arXiv:2601.17708v1 [math.NA] 25 Jan 2026

高阶网格 r自适应：结合切向松弛并保证网格有效性

Ketan Mittal*† Veselin Dobrev* Tzanio Kolev* Vladimir Tomov*

摘要

高阶网格对于在曲线坐标域中实现最优收敛率、保持对称性，以及在移动网格模拟中与关键流动特征对齐至关重要 [1]，，但其质量却难以控制。在先前的工作中，我们基于目标矩阵优化范式（TMOP）开发了相关技术，用于使给定的高阶网格适应偏微分方程（PDE）的几何与解 [2, 3]。在此基础上，我们扩展了该框架，以解决高阶网格 r自适应研究中的两个关键空白。首先，我们仅使用离散网格表示，在曲面上引入切向松弛，从而无需访问底层几何信息（例如 CAD 模型）。其次，我们确保整个区域内的雅可比行列式始终为正。这种行列式正性对于在模拟中使用通过 r自适应得到的高阶网格执行任意求积方案至关重要。通过多种数值实验，证明了所提出方法的稳健性。

1 引言

高阶（曲线）有限元和谱元网格已成为偏微分方程数值求解中的重要工具，尤其适用于要求每个自由度具有高精度的应用领域（例如计算流体力学、结构力学和电磁学）。通过使用次数为 $p > 1$ 的多项式表示几何形状，高阶网格能够确保对所关注的曲线几何形状进行准确建模。

为确保所关注的偏微分方程获得准确的数值解，网格单元在形状、尺寸和方向方面都必须具有良好的质量。单元形状不佳可能导致病态代数系统[4] ；更糟的是，纠缠（无效）的单元甚至会使求解器彻底失效。因此，控制网格质量并保证网格有效性，对于充分发挥高阶网格。

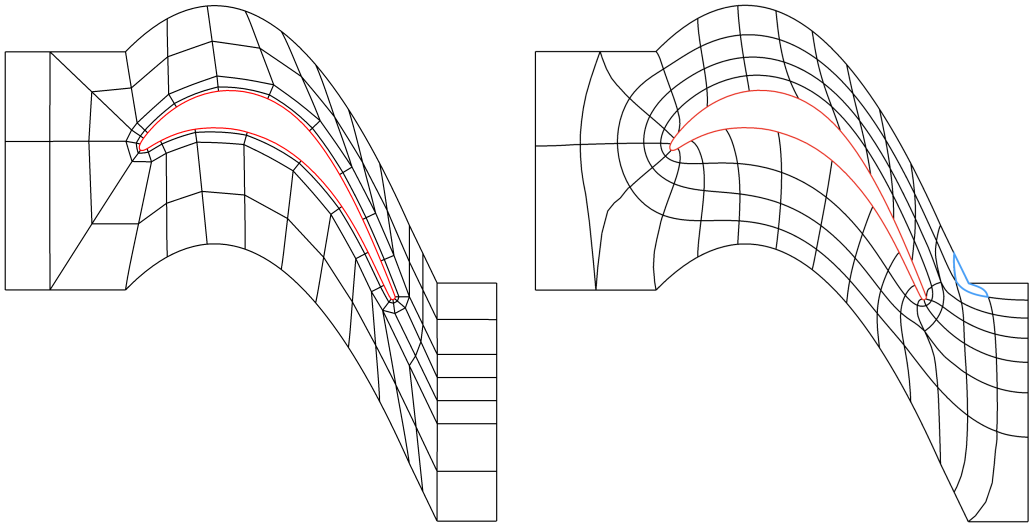
尽管高阶网格优化取得了显著进展，但仍有两个关键挑战： (i) 保证网格有效性，即确保雅可比行列式在区域内处处连续为正；以及 (ii) 在无法显式访问底层几何形状（例如 CAD 模型）的情况下，实现曲边界上节点在几何上准确的切向松弛。

现有的 r 自适应技术通过在有限的一组求积点 [14, 15, 16] 处采样雅可比行列式来确定网格有效性，[17, 18, 19, 20]或采用伯恩斯坦基，以相应的系数作为界。 [21]采样可能会漏掉求积点之间的局部反转，而伯恩斯坦界往往过于保守。 [21]我们利用近期开发的技术计算雅可比行列式的可证明界，从而保证网格有效性，[22, 21], 避免了现有方法的不足。基于移位障碍度量的网格解缠也需要雅可比行列式的下界。 [23]使用这类方法时，如果屏障值不够低（由于采样不足），网格解缠可能会失败；如果屏障过于保守（例如伯恩斯坦系数造成的高估），则可能进展缓慢、效率低下。我们将雅可比行列式的可证明下界与移位障碍度量结合使用，从而提高网格解缠过程的鲁棒性。

为最大限度地提升r-自适应过程中的网格改进效果，应允许边界节点沿曲面切向移动，同时不损害几何精度。现有的切向松弛技术通常利用 CAD参数化 [24, 25, 26, 27], ，但这些技术需要在现有的有限元和谱元框架中开发专用方法，以便与 CAD 模型交互。其他切向松弛技术包括使用距离函数 [4] 和水平集 [28, 29],隐式定义曲面，但这些方法无法保证准确恢复目标几何形状。我们通过允许边界

*劳伦斯利弗莫尔国家实验室，美国加利福尼亚州利弗莫尔 {mittal3,dobrev1,kolev1,tomov2}@llnl.gov.

†通讯作者。



（a）初始网格　　（b）优化网格

图1：叶片网格示例，展示了（a）初始高阶网格和（b）优化后的网格。

节点先自由移动以改进网格质量，然后在每次r-自适应迭代后立即投影到原始高阶网格曲面上的最近点。由此，该方法无需显式访问底层几何形状（例如 CAD 模型），并能保证优化后的网格曲面与原始高阶网格保持一致。

图1展示了现有技术在用于模拟涡轮叶片周围流动的四阶网格的 r-自适应方面存在的不足。由于边界节点沿叶片曲面保持固定，优化网格在上表面附近出现了扭曲单元。此外，由于仅在一组求积点处检查雅可比行列式，其中一个单元发生了纠缠（以蓝色突出显示），尽管采样得到的最小雅可比值为正（2.8×10^{-5}）。需要注意的是，如果使用伯恩斯坦基表示问题单元的雅可比行列式七阶函数，则估计的下界为-0.0302，比实际最小值-0.00104低一个数量级。

本文其余部分安排如下。第 2 节介绍我们当前的 r-自适应方法。第 3 节介绍所提出的在曲面上保证网格有效性并进行切向松弛的方法。第 4 节通过多项数值实验展示这些方法的有效性。第 5 节总结全文并提出未来的研究方向。

2 预备知识

2.1 高阶网格与函数表示在我们的基于有限元的框架中，区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 被离散为一系列曲线网格单元 Ω^e，$e = 1 \dots N_E$的并集，每个单元的阶数为 p。为获得这些单元的离散表示，我们在参考单元 Ω^e的 N_p 节点上选取一组标量基函数 $\{w_i\}_{i=1}^{N_p}$。对于张量积单元（二维中的四边形和三维中的六面体），$N_p = (p+1)^d$，且该基函数张成每个变量的次数至多为 p 的所有多项式空间。这些 p 阶基函数通常选为参考单元高斯–洛巴托节点处的拉格朗日插值函数。网格 $\mathcal{M}$ 中单元 Ω^e 的位置由一个大小为 $d \times N_p$ 的矩阵 $\boldsymbol{x}_e$ 完整描述，其列表示该单元自由度（DOF）的坐标。给定 $\boldsymbol{x}_e$，我们引入参考单元与物理单元之间的映射 $\Phi_e : \bar{\Omega}^e \to \mathbb{R}^d$:

$$\boldsymbol{x}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \Phi_e(\bar{\boldsymbol{x}}) \equiv \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{x}_{e,i} w_i(\bar{\boldsymbol{x}}), \ \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{\Omega}^e, \ \boldsymbol{x} \in \Omega^e, \tag{2.1}$$

