伴随优化方法及在 *OpenFOAM* 中的改进

> 能动A71 宋德培 学号：2174110112

1. 伴随方法

在一个偏微分方程系统中，假设存在变量 $x \in R^{n_x}, p \in R^{n_p}$，方程 $f(x,p): R^{n_x} \times R^{n_p} \rightarrow R$以及关系 $g(x,p)=0$，且 g_x 处处非奇异，$d_p f$怎么求?

1.1 动机

$g(x,p)=0$ 的求解是CFD求解器的核心，给定参数 p，程序将计算出 x。例如 p 可以是边界条件或初始条件的参数，也可以是物性参数，而 x 是计算得到的场量，这种求解模式是*正问题*。如果引入 $f(x,p)$ 作为度量标准，例如用来计算 x 的光滑程度，那么通常需要最小化f，这种求解模式是*反问题*。

梯度 $d_p f$ 很有用，可以用来计算优化问题 $min_p f$ 中 f 对于参数 p 变化的敏感程度，并使用梯度下降方法求解最优化问题。

1.2 推导

1）考虑一个简单的函数 $f(x)$，首先由链式法则有

$$d_p f = d_d f(x(p)) = \partial_x f d_p x \ (= f_x x_p)$$

其次因为 $g(x,p)=0$ 处处成立，则 $d_p g = 0$， 也就是

$$g_x x_p + g_p = 0$$

那么得到

$$d_p f = -f_x g_x^{-1} g_p$$

从线性代数的观点看，$f_x g_x^{-1}$ 是一个行向量乘以 $n_x \times n_x$ 的矩阵，并且是以下方程的解

$$g_x^T \lambda = -f_x^T$$

称为伴随方程，λ称为伴随变量。得到 $d_p f = \lambda^T g_p$

2）定义拉格朗日函数

$$L(x,p,\lambda) = f(x) + \lambda^T g(x,p)$$

这里λ是拉格朗日乘子组成的向量，由于 $g(x,p)$ 处处为零，λ可以随意选取。

$$\begin{aligned} d_p f(x) = d_p L &= f_x x_p + d_p \lambda^T g + \lambda^T (g_x x_p + g_p) \\ &= (f_x + \lambda^T g_x) x_p + \lambda^T g_p \end{aligned}$$

如果选取 $g^T \lambda = -f_x^T$，第一项为零，可以避免计算 x_p 并且得到 $d_p f = \lambda^T g_p$，与第一种推导方式相同。

或者，由于$df = f_x dx + f_p dp = (f_x + \lambda^T g_x) dx + \lambda^T g_p dp$，可以推至同样的结果。

2. PDE约束的连续伴随问题

2.1 一般伴随方程

给出一个特定的优化问题

$$\begin{aligned} min \quad & J = J(\mathbf{v}, p, \alpha) \\ s.t. \quad & R(\mathbf{v}, p, \alpha) = 0 \end{aligned}$$

考虑由连续介质力学给出的约束，$\mathbf{v}$ 与 p 作为变量，即等价为前文中的 x; α 作为 设计参数，即等价于前文中的 p，给出问题

$$\begin{aligned} min \quad & J = J(\mathbf{v}, p, \alpha) \\ s.t. \quad & R^u = \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) + \nabla p - \nabla \cdot (2\nu D(\mathbf{v})) + \alpha \mathbf{v} = 0 \\ & R^p = \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{aligned}$$

上式由达西定律引入了渗透率作为源项，假设某一区域使得目标函数增大，**可以通过减小这一区域的渗透率作为惩罚**。$D(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$ 代表应变率张量。

使用拉格朗日乘数法将其转变为无约束优化问题

$$\begin{aligned} min \quad L &= J + \int_\Omega (\mathbf{u}, q) R d\Omega \\ &= J + \int_\Omega q R^p d\Omega + \int_\Omega \mathbf{u} \cdot R^u d\Omega \end{aligned}$$

