一个点的近似更为准确。通常，在较小的步长（确保收敛）与较大的步长（沿曲线快速推进）之间取得良好平衡，对于设计高效算法至关重要。

4 障碍法

重新引入关于 x 的约束后，我们现在希望应用同伦方法来计算 (5) 的驻点。障碍法（或内点法）可将约束问题 (5) 重新表述为一系列参数化的无约束问题 [12], ，从而使相应的一阶最优性条件构成一个方程组，因此确保其与同伦方法兼容。接下来，我们将介绍障碍项的概念，以隐式处理不等式约束；阐述由此得到的延拓法（相对于关联的障碍参数）；最后，通过引入对偶变量来提高该方法的效率。

首先，我们注意到问题 (5) 可以表示为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad c(x) \geq 0 \tag{9}$$

其中 $c:\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$。盒约束 $a \leq x \leq b$ 的情形可通过 $c(x) := \left[c^a(x)^\top,\ c^b(x)^\top\right]^\top$ 处理，其中$m = 2n$ 且 $c^a(x) := x - a$，以及 $c^b(x) := b - x$。我们将 $\mathcal{F} := \{x \in \mathbb{R}^n :\ c(x) \geq 0\}$ 记为最小化问题 (9) 的可行域。

通过向目标函数中加入障碍项 $I(x)$（其中 $I:\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$），进一步替代显式约束。该项对目标函数的贡献由一个正权重控制，即障碍参数 $\mu > 0$。我们要求障碍项在可行域 $\mathcal{F}$ 的内部可微，并且，对于任意趋近于 $\mathcal{F}$ 边界上某一点的严格可行 x，均有 $I(x) \to +\infty$。因此，当 μ 足够大时，障碍函数 $B(x;\ \mu) := f(x) + \mu I(x)$ 的（无约束）极小化点位于可行域 $\mathcal{F}$ 的内部。这里我们选用对数障碍项 $I(x) := -\sum_{i=1}^{m} \log(c_i(x))$。

隐式假　　设 $c_i(x) > 0$ 对于 $i = 1, ..., m$ 现在，我们可以针对给定的障碍参数 $\mu > 0$ a 重新表述（9）s

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} B(x;\mu) := f(x) - \mu \sum_{i=1}^{m} \log(c_i(x)) \tag{10}$$

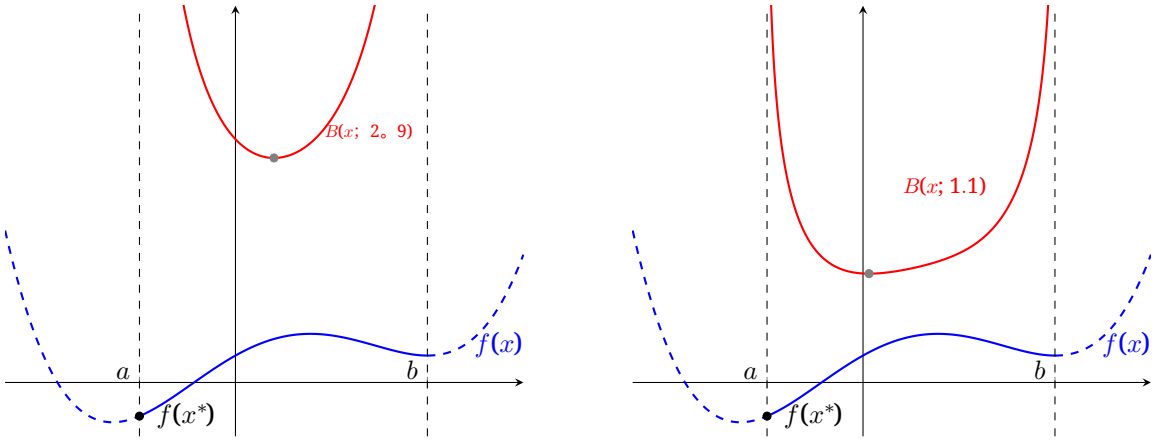
并陈述相应的一阶必要最优性条件

$$\nabla_x B(x;\mu) = \nabla f(x) - \mu \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{c_i(x)} \nabla c_i(x) = 0. \tag{11}$$

然后，使用牛顿法求解这些方程，针对一列递减的正参数 $(\mu_k)_k$，从 $\mu_0 \gg 0$ 开始；每个解 $x(\mu_k)$ 都作为更新后问题 $\nabla_x B(x;\mu_{k+1}) = 0$的初始猜测，直到达到目标值 $\mu_\infty \approx 0$。