其中，$\mathbf{x}_{e,\,i}$ 表示 $\boldsymbol{x}_e$的第 i列，即单元Ω^e的第 i个节点。

在全文中，$\boldsymbol{x}$ 表示由 (2.1) 定义的位置函数，$\boldsymbol{x}_e$ 表示单元 Ω^e 的节点位置逐元素向量/矩阵。

与 (2.1) 类似，任意高阶函数 u 定义为

as

$$u(\bar{\boldsymbol{x}}) = \sum_{j=1}^{N_u} u_j \phi_j(\bar{\boldsymbol{x}}), \quad \bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{\Omega}^e \tag{2.2}$$

其中 $\{u_j\}_{j=1}^{N_u}$ 是基函数 $\{\phi_j\}_{j=1}^{N_u}$的系数，而 N_u 取决于用于表示函数 $u(\bar{\boldsymbol{x}})$的多项式阶数。

2.2 通过 r-自适应进行 TMOP 网格质量改进r-自适应

对于给定的节点坐标为 $\boldsymbol{x}_e$ 的单元，在任意参考点 $\bar{\boldsymbol{x}} \in \Omega^e$ 处，映射 Φ_e 的雅可比矩阵为

$$A_{ab}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \frac{\partial x_a(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial \bar{x}_b} = \sum_{i=1}^{N_p} x_{i,a} \frac{\partial \bar{w}_i(\bar{\boldsymbol{x}})}{\partial \bar{x}_b}, \quad a, b = 1 \dots d \tag{2.3}$$

其中， x_a 表示 $\boldsymbol{x}$(2.1) 的第 a 个分量，而$x_{i,\ a}$ 表示 $\boldsymbol{x}_{e,\ i}$ 的第 a 个分量，即单元 Ω^e 中的第 i 个自由度。雅可比矩阵 A 表示物理单元 Ω^e 相对于参考单元 Ω^e 在参考点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 处的局部变形。该矩阵在有限元法中发挥着重要作用，因为它用于确定网格有效性（网格中每一点的 $\alpha \equiv \det(A)$ 都必须大于 0），也用于计算导数和积分。雅可比矩阵最终会影响解 [4] 的精度和计算成本。这引出了 TMOP 的核心思想：通过优化网格来控制网格中的局部雅可比矩阵 $A_{d\times d}$。

目标矩阵使用 TMOP 进行网格优化的第一步，是为网格中的每个点指定一个目标变换矩阵$W_{d\times d}$，类似于 $A_{d\times d}$。目标的构造通常基于这样一个事实：任意雅可比矩阵都可以表示为四个几何分量的组合 [30]，，即体积、旋转、偏斜度和长宽比：

$$W_{d\times d} = \underbrace{\zeta}_{\text{[volume]}} \circ \underbrace{R_{d\times d}}_{\text{[rotation]}} \circ \underbrace{Q_{d\times d}}_{\text{[skewness]}} \circ \underbrace{D_{d\times d}}_{\text{[aspect ratio]}}. \tag{2.4}$$

实际应用中，用户可以将 W 指定为其感兴趣的任意四种基本分量的组合，以用于网格优化。本文主要关注确保单元具有良好的 形状（偏斜度和长宽比），因此将 W 设为理想单元的形状，即四边形单元对应正方形，六面体单元对应立方体，三角形和四面体对应等边单纯形。此外，尺寸分量 ζ 在整个区域内保持恒定，通常根据网格中单元的平均体积来设定。关于高级技术

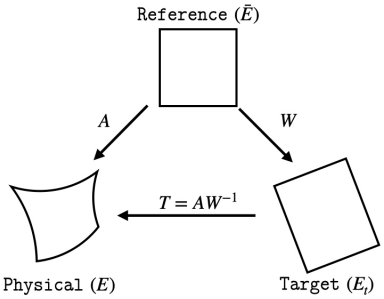


图 2：主要 TMOP 矩阵的示意图。

如何构造空间变化的 W ，以优化不同的几何参数，甚至根据偏微分方程的解自动调整网格，请参见 [3, 31, 32]。

网格质量度量TMOP 方法的下一个关键组成部分是网格质量度量，用于衡量当前雅可比变换 A 与目标变换 W 之间的偏差。图 2 中的网格质量度量 $\mu(T)$ $T = AW^{-1}$ 通过一些几何参数比较 A 和 W。例如，$\mu_{2,\ s} = \frac{|T|^2}{2\tau} - 1$ 是一种形状度量[1]，取决于偏斜度和长宽比分量，但不受方向/旋转和体积影响。这里，$|T|$ 和 τ 分别是 T的弗罗贝尼乌斯范数和行列式。类似地，$\mu_{77,\ v} = \frac{1}{2}(\tau - \tau^{-1})^2$是一种大小/体积度量，仅取决于单元的体积。不同的度量也可以通过凸组合进行组合。例如，$\mu_{80,\ vs} = \gamma\mu_{2,\ s} + (1-\gamma)\mu_{77,\ v}$， $0 \le \gamma \le 1$。有时，我们也会使用直接依赖于 A和 W（而非通过 T依赖）的度量，并将其记为 $\nu(A,\ W)$。

TMOP 目标函数 使用网格质量度量，网格优化问题就是最小化全局目标函数：

$$F(\boldsymbol{x}) = \sum_{\Omega^e \in \mathcal{M}} \int_{\Omega^{e_t}} \mu(T(\boldsymbol{x}))\, d\boldsymbol{x}_t, \tag{2.5}$$

其中， F 是网格中每个单元的 TMOP 目标函数之和，而 Ω^{e_t} 是与单元 Ω^e对应的目标单元。最小化 (2.5) 会使节点移动，从而在网格质量度量所约束的几何参数方面，让局部雅可比变换 A 在每个点都尽可能接近目标变换 W。

[1] The metric subscript follows the numbering in [33, 30].

求解器 在我们的框架中，我们使用牛顿法迭代地最小化 F，方法如下：

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \gamma \mathcal{H}^{-1}(\boldsymbol{x}_k)\mathcal{J}(\boldsymbol{x}_k). \tag{2.6}$$

这里，$\boldsymbol{x}_k$ 表示在进行 r-自适应时第 k次牛顿迭代的节点位置，γ 是由线搜索过程确定的标量，$\mathcal{H}(\boldsymbol{x}_k)$和 $\mathcal{J}(\boldsymbol{x}_k)$分别是与 TMOP 目标函数相关的海森矩阵（$\partial^2 F(\boldsymbol{x}_k)/\partial \boldsymbol{x}_j \partial \boldsymbol{x}_i$）和梯度（$\partial F(\boldsymbol{x}_k)/\partial \boldsymbol{x}_i$）。线搜索过程要求选择 γ，使得

$$F(\boldsymbol{x}_{k+1}) < 1.2F(\boldsymbol{x}_k), \tag{2.7a}$$

$$|\mathcal{J}(\boldsymbol{x}_{k+1})| < 1.2|\mathcal{J}(\boldsymbol{x}_k)|, \tag{2.7b}$$

$$\det\left(A\left(\boldsymbol{x}_{k+1}(\bar{\boldsymbol{x}}_e)\right)\right) > 0 \quad \forall \bar{\boldsymbol{x}}_e \in \mathcal{Q},\ \forall \Omega^e \in \mathcal{M}. \tag{2.7c}$$