其中$(\mathbf{u}, q)$为拉格朗日乘子，称其为伴随速度和伴随压力（后面会看到为什么），但是实际上并没有物理含义。

因为

$$dL = L_\alpha d\alpha + L_\mathbf{v} d\mathbf{v} + L_p dp$$

注意这里没有将粘度作为微分变量，是一种近似的做法，被称为“**冻结湍流**”。

由于 $(\mathbf{u}, q)$可以自由选取，取 适当的值使得 $L_\mathbf{v} d\mathbf{v} + L_p dp = 0$ 成立，便得到

$$L_\alpha = J_\alpha + \int_\Omega \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega$$

当考虑网格中的目标函数关于 α的梯度，可以得到

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = J_{\alpha_i} + \mathbf{u_i} \cdot \mathbf{v_i} V_i$$

其中 V_i 为网格体积。

如果 $L_\mathbf{v} d\mathbf{v} + L_p dp = 0$ 成立，那么伴随方程

$$\begin{aligned} \delta_\mathbf{v} J + \delta_p J + & \int_\Omega \mathbf{u} \cdot [\nabla \cdot (\mathbf{v} \delta \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\delta \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla \cdot (2\nu D(\delta \mathbf{v})) + \alpha \delta \mathbf{v}] d\Omega \\ & - \int_\Omega q \nabla \cdot \delta \mathbf{v} d\Omega + \int_\Omega \mathbf{u} \cdot \nabla \delta p d\Omega = 0 \end{aligned}$$

积分使用散度公式与高斯散度定理(以及一些张量运算的推导):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (q\mathbf{v}) = \nabla q \cdot \mathbf{v} + q \nabla \cdot \mathbf{v} \\ \int_\Omega \nabla \cdot (q\mathbf{v}) \, d\Omega = \int_\Gamma q \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \end{aligned}$$

并且把 J 拆分为

$$J=\int_\Gamma J_\Gamma \; d\Gamma+\int_\Omega J_\Omega \; d\Omega$$

得到（*注意* $(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{u}=\nabla(\mathbf{vu})$）

$$\begin{aligned}
&\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p}\right)\delta p+\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\left(-\nabla\cdot\mathbf{u}+\frac{\partial J_\Omega}{\partial p}\right)\delta p\\
&+\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})+\mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})+2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\mathbf{u})-q\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}}\right)\cdot\delta\mathbf{v}-\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma 2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\delta\mathbf{v})\cdot\mathbf{u}\\
&+\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\left(-\nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}-(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{u}-\nabla\cdot(2v\mathbf{D}(\mathbf{u}))+\alpha\mathbf{u}+\nabla q+\frac{\partial J_\Omega}{\partial \mathbf{v}}\right)\cdot\delta\mathbf{v}=0
\end{aligned}$$

观察上面的式子，他应该对任意的 δp和 $\delta\mathbf{v}$ 成立，因此各个积分分别等于0，当在 Ω 内积分时，边界积分为零，因此得到 Ω 内的伴随方程

$$\begin{aligned}
-\nabla(\mathbf{vu})-\nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}&=-\nabla q+\nabla\cdot(2\nu D(\mathbf{u}))-\alpha\mathbf{u}-\frac{\partial J_\Omega}{\partial \mathbf{v}}\\
\nabla\cdot\mathbf{u}&=\frac{\partial J_\Omega}{\partial p}
\end{aligned}$$

可以看到，这组方程与 N-S 方程非常相似，因此变量 $(\mathbf{u},q)$ 被看作是非物理的速度和压力。

2.2 边界条件

在边界处，可以得到边界条件为

$$\begin{aligned}
\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})+\mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})+2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\mathbf{u})-q\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}}\right)\cdot\delta\mathbf{v}-\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma 2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\delta\mathbf{v})\cdot\mathbf{u}=0\\
\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p}\right)\delta p=0
\end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned}
\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})+\mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})+2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\mathbf{u})-q\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}}\right)\cdot\delta\mathbf{v}=0\\
\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma\left(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p}\right)\delta p+\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma 2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\delta\mathbf{v})\cdot\mathbf{u}=0
\end{aligned}$$

1） 在入口边界以及壁面处，速度值为给定值或者0，因此 $\delta\mathbf{v}=0$，因此部分积分可以视为0，为了避免无解，显然应该选取第一种边界条件的定义。