我们用一个简单的例子来说明这一过程。

例 4.1. 函数 $f(x):= x^4 - x^3 - x^2 + x + 0.25$ 在区间$[a, b] = [-0.5, 1]$内有两个局部极小化点。为在 $[a, b]$ 内求得一个驻点，我们依次最小化障碍函数 $B(x;\ \mu):= x^4 - x^3 - x^2 + x + 0.25 - \mu(\log(x + 0.5) + \log(1 - x))$。图 *3* 显示，随着 μ减小，障碍函数的极小值趋近于 f 的一个约束极小值。



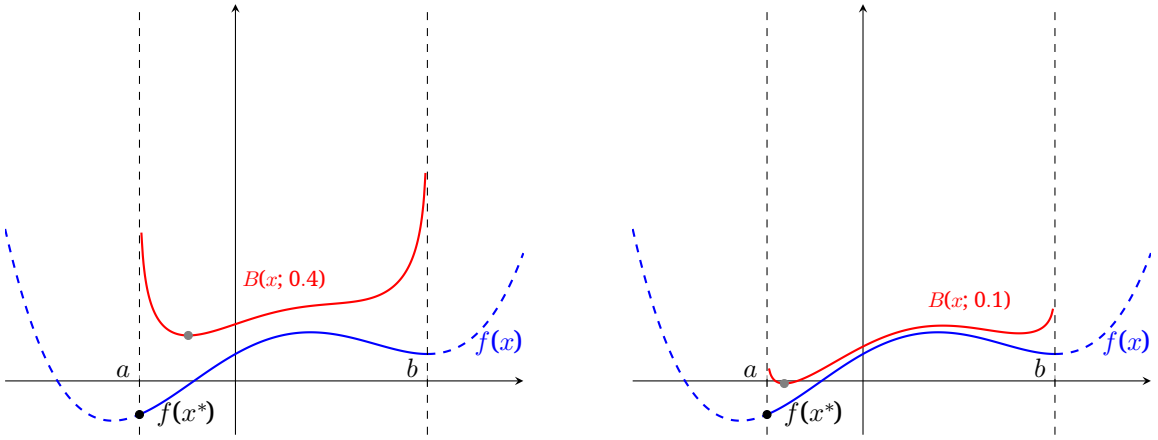


图 3：不同参数下的障碍函数 $\mu = 2.9$，1。1，0。4，0。1

采用这种方法会遇到两个主要困难。首先，当 μ 较小且 x 接近方程 (9) 的解时，海森矩阵 $\nabla_x^2 B(x;\mu)$ 会变得病态。不过，这并不会显著影响所计算出的牛顿方向的精度 [12]。其次，随着 μ 趋近于零，牛顿法的吸引域半径也趋近于零，因此障碍参数只能取非常小的步长，这使得该方法的效率很低 [23]。

引入对偶变量 $z := \mu \oslash c(x) \in \mathbb{R}^m$，其中 $\oslash$ 表示逐分量除法，即 $(\mu \oslash c(x))_i = \mu / c_i(x)$，$i = 1, \ldots\ldots, m$，（因此还需向最优性系统中添加 m 个额外方程），可以缓解这些不足，从而得到原始-对偶障碍公式。对偶变量的定义直接纳入最优性系统，得到

$$F(x, z; \mu) := \begin{bmatrix} \nabla f(x) - (Jc(x))^\top z \\ z \odot c(x) - \mu e_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_n \\ 0_m \end{bmatrix} \tag{12}$$

其中

$$Jc(x) := \begin{bmatrix} -\nabla c_1(x)^\top - \\ \vdots \\ -\nabla c_m(x)^\top - \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \; e_m = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m \tag{13}$$

并且 $\odot$ 表示两个列向量的逐分量乘法，即对于 a，$b \in \mathbb{R}^m$，逐分量乘积 $a \odot b \in \mathbb{R}^m$ 定义为 $(a \odot b)_i = a_i b_i$，$i = 1, \ldots\ldots, m$。

注4.2。 系统(12) 也可以通过扰动不等式约束最小化问题的 *KKT* 系统中的互补条件推导得出。因此，当障碍参数 μ 趋近于零 *[12]*时，对偶变量 z 趋近于相应的拉格朗日乘子λ 。

对于给定的 $\mu > 0$，问题 (12) 可通过对每个更新步 $(\Delta x, \Delta z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ 应用牛顿法来求解元组 $(x, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$，其中每一步均满足

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) - \sum_{i=1}^m z_i \nabla^2 c_i(x) & -(Jc(x))^\top \\ ZJc(x) & C(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta z \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(x) - (Jc(x))^\top z \\ z \odot c(x) - \mu e_m \end{bmatrix} \tag{14}$$