松弛的线搜索条件 (2.7a)–(2.7b) 经经验调试，以允许求解器逃离浅层局部极小值；这类极小值在网格优化问题的目标函数景观中很常见。(2.7c) 中的最后一个约束确保在每次迭代时，所有单元中所选求积点集合 $\mathcal{Q}$ 处的网格都保持有效。我们发现，对于所关注的应用 [2, 3, 31]，这些线搜索条件足以保证网格优化器的稳健性。文献 [34] 介绍了针对同一类问题的求解器、预条件器和线搜索过程方面的全面进展。

最后，仅允许边界节点在与笛卡尔坐标轴对齐的平面上沿切向移动。随后进行牛顿迭代（2.6），直至线搜索判据无法满足，或目标函数关于当前和原始网格节点位置的梯度的相对 l_2 范数低于某个容差 ε，即$|\mathcal{J}(\boldsymbol{x})|/|\mathcal{J}(\boldsymbol{x}_0)| \leq \varepsilon$。对于本文给出的结果，我们设定 $\varepsilon = 10^{-10}$。

图1展示了采用此方法优化后的叶片网格。目标矩阵设为单位矩阵（$W = I$），并采用形状度量（$\mu_{2,\ s}$）。与原始网格相比，优化后的网格中各单元的长宽比更接近 1，偏斜度更接近 $\pi/2$ 弧度，符合目标 W 的规定。

网格解缠 当前的 r自适应方法可确保初始有效网格在整个优化过程中始终在求积点处保持有效。当初始网格无效时，在 (2.5) 中使用移位障碍度量 [23]

$$\mu(T) = \frac{\tilde{\mu}(T)}{2\big(\tau - \tau_b\big)}, \tag{2.8}$$

$$\tau_b = \begin{cases} \beta \cdot \tau_{\mathtt{qp,min}} - \epsilon & \text{if } \tau_{\mathtt{qp,min}} \leq 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.9}$$

其中，$\tilde{\mu}(T)$ 是一种非屏障 度量（例如 $\tilde{\mu}_4(T) = ||T||_F^2 - 2\tau$），$\tau$是 T的行列式，τ_b是屏障。移位障碍度量的思路是将屏障设在网格范围内最小行列式（$\tau_{\mathtt{min}}$）的下方，使得当 $\tau \to \tau_b$时，$\mu(T) \to \infty$。因此，最小化 $\mu(T)$ 会使网格移动远离屏障，从而增大 $\tau_{\mathtt{min}}$，最终实现网格解缠。

由于 τ_b 通常基于 $\tau_{\mathtt{qp,\ min}}$，即在所有求积点上采样得到的最小雅可比行列式（$\det(T(\boldsymbol{x}_k))$），因此使用缩放因子 β（通常设为 1.5）和偏移量 ϵ（通常为 10^{-2}），以确保 τ_b 低于 $\tau_{\mathtt{min}}$。请注意，网格解开缠绕后，屏障值保持为 0。条件 $\tau_{\mathtt{qp,\ min}} > 0$ 等价于 $\alpha_{\mathtt{qp,\ min}} > 0$，因为目标矩阵的尺寸分量（$\omega \equiv \det(W)$）在整个区域内均为正。

3 方法论

3.1 利用雅可比行列式的可证明界保证网格有效性 [22] 和 [21]介绍了一种通用技术，可用于界定采用节点基或模态基的高阶有限元函数。其核心思想是，为给定基函数集合中的每个基函数构造分段线性界，并利用这些界来界定以这些基函数加权和形式表示的任意多项式函数（例如，(2.2)）。

每个基函数的分段线性界（ϕ_i、$i = 1 \ldots N$）通过求解一个约束优化问题来确定，该问题旨在最小化基函数与利用参考单元中的一组控制节点 $\eta_j \in \Omega\ j = 1 \ldots M$ 定义的界定函数之间差值的 L_2 范数。在上界的情形下，用 q_+^{ij} 表示第 i个基函数在 η_j处的界定值，并用$U^i_{\boldsymbol{\eta}表示\mathbf{q}^+}$表示控制节点处界定值元组构成的向量，则该优化问题可表述为：

$$\mathbf{q}^{+^*} = \arg\min_{\mathbf{q}^+} f(\mathbf{q}^+) \quad s.t. \quad g(\mathbf{q}^+, \bar{\boldsymbol{x}}) \geq 0, \tag{3.10}$$

其中

$$f(\mathbf{q}^+) = \left\| U^i_{\boldsymbol{\eta},\mathbf{q}^+}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \phi_i(\bar{\boldsymbol{x}}) \right\|_{2,\Omega}, \tag{3.11a}$$

$$g(\mathbf{q}^+, \bar{\boldsymbol{x}}) = U^i_{\boldsymbol{\eta},\mathbf{q}^+}(\bar{\boldsymbol{x}}) - \phi_i(\bar{\boldsymbol{x}}). \tag{3.11b}$$

通过求解一个类似的优化问题，得到下界值，q_-^{ij} 对于$L^i_{\boldsymbol{\eta},\mathbf{q}^-}$。

然后可以直接计算线性界函数

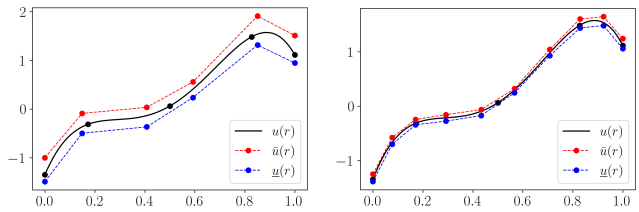


图3：使用 [22, 21]中的方法对四阶函数进行界定，左图使用6个控制点，右图使用10个控制点。

对于任意的 $u(\bar{\boldsymbol{x}})$，其线性界函数为

$$\underline{u}(\eta_j) = \sum_{i=1}^{N} \min(u_i q_{ij}^{-}, u_i q_{ij}^{+}), \tag{3.12a}$$

$$\overline{u}(\eta_j) = \sum_{i=1}^{N} \max(u_i q_{ij}^{-}, u_i q_{ij}^{+}), \tag{3.12b}$$

使得 $u \le \underline{u} \le u_{\circ}$ 在每个单元 Ω 上，函数 $u(\bar{\boldsymbol{x}})$ 的下界和上界分别是 u和 u 在所有控制节点处的逐点最小值和逐点最大值。通过优化控制点位置 η_j，并在界定原函数之前将其线性拟合部分去除，可以进一步提高此方法的有效性。详细说明请参阅[22, 21] 。

图3展示了使用该方法对四阶函数 $u(\bar{\boldsymbol{x}})$进行界定的示例，其节点系数为 $u = [-1.346, -0.311, 0.063, 1.485, 1.114]$，并采用Gauss-Lobatto-Legendre节点基。图3左图和右图展示了所提方法在使用不同数量控制点时的效果；正如预期，控制点越多，界定越紧。

通过雅可比行列式界保证网格有效性当网格的节点位置函数的多项式次数为 p 时，其雅可比矩阵的行列式对于张量积单元是 $d \cdot p - 1$ 阶多项式，对于单纯形则是 $d(p-1)$ 阶多项式 [19]。因此，可以直接应用上述界定过程，计算网格中雅可比行列式的下界 $\alpha_{\circ}$ 随后，只有当 $\alpha(\boldsymbol{x}_{k+1}) > 0$ 时才接受牛顿更新 (2.6)，从而保证初始有效网格在 r-自适应过程中始终有效。通过使用足够多的控制点或采用递归细分策略，可以确保界的紧致性。