因此

$$\begin{aligned}
&\int_\Gamma \mathrm{d}\Gamma 2v\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\delta\mathbf{v})\cdot\mathbf{u}=0\\
&u_n=-\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p}
\end{aligned}$$

其中 $u_n=\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}$ 为伴随速度在边界法向的分量。现在需要定义u_t 在边界处的取值，这里需要用到一些近似，具体推导参看参考文献[1]，这里直接给出入口及壁面处应该满足的边界条件：

$$\begin{aligned}
u_t&=0\\
u_n&=-\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p}\\
\mathbf{n}\cdot\nabla q&=0
\end{aligned}$$

2) 出口边界常见设为压力为零和速度零梯度，因此除了自动满足的积分，边界条件剩下

$$\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})+\mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})+v(\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{u}-q\mathbf{n}+\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}}=0$$

3. 特定问题—目标函数为能量耗散率

选取目标函数为流动的能量耗散率，即最小化能量损失

$$J = -\int_\Gamma (p + \frac{1}{2}v^2)\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}\,d\Gamma$$

负号是因为考虑到通量的方向，即**最小化进出口能量之差。**目标函数 L 相对设计变量的梯度

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = J_{\alpha_i} + \mathbf{u_i}\cdot\mathbf{v_i}V_i = \mathbf{u_i}\cdot\mathbf{v_i}\mathbf{V_i}$$

$J_\Omega = 0, J_\Gamma = -(p + \frac{1}{2}v^2)\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}$，因此

$$\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} = -\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}, \quad \frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial(-p\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} - \frac{1}{2}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{v})\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})}{\partial \mathbf{v}} = -p\mathbf{n} - (\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\cdot\mathbf{v} - \frac{1}{2}v^2\mathbf{n}$$

代入伴随方程，得到在 Ω 内

$$\begin{aligned} -\nabla(\mathbf{vu}) - \nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{v} &= -\nabla q + \nabla\cdot(2\nu D(\mathbf{u})) - \alpha\mathbf{u} \\ \nabla\cdot\mathbf{u} &= 0 \end{aligned}$$

入口边界条件：

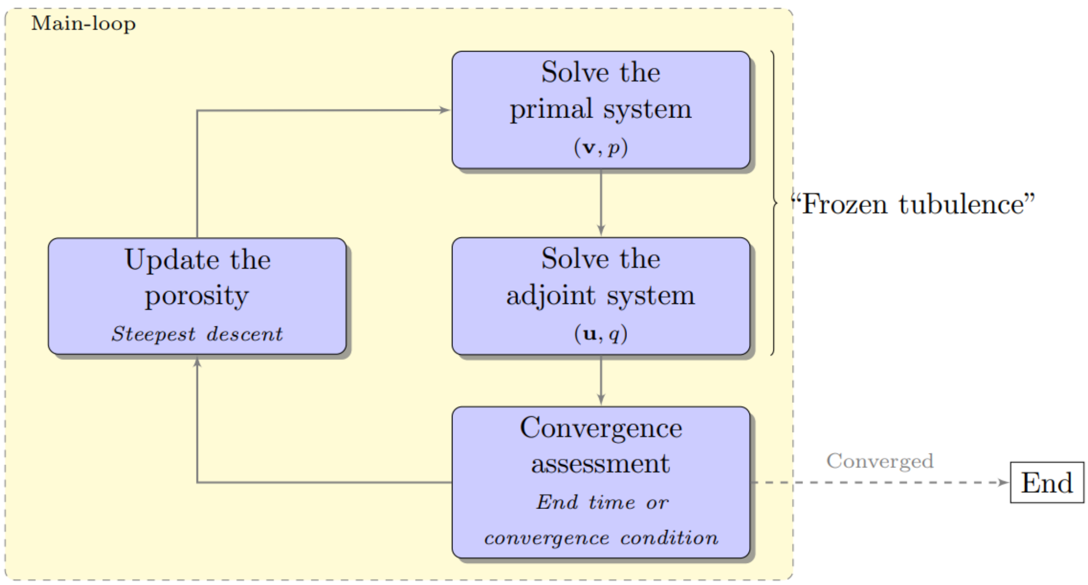
$$\begin{aligned} u_t &= 0 \\ u_n &= v_n \\ \mathbf{n}\cdot\nabla q &= 0 \end{aligned}$$