算法 2 原始-对偶障碍法

输入： $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 严格可行，更新规则 θ： $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$， $\mu_0 \gg 0$，$\mu_\infty \approx 0$

输出： $(x,\ z)$ 近似满足（9）的 KKT 系统

$x \leftarrow x_0, \mu \leftarrow \mu_0$

$z \leftarrow \mu_0 \oslash c(x_0)$

当 $\mu \geq \mu_\infty$ **时执行**

  $\mu \leftarrow \theta(\mu)$

  当 $\|F(x,\ z;\ \mu)\| > tol$ **时**

    按照式 (14) 求解 $JF(x,\ z;\ \mu)\begin{bmatrix}\Delta x\\ \Delta z\end{bmatrix} = -F(x,\ z;\ \mu)$

    $x \leftarrow x + \Delta x$

    $z \leftarrow z + \Delta z$

  结束循环

结束循环

其中 $Z := \mathrm{diag}(z_i)$，且 $C(x) := \mathrm{diag}(c_i(x))$。相应的收敛球半径确实有一个严格为正的下界，因为当 μ 趋于零时 [23]。

原始-对偶障碍项方法的基本形式见算法 2。请注意，该算法仅给出了式 (9) 的 KKT 系统解的近似值；目标参数 μ_∞ 越接近零，近似质量越高。

注 4.3。 初始猜测 x_0 最好选取为可行域的解析中心，即作为$(-1)\cdot\sum_{i=1}^{m}\log(c_i(x))$的极小化点。对于障碍参数的更新，可以采用简单的收缩方法，即$\theta(\mu) = \alpha\cdot\mu$，其中 $\alpha \in (0,\ 1)$。关于这一方面的更先进技术可参见 *[17]*。

在仅存在盒约束的情况下，令 $z = [(z^a)^\top,\ (z^b)^\top]^\top \in \mathbb{R}^{2n}$，则在（12）和（14）中可得

$$F_{box}(x, z^a, z^b, \mu) := \begin{bmatrix}\nabla f(x) - z^a + z^b\\ z^a \odot c^a(x) - \mu e_n\\ z^b \odot c^b(x) - \mu e_n\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0_n\\ 0_n\\ 0_n\end{bmatrix} \tag{15}$$

and

$$\begin{bmatrix}\nabla^2 f(x) & -I_n & I_n\\ Z^a & C^a(x) & 0\\ -Z^b & 0 & C^b(x)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Delta x\\ \Delta z^a\\ \Delta z^b\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}\nabla f(x) - z^a + z^b\\ z^a \odot c^a(x) - \mu e_n\\ z^b \odot c^b(x) - \mu e_n\end{bmatrix} \tag{16}$$

其中 $Z^a := \mathrm{diag}(z_i^a)$ $Z^b := \mathrm{diag}(z_i^b)$，相应地， $C^a(x) := \mathrm{diag}(c_i^a(x))$， $C^b(x) := \mathrm{diag}(c_i^a(x))$。在这种情况下，可行域的解析中心（因此也是初始猜测）可以显式计算，其表示为$x_0 := \frac{a+b}{2}$。

5 障碍项同伦方法

我们提出一种结合方法，同时利用同伦法稳健的收敛特性（无需初始猜测接近解）以及障碍法对不等式约束（此处为盒约束）的隐式处理。

为此，我们先回顾全局同伦映射 $H(x,t) := F(x) - (1-t)F(x_0)$。此外，我们假设 $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 是目标函数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$的最优性函数，即 $F(x) = 0$ 给出了使 x最小化 f的必要条件。在无约束情形下，函数 F 与 f 的梯度一致。对于带有 m 显式约束的最小化问题， F 可扩展为从 $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ 到 $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ 的映射，其中 $(x,z) \mapsto F(x,z)$，而 $z \in \mathbb{R}^m$ 作为约束的乘子。假设 $F(x,z) = 0$ 描述一个 KKT 系统（通常意味着 F 不可微），对于给定的 $\mu > 0$，我们将方程 $F(x,z;\mu) = 0$ 视为扰动 KKT 系统（保持可微性），其定义见式（12）。对于模型问题（5），这对应于 $F_{box}(x,z^a,z^b;\mu) = 0$。