图4展示了图1中叶片示例里的一个四阶倒置单元，以及其在参考单元上的七阶雅可比行列式。采用 [22, 21] 中的方法，获取控制

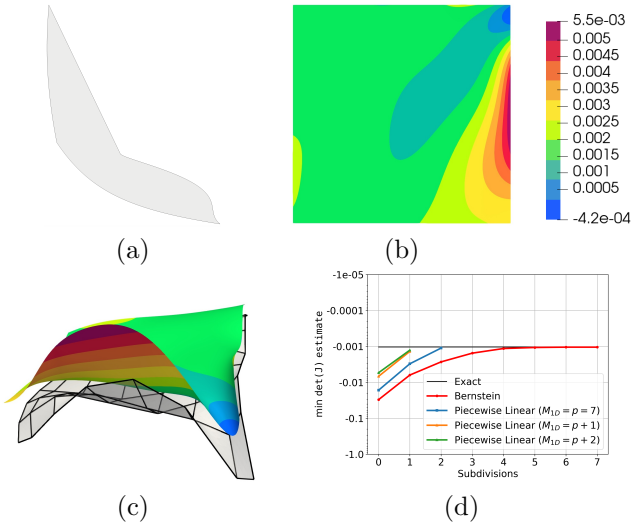


图4：(a) 图1中叶片示例的倒置单元。(b) 参考构型中的雅可比行列式。(c) 使用 8×8 个控制点得到的雅可比行列式的下分段线性界。(d) 比较使用不同数量控制点得到的下界、Bernstein多项式以及精确最小值。

网上 8×8 个点处雅可比行列式的下界，如图4(c)所示。最后，图4(d)展示了随着控制点数量增加，使用伯恩斯坦多项式和分段线性界时，下界如何逐渐收敛至精确最小值。对于分段线性界，我们递归地限定单元中上界和下界符号相反的部分，直至某个控制点处的上界变为负值；这一条件足以保证该单元为倒置单元。使用伯恩斯坦基时，我们无法在每个点处获得下界和上界，因此会对单元进行 h细化，直至基函数系数的最大值与最小值之差低于某个阈值。如图4(d)所示，分段线性界比基于伯恩斯坦基的界收敛至精确最小值快得多，因此所提出的方法在提升网格质量和保证网格有效性方面效率更高。

网格解缠 当初始网格无效时，我们也在移位障碍度量中使用 α：

$$\mu(T) = \frac{\tilde{\mu}(T)}{2(\tau - \tau_b)}, \tag{3.13}$$

$$\tau_b = \begin{cases} \underline{\tau} \equiv \underline{\alpha}\,\omega^{-1} - \epsilon & \text{if } \underline{\alpha} \le 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.14}$$

其中， ω 指目标矩阵W的行列式；对于本文所研究的问题，该值在整个区域内为常数。这里使用 ϵ 偏移量，是因为 [22]的界定方法可以在精确最小值位于单元顶点时将其捕获。与式（2.8）不同，屏障 τ_b （3.13）保证小于 $\tau_{\texttt{min}}$。从原理上说，这种方法与 [35]类似：通过伯恩斯坦基得到的雅可比行列式界限，被用来为 r自适应中的泛函设置屏障。

计算成本假设节点位置函数采用 N_p 基定义，则在 M_q 个求积点处计算雅可比行列式的计算成本为 $\mathcal{O}(N_p \cdot M_q)$。在以往的工作中，我们通常使用 $M_q = 2N_p$ 。类似地，使用 N_α 个节点和拉格朗日插值多项式将雅可比行列式表示为高阶函数，成本为 $\mathcal{O}(N_p \cdot N_\alpha)$。随后，可以使用这些节点函数值，通过基变换矩阵计算伯恩斯坦系数，成本为 $\mathcal{O}(N_\alpha^2)$。也可以用这些值在 M 个控制点上计算分段线性界定函数，成本为 $\mathcal{O}(N_\alpha \cdot M)$，其中 $M \approx N_\alpha$。因此，使用分段线性界定函数的成本高于非严格的离散采样策略，但与保守的基于伯恩斯坦系数的方法相当。需要注意的是，基于伯恩斯坦系数的方法不仅通常给出的界更宽松，而且还会受到基变换矩阵条件性较差的影响，尤其是在处理高阶多项式时。

3.2 曲面上的切向松弛我们使用高阶网格本身作为几何代理，无需依赖外部 CAD 模型即可实现切向松弛。我们的方法允许所有节点（包括曲边界上的节点）根据网格优化目标自由移动，然后通过最近点投影将边界节点恢复到初始网格曲面上。所得位移通过拉普拉斯求解平滑地传播到内部。

由于初始网格充当几何替代，因此最终边界表示的精度受输入网格保真度的限制。这是实现无 CAD 能力所需的权衡，我们假设初始网格能够以足够的精度捕捉区域几何形状。

最近点投影 最近点投影通过利用 [22] 的框架来实现。该框架专为在曲网格上针对任意给定的物理空间点 $\boldsymbol{x}^*$ 快速、稳健地计算高阶函数而设计。这需要计算重叠单元 (Ω^{e^*}) 及其对应的参考坐标 $(\bar{\boldsymbol{x}}^*)$，以确定 $\boldsymbol{x}^*$，从而能够在该位置对所需的有限元函数求值（例如，使用 (2.2)）。 [22] 中的框架首先结合局部和全局映射，高效地识别可能与 $\boldsymbol{x}^*$ 重叠的候选单元及其对应的 MPI进程。接着，利用逐单元包围盒进一步缩小候选单元列表。最后，在这些单元中分别求解一个非线性最小化问题，以确定包含该点的单元并计算对应的参考空间坐标:

$$\bar{\boldsymbol{x}}^* = \arg\min_{\bar{\boldsymbol{x}} \in \bar{\Omega}^e} \left\| \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}(\bar{\boldsymbol{x}}) \right\|^2, \tag{3.15}$$

位移混合在 r-自适应过程中，我们最小化 TMOP 目标函数 (2.5)，同时允许曲边界（$\partial\Omega_T$）上的边界节点根据求解器更新 (2.6) 自由移动，从而得到暂定的节点位置 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{k+1}$。然后，对于每个边界节点，我们利用从初始网格提取的表面网格求解 (3.15)，这自然会得到最近点投影。更新后的位置 $\breve{\boldsymbol{x}}_{k+1}$ 包含 $\partial\Omega_T$ 上节点的投影位置，以及内部节点未改变的位置。边界节点无法独立移动到曲面上，因此我们对位移进行混合，

$$\Delta\breve{\boldsymbol{x}}_{k+1} = \breve{\boldsymbol{x}}_{k+1} - \tilde{\boldsymbol{x}}_{k+1}, \tag{3.16}$$

通过求解拉普拉斯问题，将其移入区域内部:

$$\begin{aligned} -\nabla^2(\Delta\boldsymbol{x}_{k+1}) &= \boldsymbol{0} && \text{in } \Omega, \\ \Delta\boldsymbol{x}_{k+1} &= \Delta\breve{\boldsymbol{x}}_{k+1} && \text{on } \partial\Omega_T, \\ \Delta\boldsymbol{x}_{k+1} &= \boldsymbol{0} && \text{on } \partial\Omega \setminus \partial\Omega_T, \end{aligned} \tag{3.17}$$

