

基于 FEALPy 的拓扑优化中的自动微分框架

何亮

学号:202331510117

湘潭大学 • 数学与计算科学学院

June 18, 2024

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

研究背景

- 拓扑优化(TO)是一种通过优化材料分布以获得最佳结构性能的技术,在工程设计中具有重要应用价值。
- 自动微分(AD)技术可以高效、准确地计算数值函数的导数,有潜力在拓扑优化中用于灵敏度分析。

研究动机

- 尽管 **AD** 技术在机器学习和科学计算中广泛应用,但在拓扑优化中的应用仍较少,尤其是将其与传统方法进行对比的研究更少。
- 现有的自动微分 **TO** 框架展示了 **AD** 在拓扑优化中的应用潜力,但其可重用性和扩展性存在局限,需要进一步改进。

研究目标

- 本研究旨在基于 **FEALPy** 框架,应用 **AD** 技术提高拓扑优化的灵敏度分析效率和准确性。
- 实现重用性更好的自动微分拓扑优化框架,并将其与传统变密度方法进行对比,验证 **AD** 对变密度方法的影响。

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

背景

TO 已有工作

- TO 在近年来得到了广泛关注, 主要由于制造能力和计算建模的进步。
- 基于连续体结构的 TO 方法目前分为两大类: 变密度方法及其变形(如 **SIMP** 方法、**ESO/BESO** 方法)、边界演化方法(如水平集方法、**MMC/MMV** 方法和相场方法)。
- 这些方法各有优缺点, 但在处理大规模问题时通常面临计算效率和灵敏度分析复杂的问题。

背景

AD 已有工作

- AD 是一种强大的技术,通过在计算过程中自动生成导数,避免了手动求导的繁琐和易错。
- AD 已经存在了几十年,被广泛应用于解决各种问题,从分子动力学模拟、流动设计问题到光子晶体的设计等,提高了计算效率和准确性。

背景

AuTO 已有工作

- AuTO(Automatic differentiation in Topology Optimization)框架结合了拓扑优化和自动微分技术,实现了高效的灵敏度分析。
- Aaditya Chandrasekhar 基于高性能 Python 库 JAX,自动计算了用户定义的 TO 问题的灵敏度。
- AuTO 框架展示了在复杂拓扑优化问题中自动微分的应用潜力,但在可重用性和扩展性方面存在局限。

动机

基于 **FEALPy** 的原因

- **模块化设计:**FEALPy 的模块化设计提供了灵活的数值计算环境,便于算法的开发和测试。
- **丰富的网格生成算法:**FEALPy 中实现了大量的网格生成和优化算法,能够处理复杂的几何结构。
- **Torch 模块与自动微分:**FEALPy 中的 Torch 模块借助 PyTorch 实现 AD,提高了灵敏度分析的效率 and 准确性。

动机

研究价值

- **多计算内核支持:**FEALPy 作为一个开源的软件包,可以使用不同的计算内核(如 JAX、PyTorch)来实现 AuTO。
- **结果对比验证:**FEALPy 基于 Numpy 也实现了很多传统 TO 方法,可以很方便地将两者的结果进行对比验证。
- **探索 AD 技术应用:**探讨 AD 技术在复杂非线性和多物理场问题中的应用,填补现有研究的空白。

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

研究目标

总体目标

本研究旨在 **FEALPy** 框架下,应用 **AD** 技术提高拓扑优化的灵敏度分析效率和准确性,并实现重用性更好的 **AuTO** 框架。

研究目标

具体目标

- 利用 **FEALPy** 的模块化设计
 - 通过模块化设计,实现更加灵活和高效的拓扑优化算法流程,便于拓扑优化算法的开发、测试和扩展。
- 利用 **FEALPy** 的 **Torch** 模块
 - 实现基于 **Torch** 的灵敏度分析模块,通过 **PyTorch** 实现高效的自动微分,简化求导过程,优化拓扑优化流程。
- 探讨 **AD** 技术在复杂非线性和多物理场问题中的应用
 - 扩展 **AD** 技术在复杂非线性问题中的应用,提高计算稳定性和精度。
 - 探索 **AD** 技术在多物理场耦合问题中的应用,解决多物理场问题中的灵敏度分析难题。

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

研究方法

基于变密度方法的柔顺度最小化问题数学模型

使用张量分析语言描述变密度方法的柔顺度最小化问题。

- 目标函数

$$\min_{\rho} : C = \int_{\Omega} (E(\rho)\varepsilon(u) : \varepsilon(u)) \, dx.$$

- 约束条件

$$\int_{\Omega} \rho(x) \, dx = V_{\max}; \quad 0 < \rho_{\min} \leq \rho \leq 1.$$