因此，我们可以将（原始-对偶）障碍同伦映射定义为

$$\begin{aligned} H(x,z^a,z^b,\mu,t) &:= F_{box}(x,z^a,z^b;\mu) - (1-t)F_{box}(x_0,z_0^a,z_0^b;\mu_0) \\ &= \begin{bmatrix} \nabla f(x) - z^a + z^b - (1-t)(\nabla f(x_0) - z_0^a + z_0^b) \\ z^a \odot c^a(x) - \mu e_n - (1-t)(z_0^a \odot c^a(x_0) - \mu_0 e_n) \\ z^b \odot c^b(x) - \mu e_n - (1-t)(z_0^b \odot c^b(x_0) - \mu_0 e_n) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \nabla f(x) - z^a + z^b - (1-t)(\nabla f(x_0) - z_0^a + z_0^b) \\ z^a \odot c^a(x) - \mu e_n \\ z^b \odot c^b(x) - \mu e_n \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{17}$$

其中，$z_0^a \odot c^a(x_0) - \mu_0 e_n = z_0^b \odot c^b(x_0) - \mu_0 e_n = 0$ 根据 z_0^a和 z_0^b的构造成立。H 关于同伦变量（x，z^a，z^b）的雅可比矩阵进一步表示为

$$JH(x,z^a,z^b,\mu,t) = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & -I_n & I_n \\ Z^a & C^a(x) & 0 \\ -Z^b & 0 & C^b(x) \end{bmatrix} \tag{18}$$

其中，对角矩阵 Z^a，Z^b 和 $C^a(x)$ $C^b(x)$的定义与式（14）相同。因此，该牛顿系统与原始-对偶障碍方法（16）中的牛顿系统一致，唯一的区别在于，右端项的扰动由 t 控制，且仅出现在同伦方法中。

注 *5.1.* 障碍参数 μ 的更新规则被设计为依赖于同伦参数 t，即 $\mu = \mu(t)$。相应地，要求 $\mu(0) = \mu_0$ 且 $\mu(1) = \mu_\infty$，其中 μ_0 为初始障碍参数，μ_∞ 为目标障碍参数，例如 $\mu(t) := t\mu_\infty + (1-t)\mu_0$。因此，式（17）中的同伦映射可表示为$H(x,z^a,z^b,t) := H(x,z^a,z^b,\mu(t),t)$，从而消除对 μ的显式依赖。因此，给定映射$t \mapsto \mu(t)$并将 x 替换为（x,z^a,z^b）后，即可使用算法 *1* 计算式（*5*）的一个驻点。

推广至偏微分方程约束 忽略设计变量的盒约束，偏微分方程约束最小化问题 (4) 的拉格朗日函数 $\mathcal{L}\colon Q \times V \times V \to \mathbb{R}$为 $\mathcal{L}(\rho,u,p) := J(\rho,u) + \langle e(\rho,u),p\rangle_{V^* \times V}$。其中 ρ，u 和 p 分别表示 ρ，u和 p的有限元系数向量，则离散化拉格朗日函数 $\mathrm{L}\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^l \to \mathbb{R}$ 的驻定条件为

$$\nabla \mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) := \begin{bmatrix} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) \\ \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) \\ \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) \end{bmatrix} = 0 \tag{19}$$

其中 $\partial_\mathrm{p}\mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) = 0$和 $\partial_\mathrm{u}\mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) = 0$分别表示离散化的状态方程和伴随方程。

现在，我们可以通过将 $F(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p}) := \nabla \mathrm{L}(\rho,\mathrm{u},\mathrm{p})$ 嵌入原始-对偶障碍框架中，来隐式地对 ρ 施加盒约束，

原始-对偶障碍框架，即，

$$F_{box}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}, z^a, z^b; \mu) := \begin{bmatrix} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) - z^a + z^b \\ \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) \\ \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) \\ z^a \odot c^a(\rho) - \mu e_n \\ z^b \odot c^b(\rho) - \mu e_n \end{bmatrix}. \tag{20}$$

相应的全局同伦进一步定义为

$$\begin{aligned} H(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}, z^a, z^b, t) &= H(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}, z^a, z^b, \mu(t), t) \\ &:= F_{box}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}, z^a, z^b; \mu(t)) - (1-t) F_{box}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0, z_0^a, z_0^b; \mu_0) \\ &= \begin{bmatrix} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) - z^a + z^b - (1-t)(\partial_\rho \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0) - z_0^a + z_0^b) \\ \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) - (1-t)(\partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0)) \\ \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) - (1-t)(\partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0)) \\ z^a \odot c^a(\rho) - \mu(t) e_n - (1-t)(z_0^a \odot c^a(\rho_0) - \mu_0 e_n) \\ z^b \odot c^b(\rho) - \mu(t) e_n - (1-t)(z_0^b \odot c^b(\rho_0) - \mu_0 e_n) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) - z^a + z^b - (1-t)(\partial_\rho \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0) - z_0^a + z_0^b) \\ \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) \\ \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) \\ z^a \odot c^a(\rho) - \mu(t) e_n \\ z^b \odot c^b(\rho) - \mu(t) e_n \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{21}$$