其中 $\partial\Omega \setminus \partial\Omega_T$ 表示节点位置固定的边界。最后，将混合后的位移加回牛顿更新生成的位置，得到更新后的位置:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \tilde{\boldsymbol{x}}_{k+1} + \Delta\boldsymbol{x}_{k+1}. \tag{3.18}$$

该最近点投影算法被纳入我们优化框架的线搜索步骤中。 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{k+1}$ 是式（2.6）中的牛顿更新，仅当其形成有效网格时才用于最近点投影，即 $\alpha(\tilde{\boldsymbol{x}}_{k+1}) > 0$。完成最近点投影和位移混合后，只有当更新后的位置 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ 形成有效网格（$\alpha(\boldsymbol{x}_{k+1}) > 0$），并满足能量（2.7a）和梯度范数（2.7b）约束时，才会被接受。

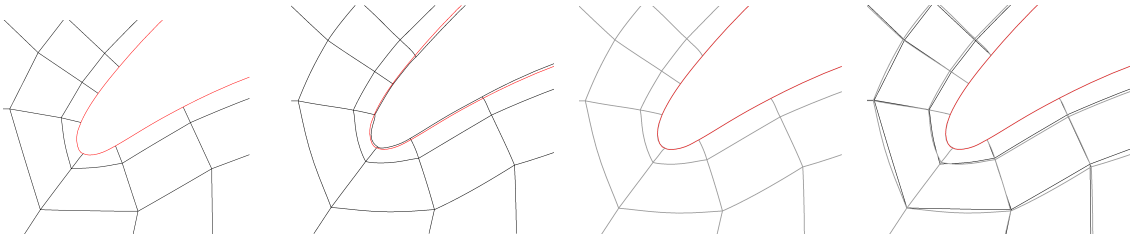


图5：一次 r 自适应迭代后，切向松弛对叶片前缘附近区域的影响。切向松弛所针对的叶片表面以红色显示。(a) 初始网格。(b) 求解器更新导致边界节点移动后的优化网格。(c) 将边界节点投影回原始网格曲面，并将相应位移平滑过渡至内部区域。(d) 最终网格（灰色）与输入网格（黑色）叠加显示，以供比较。

我们观察到，采用牛顿法时，在边界节点不受约束的情况下，网格可能发生相当剧烈的移动。这在凹面附近尤其容易造成问题。使用基于梯度的求解器，例如 Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno（BFGS）方法，有助于缓解这一问题，并在保留原始边界几何完整性的同时，实现稳健且准确的切向松弛。

从实现角度来看，首先对输入网格进行预处理，将每个标记为进行切向松弛的边界节点与一个几何实体关联起来：角点、边（二维和三维）或曲面（三维）。同时提取相应的边网格或曲面网格。这一步预处理对于保持几何精度至关重要。我们通过检查相邻边和面上的属性 来建立节点与几何实体之间的关联。属性 是唯一标识符，通常用于网格划分和有限元工作流程中定义边界条件。在二维中，具有单个属性的节点与相应的边相关联，允许其沿切向移动。具有两个不同属性的节点则被判定为位于几何角点，并在 r 自适应过程中保持固定。此方法假定相邻网格边界被标记为不同属性。类似地，在三维中，具有一个、两个或三个不同属性的节点分别被归类为位于曲面、边或角点上。

图5展示了叶片前缘附近的这种切向松弛。初始网格如图5(a)所示。经过1次 r-自适应迭代后，网格节点（包括边界节点）偏离了初始网格曲面，如图5(b)所示。随后，使用(3.15)将边界节点投影回原始网格曲面，并将位移混合到内部区域，如图5(c)所示。图5(d)中同时展示了最终网格和输入网格，以便比较。

计算成本 所提出的切向松弛在每次线搜索回溯试探期间，都会先进行最近点投影，再进行位移混合。最近点投影对每个边界节点独立执行，其计算量随边界节点数线性增长；由于场评估框架[22]高效，与全局网格优化更新相比，这部分计算成本可以忽略不计。然而，位移混合需要进行全局拉普拉斯求解（采用预条件代数多重网格的共轭梯度法），其计算量随网格节点数线性增长。初步实验表明，切向松弛中的位移混合步骤可能会显著增加计算成本，因为它可能使 r-自适应所需时间翻倍。不过，若网格质量改进受到固定边界节点的严重限制，或者在实际模拟之前仅将 r-自适应作为预处理步骤执行一次，那么这种成本与收益之间的权衡就是合理的，因为其成本很容易摊销。第4.3节展示了一个二维示例，其中切向松弛显著改善了曲边界附近的单元质量。

4 结果

4.1 涡轮叶片我们重新考察图1中的涡轮叶片示例所用的四阶网格。目标矩阵仍为单位矩阵，并采用形状度量。使用基于 GLL 求积点的十阶精度积分方案来近似计算 TMOP目标函数(2.5)。图 6(a)展示了图1中的优化网格，其中叶片表面的网格节点保持固定，且仅在求积点处检查雅可比行列式。图6(b)

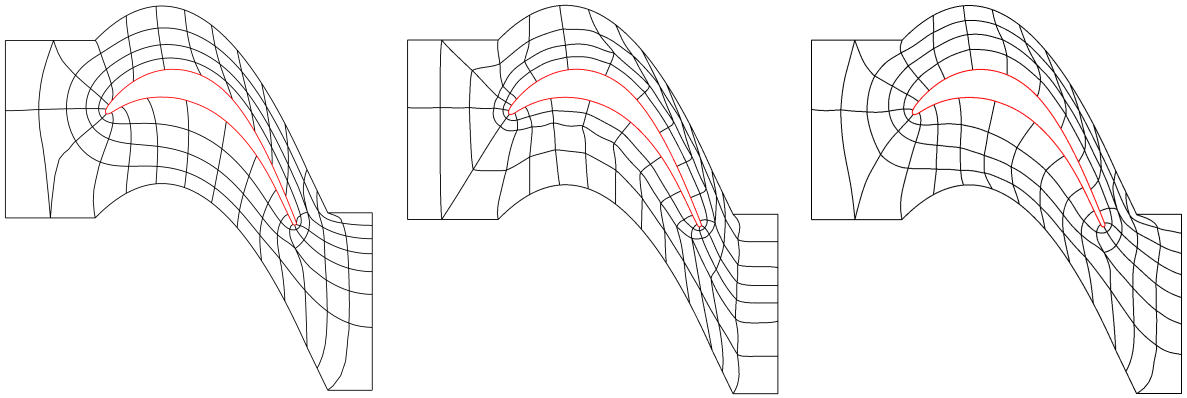


图 6：涡轮叶片周围流场优化网格的比较。(a) 未采用切向松弛和网格有效性检查。(b) 采用切向松弛并通过限制雅可比行列式保证有效性的网格优化，会因某个单元在求积点之间发生翻转而过早停止。(c) 将r-自适应与 q-细化相结合，可显著提升网格质量。

展示了采用本文提出的更新方法得到的优化网格。可以看到，经过切向松弛后，叶片上表面的网格单元不再歪斜。然而，由于问题单元中的雅可比行列式趋近于 0，网格优化过程过早停止。初始网格的 TMOP 目标函数为 170.8，图 6(a)中的网格将其降至 64.9。不过，该网格并非处处连续有效，且 $\alpha(\boldsymbol{x}) = -0.001$。图 6(b)中的网格的 TMOP 目标函数为 98.8，但处处有效，且 $\alpha(\boldsymbol{x}) = 10^{-10}$。两种情况下，采样得到的最小雅可比行列式均为 10^{-4}。