- 平衡方程

$$\int_{\Omega} (\sigma(u) : \varepsilon(v)) \, dx = \int_{\Omega} f \cdot v \, dx + \int_{\Gamma_N} F_n \cdot v \, ds, \quad \text{for all } v \in U.$$

研究方法

基于 **FEALPy** 中的 **Numpy** 模块实现传统变密度方法的算法流程

- 初始化设计变量 ρ 。
- 迭代过程：
 1. 计算当前设计变量下的刚度矩阵 $K(\rho)$ 。
 2. 求解平衡方程 $K(\rho)u = f$ 获得位移场 u 。
 3. 计算目标函数 $C(\rho, u)$ 。
 4. 进行灵敏度分析, 计算目标函数对设计变量的导数。 $\frac{\partial C}{\partial \rho}$ 。
 5. 更新设计变量 ρ 。
- 收敛判定: 检查目标函数变化是否满足精度要求或达到最大迭代次数。

研究方法

基于 **FEALPy** 的 **Torch** 模块实现引入 **AD** 的变密度方法的算法流程

- 初始化设计变量 ρ 。
- 迭代过程：
 1. 计算当前设计变量下的刚度矩阵 $K(\rho)$ 。
 2. 求解平衡方程 $K(\rho)u = f$ 获得位移场 u 。
 3. 计算目标函数 $C(\rho, u)$ 。
 4. 使用 **PyTorch** 自动计算目标函数对设计变量的导数。 $\frac{\partial C}{\partial \rho}$ 。
 5. 更新设计变量 ρ 。
- 收敛判定: 检查目标函数变化是否满足精度要求或达到最大迭代次数。

研究方法

比较两者的结果, 验证 **AD** 对于变密度方法的影响

- 比较两种方法在计算时间、收敛速度和计算精度上的表现。
- 分析自动微分在复杂问题中的优势和可能的劣势。
- 通过数值实验验证自动微分技术在变密度方法中的应用效果。

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展**
- 6 预期结果与贡献

研究进展

基于变密度方法的柔顺度最小化问题数学模型的推导

- 完成工作:推导了基于变密度方法的柔顺度最小化问题的数学模型。

研究进展

基于 **FEALPy** 中的 **Numpy** 模块实现传统变密度方法

- 计划工作: 基于 **FEALPy** 中的 **Numpy** 模块, 按照推导的数学模型实现传统变密度方法的求解流程。

研究进展

基于 **FEALPy** 的 **Torch** 模块实现引入 **AD** 的变密度方法

- 计划工作:基于 **FEALPy** 的 **Torch** 模块,利用 **PyTorch** 的自动微分功能实现引入 **AD** 的变密度方法的求解流程。

研究进展

比较两者的结果, 验证 **AD** 对于变密度方法的影响

- 计划工作: 完成基于传统变密度方法和引入 **AD** 的变密度方法的实现后, 比较两者在计算时间、收敛速度和计算精度上的表现, 验证自动微分技术的应用效果。

Outline

- 1 引言
- 2 背景与动机
- 3 研究目标
- 4 研究方法
- 5 研究进展
- 6 预期结果与贡献

预期结果

直接将 **AD** 引入变密度方法的效果

- **预期结果**: 直接将 **AD** 技术引入变密度方法的效果可能不好, 可能无法超越传统的变密度方法。
- **原因分析**: 传统变密度方法经过多年的发展和优化, 已经在很多方面达到了较好的效果, 直接引入 **AD** 可能无法立即表现出优势。

预期结果

额外引入正则化项后的效果

- **预期结果:**在引入正则化项之后,应用 **AD** 的变密度方法可能比传统的变密度方法效果更好。
- **原因分析:**正则化项可以改善设计变量的分布,使得 **AD** 的优势在处理复杂问题和提高计算效率方面更加明显。

贡献

引入 **AD** 技术对拓扑优化研究的贡献

- 目前将 **AD** 引入拓扑优化的研究工作比较少,特别是将其与传统方法进行比较的工作更少。本研究通过对比分析传统变密度方法和引入 **AD** 的变密度方法,提供了宝贵的实验数据和理论支持。
- 有利于后续应对 **AD** 技术在非线性问题 and 多物理场问题中的应用挑战。

贡献

基于 **FEALPy** 的实现 对拓扑优化研究的贡献

- 基于 **FEALPy** 实现传统的变密度方法和引入 **AD** 的变密度方法,为后续拓扑优化研究工作的进一步展开提供了坚实的基础。
- **FEALPy** 的模块化设计和多计算内核支持,使得研究成果具有较高的可重用性和扩展性,利于后续研究人员在此基础上进行优化和创新。