其中我们还 另外使用 $\partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0) = 0$ 和 $\partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}_0) = 0$，也就是说，状态和伴随变量的初始化 满足相应的方程。

随后可将牛顿系统所需的同伦映射关于 $(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}\ z^a, z^b)$ 的雅可比矩阵表示为

$$JH(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}, z^a, z^b, t) = \begin{bmatrix} \partial_\rho \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & \partial_\mathrm{u} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & \partial_\mathrm{p} \partial_\rho \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & -I_n & I_n \\ \partial_\rho \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & \partial_\mathrm{u} \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & \partial_\mathrm{p} \partial_\mathrm{u} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & 0 & 0 \\ \partial_\rho \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & \partial_\mathrm{u} \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) & 0 & 0 & 0 \\ Z^a & 0 & 0 & C^a(\rho) & 0 \\ -Z^b & 0 & 0 & 0 & C^b(\rho) \end{bmatrix} \tag{22}$$

其中我们使用了 $\partial_\mathrm{p} \partial_\mathrm{p} \mathrm{L}(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}) = 0$。

因此，根据 ρ_0 计算得到初始向量 u_0 和 p_0，按照第4节所述初始化对偶变量z^a 和 z^b，并采用障碍参数的更新规则，可以使用算法 1 的扩展来计算原始目标问题 (4) 的驻点。该过程总结于算法3中。

6 数值结果

在后续数值测试中，我们计划将算法3中指定的障碍同伦方法应用于离散化后的公式，以求解第2节中定义于式(4)的柔顺性问题的一个驻点。数值实验表明，在这种情况下，与采用零阶预测器相比，采用一阶预测器（需要额外计算以求解方程(8)）并不能显著减少所需的同伦步总数（见注3.2）。因此，后续我们仅采用后者。

算法3 偏微分方程约束优化问题的障碍同伦法

输入： $\rho_0 \in (0,1)^n$，更新规则 $\theta(t)$、$\mu(t)$、$\mu_0 \gg 0$、$\mu_\infty \approx 0$

输出： $(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}\ z^a, z^b)$ 近似满足离散化后的 KKT 系统 (4) 的

$\rho \leftarrow \rho_0$、$t \leftarrow 0$、$\mu \leftarrow \mu_0 =: \mu(0)$

$\mathrm{u}_0 \leftarrow$ 是 $\partial_{\mathrm{p}} L(\rho_0, \mathrm{u}, 0) = 0$ 的解，$\mathrm{p}_0 \leftarrow$ 是 $\partial_{\mathrm{p}} L(\rho_0, \mathrm{u}_0, \mathrm{p}) = 0$ 的解

$z^a \leftarrow \mu_0 \oslash c^a(\rho_0)$, $z^b \leftarrow \mu_0 \oslash c^b(\rho_0)$

当 $t < 1$ **时执行**

$t \leftarrow \theta(t)$, $\mu \leftarrow \mu(t)$

当 $\|H(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}\ z^a, z^b, t)\| > tol$ **时执行**

求解 $JH(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}\ z^a, z^b, t) \begin{bmatrix} \Delta\rho \\ \Delta\mathrm{u} \\ \Delta\mathrm{p} \\ \Delta z^a \\ \Delta z^b \end{bmatrix} = -H(\rho, \mathrm{u}, \mathrm{p}\ z^a, z^b, t)$

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \mathrm{u} \\ \mathrm{p} \\ z^a \\ z^b \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} \rho \\ \mathrm{u} \\ \mathrm{p} \\ z^a \\ z^b \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Delta\rho\Delta \\ \mathrm{u} \\ \Delta\mathrm{p} \\ \Delta z^a \\ \Delta z^b \end{bmatrix}$$

结束循环

结束循环

矩形计算域 $\Omega = [0, 2.4] \times [0, 0.8]$（见图4）的边界由齐次狄利克雷边界 $\Gamma_{D,\ 0} = [0, 0.12] \times \{0\} \cup [2.28, 2.4] \times \{0\}$、非齐次诺伊曼边界 $\Gamma_{N,\ g_N} = [1.08, 1.32] \times \{0\}$（其上施加牵引力 $g_N = (0,\ -1)^\top$）以及其余部分上的齐次诺伊曼边界 $\partial\Omega \setminus (\Gamma_{D,\ 0} \cup \Gamma_{N,\ g_N})$组成。