统一提高积分阶数有助于解决这一问题，但会使 r-自适应的计算成本变得难以承受。因此，我们采用 q-细化，并将采样所得雅可比行列式的最小值与其下界之比用作误差估计量；仅对该比值超过用户定义阈值的单元提高求积阶数，即，

$$\alpha_{\mathtt{qp,min}}(\boldsymbol{x})/\underline{\alpha}(\boldsymbol{x}) > \epsilon_q. \tag{4.19}$$

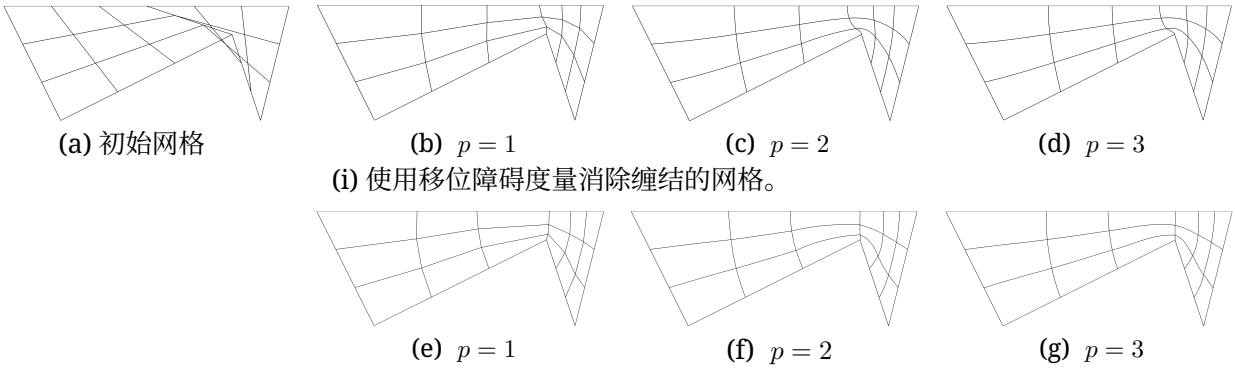
阈值 ϵ_q 默认设为 5.0。此 q-细化在每次 r-自适应迭代后执行，求积阶数增加一个初始求积阶数。图 6(c)展示了采用 q-细化得到的优化网格。网格处处仍然有效（$\alpha(\boldsymbol{x}) = 10^{-10}$），且最终网格明显更优，TMOP 目标函数降至 74.2。

图 6(c) 中的示例使用初始积分阶数 10，并允许最大求积阶数为 400。不同的最大求积阶数和细化阈值会导致不同的局部极小值，但与不进行q细化相比，始终能生成更好的网格。未来，我们将探索基于局部雅可比行列式界自适应插入新求积点的方案，而不是使用标准求积规则（例如 GLL）。我们还将探索对 q细化参数不那么敏感的基于梯度的求解器。

4.2 网格解缠我们重新考察图 7(a) 中所示的 [23]，网格解缠示例。网格发生了自我折叠，导致凹顶点处的单元发生翻转。这给基于优化的平滑带来了挑战，尤其是在高阶情况下。

我们采用移位屏障方法优化网格，在式 (3.13) 中使用 $\tilde{\mu}_4(T) = ||T||_F^2 - 2\tau$，目标长宽比为 1，偏斜度为 $\pi/2$。我们将 $\epsilon = 10^{-3}$ 用作障碍偏移量。由于第 3.2节提出的切向松弛需要进行偏微分方程求解，因此要求网格有效；除非曲面与笛卡尔坐标轴对齐，否则在网格解缠期间会禁用该方法。

图7(i)展示了优化后的线性、二次和三次网格。在每种情况下，网格都成功解缠结。初始网格的雅可比矩阵行列式下界为 -0.22，并在 r-自适应过程中达到正值，如图8所示。请注意，高阶单元中的额外自由度使网格能够绕过凹角。该角点处的单元偏斜度较差，



(a) 初始网格 (b) $p = 1$ (c) $p = 2$ (d) $p = 3$

(i) 使用移位障碍度量消除缠结的网格。

(e) $p = 1$ (f) $p = 2$ (g) $p = 3$

(ii) 为改善偏斜度而优化的解缠结网格。

图 7: （i）使用移位障碍度量进行网格解缠，并将雅可比行列式的下界作为屏障。（a）含有倒置单元的初始网格。多项式阶数分别为（b） $p = 1$、（c） $p = 2$和（d） $p = 3$时的优化网格。在每种情况下，优化网格的雅可比行列式下界均为正。（ii）通过形状度量与偏斜度量的凸组合，进一步改善解缠结网格的偏斜度。（e） $p = 1$、（f） $p = 2$和（g） $p = 3$。

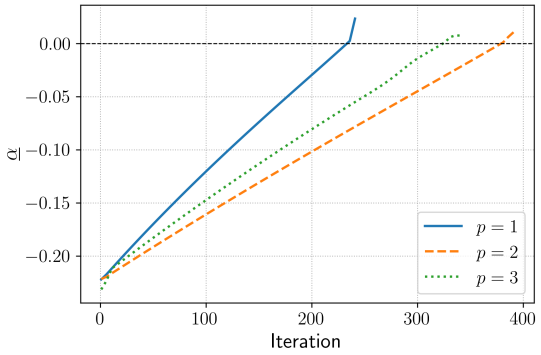


图8：不同多项式阶数下， r-自适应过程中雅可比行列式下界的演变。

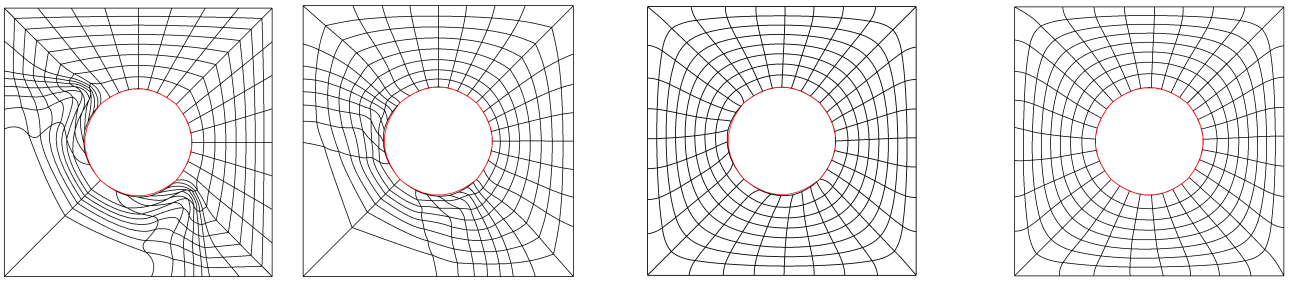
但长宽比趋近于 1。由于我们无法在$\mu_{4\text{中}s}$显式控制长宽比与偏斜度之间的平衡，因此我们进一步通过形状度量与纯偏斜度量的凸组合来改善解缠结网格：$\nu_{49,}$ $_{sq} = \gamma\mu_{2,\ s} + (1-\gamma)\nu_{50,\ q\circ}$ 这里，$\nu_{50,\ q}(A,\ W) = [1 - \cos(\phi_A - \phi_W)]/(\sin\ \phi_A \cdot \sin\ \phi_W)$ 是一种偏斜度量，取决于变换的当前雅可比矩阵和目标雅可比矩阵的局部偏斜角 ϕ 。使用 μ_{50} 和 $\gamma = 0.4$得到的优化网格如图 7(ii) 所示；显然，与图 7(i) 中解缠结网格的单元相比，这些网格的偏斜度要好得多。