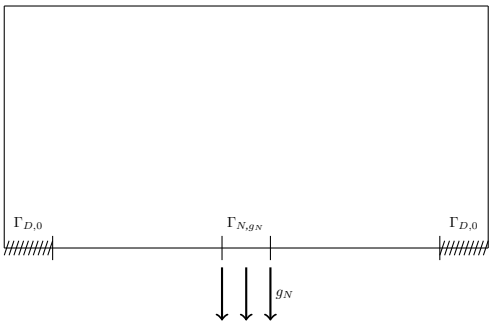


图4：设计域 $\Omega = [0, 2.4] \times [0, 0.8]$

对 Ω 进行离散化时，使用了一个包含 11100 个三角形单元和 5711 个顶点的网格。密度变量的函数空间 $Q = H^1(\Omega)$ 和用于状态变量及伴随变量的向量值空间 $V = (H^1_{0,\Gamma_D}(\Omega))^2$ 均采用分片线性全局连续函数进行近似。第一种材料和替代材料（用于模拟空气）的拉梅参数分别定义为 $\lambda_1^L := 0.750$, $\mu_1^L := 0.375$ 和 $\lambda_0^L := 7.498 \times 10^{-5}$, $\mu_0^L := 3.750 \times 10^{-5}$。

表示初始（非二值）设计的密度变量设为常数 $\rho_0 \equiv 0.5$。为确保设计并非完全填满，体积控制项的权重设为 $\gamma = 9.75$。金兹堡-朗道参数（与两种材料之间界面的厚度成正比）定义为 $\varepsilon = 0.0075$，相应能量项的权重设为 $\beta = 0.5$。对于障碍参数 μ，选择在 t 中从初始值 $\mu_0 = 50$ 线性插值至目标值 $\mu_\infty = 0.001$。同伦参数的更新遵循朴素的步长规则，初始步长为 $\Delta t_{init} = 0.25$。若在更新t后牛顿法收敛，则步长增加50%（但不超过上界 $\Delta t_{max} = 0.25$）；若牛顿法发散，则步长减半。

该方法　　如上所定义的，计算一个驻点需要 26 次（成功）迭代，即 t 中的步数　　.

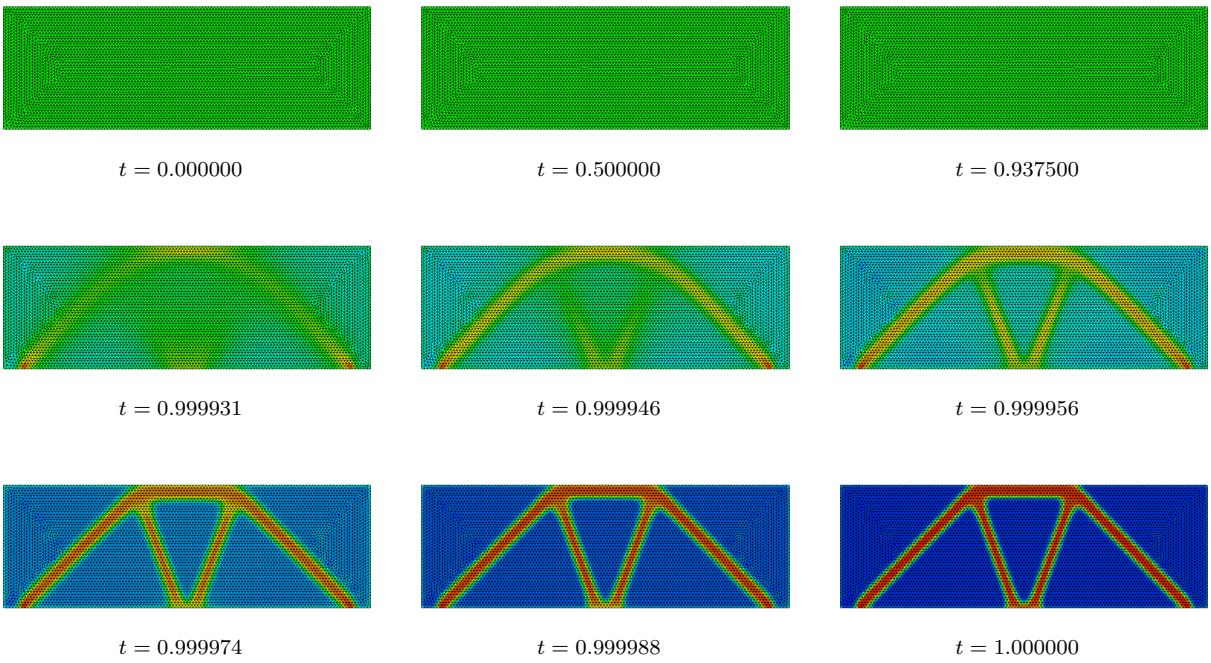


图5：设计从绿色的中间材料（$\rho_0 \equiv 0.5$）开始演化，并随着 t 接近目标参数 1，逐渐逼近二元设计；其中第一种材料为红色，替代材料为蓝色