4.3 ALE 模拟的网格松弛任意拉格朗日-欧拉（ALE）方法广泛应用于多材料流体动力学，结合拉格朗日框架和欧拉框架的优势。在拉格朗日阶段，计算网格随材料移动，能够高保真地捕捉界面并守恒质量。然而，冲击驱动流等情况下产生的剧烈变形会严重降低网格质量，因此需要定期重新划分网格，以维持数值精度和稳定性。

典型的 ALE 循环由三个阶段组成：(i) 在移动的高阶网格上进行拉格朗日求解；(ii) 通过网格优化或重新分区来改善网格质量，同时保留几何特征和材料特征；(iii) 将物理量重映射到新的网格构型。网格优化步骤对于确保后续的重映射和流体动力学求解保持适定性至关重要，尤其是在存在大变形或不断演化的材料边界时。在此背景下，高阶网格优化在实现准确、稳健且高效的 ALE 模拟中发挥着核心作用。

在本节中，我们将展示所提出的方法在二维和三维 ALE 模拟中改善网格质量的有效性。在每个示例中，我们首先从一个经拉格朗日求解变形的高阶网格开始，然后应用我们的r自适应框架来优化网格质量，同时保持区域边界的几何完整性。

二维示例见图 9。初始二次网格通过一次拉格朗日



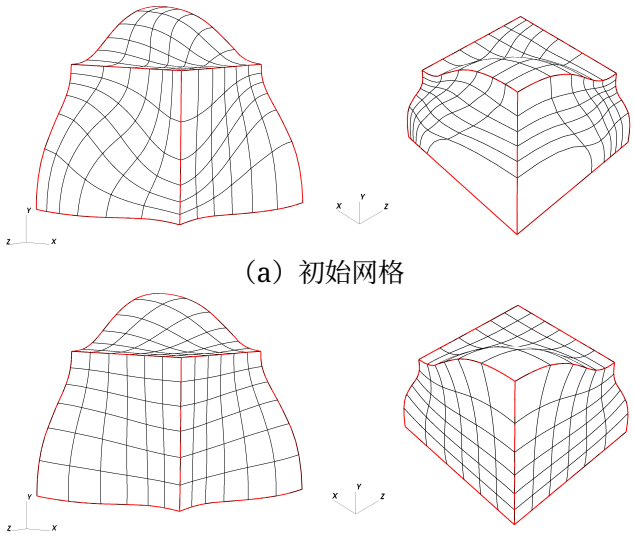
(a) 初始网格　(b) 解缠结网格　(c) 优化网格（不进行切向松弛）　(d) 优化网格（进行切向松弛）

图 9：在二维 ALE 仿真中，先使用移位障碍度量进行网格解缠，再进行 r-自适应处理，分别展示未采用和采用切向松弛的情况。

模拟生成，该模拟描述了从区域左下角发出的激波。波与圆形障碍物碰撞后绕其传播；详情请参见 [1, 36]。变形网格见图 9(a)。该网格在拉格朗日阶段使用的求积点处有效，但在求积点之间存在负的雅可比行列式，其下界为 $\alpha(\boldsymbol{x}) = -2 \times 10^{-4}$。因此，首先使用移位障碍度量（$\tilde{\mu}_4(T)$）对网格进行解缠。该解缠结网格的 $\alpha(\boldsymbol{x}) = 4 \times 10^{-4}$ 见图 9(b)。网格解缠期间，曲边界上的边界节点保持固定。

最后，使用理想形状目标 和形状度量 $\mu_2(T)$ 对网格进行优化。图 9(c) 和 (d) 分别展示了未采用和采用切向松弛时的优化网格。两个网格的整体 TMOP 目标函数 $\int \mu_2(T)$ 相近：它从解缠结网格中的 0.89 降至优化网格中的 0.210 和 0.208。考察曲边界处的单元时，切向松弛功能的效果显而易见。在边界节点固定的情况下，无法恢复目标圆形边界，$\alpha(\boldsymbol{x}) = 8 \times 10^{-4}$，且偏斜角在 $\theta = 44°$ 到 $\theta = 136°$之间变化。采用切向松弛后，边界节点贴合目标圆形边界，$\alpha(\boldsymbol{x}) = 2 \times 10^{-3}$，单元边也更加接近与边界正交，偏斜角在$\theta = 82°$ 和 $\theta = 97°$之间变化。因此，切向松弛功能显著改善了曲边界处的网格质量。

图10展示了一个采用二次六面体的类似三维示例。初始网格通过对在均匀笛卡尔网格上初始化的激波进行拉格朗日模拟生成。激波起源于角点，并使区域发生变形，同时



（a）初始网格

（b）优化网格

图10：　r-自适应性与保几何切向松弛的三维网格。

边界可以自由移动。变形网格如图10(a)所示。其雅可比行列式的下界为 6×10^{-4}，TMOP泛函$\int \mu_{301}(T)$为225.4。这里，$\mu_{301}(T) = \frac{||T||_F ||T^{-1}||_F}{3} - 1$是一个形状度量。在切向松弛过程中，通过识别位于几何边和曲面上的网格节点来保持区域边界的几何完整性，具体方法见第3.2节。这些几何边以红色突出显示。图10(b)展示了优化后的网格，其雅可比行列式下界增至 $\alpha(\boldsymbol{x}) = 2.2 \times 10^{-3}$，TMOP泛函则降至 3.34。这表明网格质量显著提升，如图10(b)所示，网格单元的分布更加均

匀，长宽比也有所改善。

5 总结与未来工作

我们扩展了目标矩阵优化范式，构建了一个稳健的高阶网格 r自适应框架，将切向松弛与可证明的网格有效性保证相结合，从而提升网格质量，同时确保区域内处处保持正性。我们通过具有挑战性的二维和三维示例验证了该方法的有效性，其中包括对几何保真度和稳健性要求极高的 ALE 型变形。

未来的工作将着重于将该方法扩展至实际应用中出现的更复杂、更贴近现实的三维网格。特别是，我们将探索把该方法集成到多材料 ALE 模拟中；在这类模拟中，精确的网格自适应对于捕捉不断演变的材料界面并在强变形下保持数值稳定性至关重要。

致谢

本手稿由 Lawrence Liver- more National Security, LLC 根据与美国能源部签订的合同编号 DE- AC52-07NA27344 编写。美国政府保留相关权利；出版商接受本文发表即确认，美国政府保留一项非独占、已付清、不可撤销、全球范围内的许可，可为美国政府之目的发表或复制本手稿的已发表版本，或允许他人这样做。LLNL-CONF-2011480。