由于朴素更新规则有时会将步长设得过大，因此总共进行了 47 次迭代（见图6）。图5展示了相关设计随 t 的演变情况（以密度变量的取值表示），其中红色对应第一种材料，蓝色对应替代材料，两者之间的颜色对应中间材料。从图5和图6可以明显看出，随着 t 接近 1，使牛顿法收敛所需的小步长与 $t = 1$ 附近设计的显著变化相关。对于较小的 t 值，则观察不到这种模式。

7 结论与展望

我们开发了一种（原始-对偶）障碍同伦方法，并用它计算了一个非凸设计优化问题的驻点。该问题包含作用于状态变量的偏微分方程约束，以及用于限制密度变量可行取值的盒约束。这种延拓方法对目标问题进行了双重扰动。第一种扰动与由初始猜测的选择所引出的辅助问题有关；第二种则对应于为防止设计变量逸出盒约束所描述的可行域而引入的障碍项。在该方法的过程中，障碍项的权重和辅助问题的贡献同时逐渐减小（由同伦参数控制），直至达到目标问题。

柔顺度最小化问题的数值结果验证了同伦法和障碍法的有效性：前者具有全局化性质（就初始猜测而言），后者则能隐式处理不等式

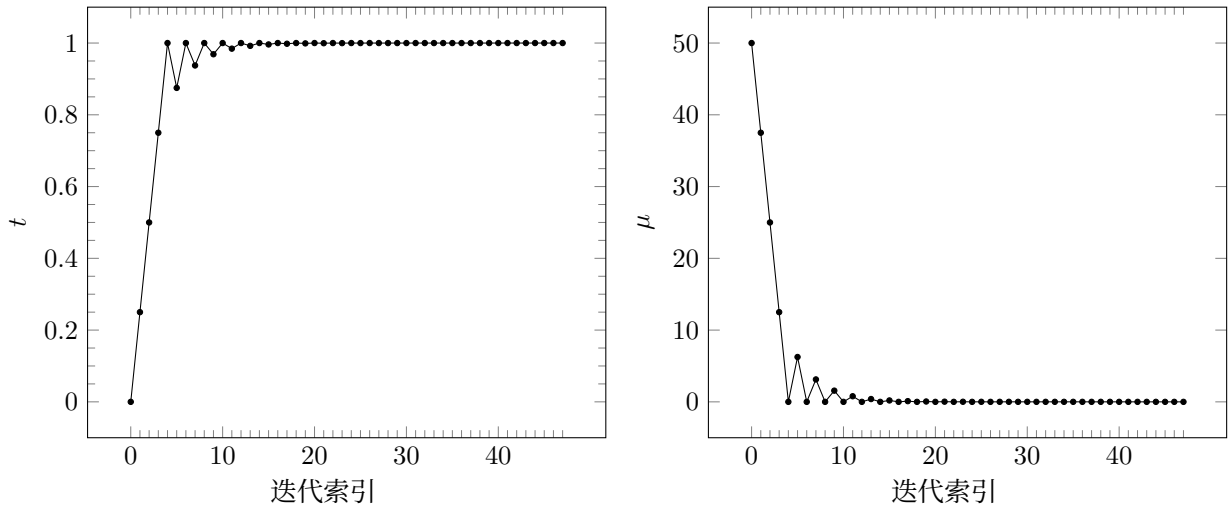


图6：同伦参数（左）和障碍参数（右）的演变

约束。也就是说，从无偏的非二元设计开始（因此无需预先了解局部最优设计），能够找到一个可行的驻点解，其拓扑并非初始猜测中已有的。

值得注意的是，在选择目标障碍参数 μ_∞ 时，需要在参数足够小以便良好地逼近目标问题，与参数足够大以便在 μ 趋近于 μ_∞ 时促进子问题解的计算之间取得平衡，这对算法的设置至关重要。数值测试中观察到，当 μ_∞ 降至某个阈值以下时，虽然密度变量的取值会更接近 0 或 1，但不再引发拓扑变化，反而会加剧目标问题的病态性。

未来，我们计划采用本文提出的方法，高效探索多目标拓扑优化问题的设计空间。将帕累托曲线 [15, 19] 的追踪与去膨胀 [18] 相结合，相较于更传统的一阶方法，可能会得到局部最优性更好的帕累托前沿。

致谢

作者的研究工作部分得到达姆施塔特工业大学、格拉茨工业大学、林茨约翰内斯·开普勒大学和林茨奥地利科学院工业数学研究所联合设立的 DFG/FWF 合作研究中心 CREATOR 资助（DFG：项目编号 492661287/TRR 361；FWF：10.55776/F90）。P.G. 部分得到上奥地利州资助。

参考文献

[1] L. Adam、M. Hintermüller 和 T. M. Surowiec。用于受应变光子器件拓扑优化的偏微分方程约束优化方法。*Optimization and Engineering*，19(3)：521–557，2018年7月。[2] G. Allaire、C. Dapogny 和 F. Jouve。形状与拓扑优化。载于《几何偏微分方程》第二部分，*A. Bonito* 和 *R. Nochetto* 编，*Handbook of Numerical Analysis*，第*22*卷，第1–132页，2021年。

[3] G. Allaire、F. Jouve 和 A.-M. Toader。基于灵敏度分析和水平集方法的结构优化。计算物理学杂志，194(1)：363–393，2004年。[4] E. L. Allgower 和 K. Georg。数值延拓方法：导论，第13卷。施普林格科学与商业媒体，2012年。[5] M. P. Bendsøe 和 O. Sigmund。拓扑优化中的材料插值方案。应用力学档案，69(9)：635–654，1999年。[6] M. P. Bendsøe 和 O. Sigmund。《拓扑优化：理论、方法与应用》。施普林格，柏林，2003年。[7] A. Cesarano、B. Endtmayer 和 P. Gangl。高阶形状优化的同伦方法：全局化形状牛顿法与帕累托前沿追踪，2024年。[8] T. Cherrière、L. Laurent、S. Hlioui、F. Louf、P. Duysinx、C. Geuzaine、H. Ben Ahmed、M. Gabsi 和 E. Fernández。利用 Wachspress插值进行多材料拓扑优化，以设计三相电机定子。结构与多学科优化，65(12)，2022年11月。[9] D. M. Dunlavy 和 D. P. O’Leary。用于全局优化的同伦优化方法。2005年12月。[10] A. Evgrafov。用于拓扑优化的状态空间牛顿法。《计算机在应用力学与工程中的方法》，278：272–290，2014年。[11] F. Feppon、G. Allaire、C. Dapogny 和 P. Jolivet。利用贴体网格和并行计算优化热流体-结构系统的拓扑。计算物理学杂志，417：109574，2020年。[12] A. Forsgren、P. E. Gill 和 M. H. Wright。非线性优化的内点法。*SIAM*评论，44(4)：525–597，2002年。[13] P. Gangl、N. Krenn 和 H. De Gersem。电机在最高温度和应力约束下的多材料拓扑优化，2025年。[14] I. Malinen 和 J. Tanskanen。通过界定同伦参数，提高同伦延拓方法在多重性研究中的鲁棒性。计算机与化学工程，34(11)：1761–1774，2010年。[15] A. Martín 和 O. Schütze。帕累托追踪器：一种用于多目标优化问题的预测校正法。工程优化，50(3)：516–536，2017年6月。[16] L. Modica。相变梯度理论与最小界面准则。《理性力学与分析档案》，98(2)：123–142，1987年6月。[17] J. Nocedal 和 S. J. Wright。数值优化。运筹学与金融工程施普林格丛书。施普林格，纽约州纽约市，第2版，2006年。[18] I. P. A. Papadopoulos、P. E. Farrell 和 T. M. Surowiec。计算拓扑优化问题的多个解。*SIAM*科学计算杂志，43(3)：A1555–A1582，2021年。[19] S. Schmidt 和 V. Schulz。多目标优化中的帕累托曲线延拓。帕西菲克优化杂志，第4卷，2008年5月。[20] H. Schwetlick。《非线性方程的数值解法》。《自然科学与技术数学》。德国科学出版社，1979年。

[21] O. Sigmund 和 J. Petersson. 拓扑优化中的数值不稳定性：关于处理棋盘格、网格依赖性和局部极小值的方法综述。《结构优化》，16(1):68–75，1998年8月。[22] K. Svanberg. 移动渐近线法——一种新的结构优化方法。《国际工程数值方法期刊》，24(2):359–373，1987年。[23] M. C. Villalobos、R. A. Tapia 和 Y. Zhang. 非线性规划中两个等价系统的牛顿法收敛球。《优化理论与应用期刊》，121(3):489–514，2004年6月。