参考文献

[1]V. Dobrev、T. Kolev 和 R. Rieben, 《用于拉格朗日流体动力学的高阶曲线有限元方法》, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 第 34 卷，第 5 期，第 606–641 页，2012 年。[2] V. A. Dobrev 、 P. Knupp 、 T. V. Kolev、K. Mittal 和 V. Z. Tomov, 《高阶网格的目标矩阵优化范式》, *SIAM Journal of Scientific Computing* 41, 1, 50 , 第 卷, 第 页 B –B68，2019 年。[3] V. A. Dobrev、P. Knupp、T. V. Kolev、K. Mittal、R. N. Rieben 和 V. Z. Tomov, 《ALE 流体动力学中由模拟驱动的高阶网格优化》, *Computers & Fluids*, 2020 年。[4] K. Mittal 和 P. Fischer, 《谱元法的网格平滑》, *Journal of Scientific Computing* 78, 2, 1152 1173, 2019 , 第 卷, 第 页 – 。[5] F. Alauzet 和 A. Loseille, 《计算流体力学各向异性网格自适应的十年进展》, *Computer-Aided Design*, 第 72 卷，第 13–39 页，2016 年。[6] G. Aparicio-Estrems、A. Gargallo-Peir´o 和 X. Roca, 《结合高阶度量插值与几何隐式化的曲线 r 自适应》, *Computer-Aided Design* 157, 103478, 2023 , 第 卷, 第 页。[7] P.-J. Frey 和 F. Alauzet, 《计算流体力学计算的各向异性网格自适应》, *Computer methods in applied mechanics and engineering* 194, 48 49, , 第 卷, 第 期，第 5068–5082 页，2005 年。[8] K. J. Fidkowski 和 D. L. Darmofal, 《计算流体力学中基于输出的误差估计与网格自适应综述》, *AIAA journal*, 第 49 卷，第 4 期，第 673–694 页，2011 年。[9] A. Loseille、A. Dervieux 和 F. Alauzet, 《三维稳态欧拉方程的完全各向异性目标导向网格自适应》, *Journal of computational physics* 229, 8, 2866 2897, 2010 , 第 卷, 第 页 – 。[10] J. Marcon、M. Turner、D. Moxey、S. J. Sherwin 和 J. Peir´o, 《高阶 r 自适应的变分方法》, *arXiv preprint arXiv:1901.00990*, 2019 年。[11] N. Odier、A. Thacker、M. Harnieh、G. Staffelbach、L. Gicquel、F. Duchaine、N. G. Rosa 和 J.-D. M¨uller, 《复杂壁面建模涡轮机械大涡模拟的网格自适应策略》, *Computers & Fluids*, 第 214 卷，文章编号 104766，2021 年。[12] M. Yano 和 D. L. Darmofal, 《各向异性单纯形网格自适应的基于优化的框架》, *Journal of Computational Physics*, 第 231 卷，第 22 期，第 7626–7649 页，2012 年。[13] R. Zhang、A. Johnen 和 J.-F. Remacle, 《曲线网格自适应》, 载于 *International meshing roundtable* 57 69, 2018 , 第 – 页，施普林格，。[14] V. Dobrev、P. Knupp、T. Kolev、K. Mittal 和 V. Tomov, 《高阶网格的目标矩阵优化范式》, *SIAM Journal on Scientific Computing* 41, 1, 50 68, 2019 , 第 卷, 第 页 B –B。

[15] D. P. Sanjaya、K. Fidkowski 和 S. M. Murman, “高阶度量感知网格优化算法比较”, 载于 *AIAA SciTech 2020 Forum* , 第 1141 页，2020 年。[16] G. Aparicio-Estrems、A. Gargallo-Peir´o 和 X. Roca, “定义度量感知的尺寸-形状度量，以验证和优化曲线高阶网格”, *Computer-Aided Design* 168, 103667, 2024 , 第 p. 卷。[17] A. Coppeans、K. Fidkowski 和 J. R. Martins, “二维高阶网格的各向异性网格自适应”, 载于 *AIAA SCITECH 2024 Forum*, 第 1020 页，2024 年。[18] X. Luo、M. S. Shephard、J.-F. Remacle、R. M. O’Bara、M. W. Beall、B. A. Szab´o 和 R. Actis, “p 版本网格生成问题”, *IMR*, 第 343 卷，第 354 页，2002 年。[19] A. Johnen、J.-F. Remacle 和 C. Geuzaine, “曲线有限元的几何有效性”, *Journal of Computational Physics* 233, 359 372, 2013 , 第 pp. 卷, –。[20] L. Rochery、M. Chiriac、M. C. Galbraith、D. L. Darmofal 和 S. R. Allmaras, “Metris：一种开源高阶度量网格重划分工具”, 载于 *AIAA SCITECH 2025 Forum* 0779, 2025 , 第 p. 页。[21] T. Dzanic、T. Kolev 和 K. Mittal, “一种界定高阶有限元函数的方法：在网格有效性和保界限制器中的应用”, *Journal of Computational Physics* 545, 114444, , 第 p. 卷。2026 [22] K. Mittal、A. Parik、S. Dutta、P. Fischer、T. Kolev 和 J. Lottes, “图形处理器上高阶网格的通用场求值”, *Computers & Fluids* 106606, , 第 p. 页。2025 [23] P. Knupp, “目标矩阵优化范式中的最坏情况网格质量”, *Engineering with Computers* 38, 6, 5695 5711, 2022 , 第 no. 卷, pp. –。[24] K. S. Kirilov、J. Peir´o、J. Zhou、M. D. Green 和 D. Moxey, “基于第三方网格生成高阶曲线网格”, 载于 *Proceedings of the 2024 International Meshing Roundtable (IMR)* 93 105, , 第 pp. –, 工业与应用数学学会，2024 年。[25] E. Ruiz-Giron´es、X. Roca 和 J. Sarrate, “通过畸变最小化进行高阶网格曲化，并允许边界节点在三维计算机辅助设计表示上滑动”, *Computer-Aided Design*, 第 72 卷，第 52–64 页，2016 年。[26] K. Shivanna、N. Grosland 和 V. Magnotta, “一种基于底层三角剖分表面定义的四边形表面网格改进解析框架”, 载于 *Proceedings of the 19th International Meshing Roundtable* 85 102, 2010 , 第 pp. –, 施普林格。[27] R. V. Garimella、M. J. Shashkov 和 P. M. Knupp, “通过局部参数化优化三角形和四边形表面网格质量”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 第 193 卷，第 9-11 期，第 913–928 页，2004 年。[28] P. Knupp、T. Kolev、K. Mittal 和 V. Z. Tomov, “用于高阶网格优化的自适应曲面拟合与切向松弛”, *arXiv preprint arXiv:2105.12165* 2021 。[29] J.-L. Barrera、T. Kolev、K. Mittal 和 V. Tomov,

“用于边界和界面拟合隐式几何的高阶网格变形”，*Computer-Aided Design* 158，103499，2023，第 p. 卷。[30] P. Knupp，“目标矩阵网格优化范式中的几何参数”，*Partial Differential Equations in Applied Mathematics* 100390，2022，第 p. 页。[31] V. A. Dobrev、P. Knupp、T. V. Kolev、K. Mittal 和 V. Z. Tomov，“采用目标矩阵优化范式的非一致高阶网格 *hr* 自适应”，*Engineering with Computers*，2021 年。[32] P. Knupp，“网格质量改进中的目标构造与构建”，技术报告 LLNL-TR-795097，劳伦斯利弗莫尔国家实验室（LLNL），利弗莫尔，加利福尼亚州，2019 年。[33] P. Knupp，“目标矩阵网格优化范式中的度量类型”，技术报告 LLNL-TR-817490，劳伦斯利弗莫尔国家实验室（LLNL），利弗莫尔，加利福尼亚州（美国），2020 年。[34] E. Ruiz-Giron´es 和 X. Roca，“基于虚拟几何的并行预条件网格弯曲的自动惩罚与次数延拓”，*Comput.-Aided Des.*，第 146 卷，第 103208 页，2022 年。[35] T. Toulorge、C. Geuzaine、J.-F. Remacle 和 J. Lam-brechts，“曲线网格的稳健解缠”，*Journal of Computational Physics* 254，8 26，，第 2013 pp. 卷，–。[36] N. M. Atallah、V. Z. Tomov 和 G. Scovazzi，“拉格朗日冲击流体动力学的弱边界条件：曲边界上的高阶有限元实现”，*J. Comput. Phys.*，第 507 卷，第 112959 页，2024 年。