出口边界条件：

$$\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}) + \mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}) + v(\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{u} - q\mathbf{n} - p\mathbf{n} - (\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\cdot\mathbf{v} - \frac{1}{2}v^2\mathbf{n} = 0$$

4. *OpenFOAM* 中的实现

首先给出算法流程图：



4.1 原始方程和伴随方程的求解

首先，使用SIMPLE算法求解原始变量

```
// Momentum predictor
            // @turbulence->divDevSigma: 湍流源项，应变率张量散度
            fvVectorMatrix UEqn
            (
                fvm::div(phi, U)
              + turbulence->divDevSigma(U)
              + fvm::Sp(alpha, U)
            );
            UEqn.relax();
            solve(UEqn == -fvc::grad(p));
// omit-----------------------------------------------------
//压力泊松方程
            volScalarField rAU(1.0/UEqn.A());
            volVectorField HbyA(constrainHbyA(rAU*UEqn.H(), U, p));
            surfaceScalarField phiHbyA("phiHbyA", fvc::flux(HbyA));
            fvScalarMatrix pEqn
            (
                fvm::laplacian(rAU, p) == fvc::div(phiHbyA)
            );

            pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);
            pEqn.solve();
// Explicitly relax pressure for momentum corrector
            p.relax();
// Momentum corrector
            U = HbyA - rAU*fvc::grad(p);
```

也就是求解

$$\nabla\cdot(\mathbf{v}\mathbf{v})+\nabla p-\nabla\cdot(2\nu D(\mathbf{v}))+\alpha\mathbf{v}=0$$
$$\nabla\cdot\mathbf{v}=0$$

然后求解伴随方程（与原始变量方程非常相似）

```
// Adjoint Momentum predictor
            volVectorField adjointTransposeConvection((fvc::grad(Ua) & U));
            zeroCells(adjointTransposeConvection, inletCells);
            fvVectorMatrix UaEqn
            (
                fvm::div(-phi, Ua)
              - adjointTransposeConvection
              + turbulence->divDevSigma(Ua)
              + fvm::Sp(alpha, Ua)
            );
            UaEqn.relax()
            solve(UaEqn == -fvc::grad(pa));
```

$$-\nabla(\mathbf{v}\mathbf{u})-\nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}=-\nabla q+\nabla\cdot(2\nu D(\mathbf{u}))-\alpha\mathbf{u}$$
$$\nabla\cdot\mathbf{u}=0$$

注意到在这里，单独对 $\nabla\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}$ 在入口边界处置为0，并且处理为显式的源项。我认为这样处理是出于问题适定性的需要，正如前文处理入口边界将伴随压力设置为零梯度一样，将这项消去使得伴随方程和原始方程在入口边界完全一致。

4.2 边界条件的处理

对于入口边界以及壁面，满足以下的边界条件

$$\begin{aligned} u_t &= 0 \\ u_n &= v_n \\ \mathbf{n}\cdot\nabla q &= 0 \end{aligned}$$

即对于速度，壁面使用无滑移条件，入口使用固定值并与原始变量保持一致；在入口和壁面处压力施加零梯度条件。

对于出口边界，则比较复杂。前面推导的边界条件

$$\mathbf{n}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})+\mathbf{u}(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})+v(\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{u}-q\mathbf{n}-p\mathbf{n}-(\mathbf{v}\cdot\mathbf{n})\cdot\mathbf{v}-\frac{1}{2}v^2\mathbf{n}=0$$

注意原始变量取为零压力，零速度梯度，将其按照法向和切向分解，得到

$$\begin{aligned} q &= \mathbf{u}\cdot\mathbf{v}+u_n v_n+\nu(\mathbf{n}\cdot\nabla)u_n-\frac{1}{2}v^2-v_n^2 \\ 0 &= v_n(\mathbf{u_t}-\mathbf{v_t})+\nu(\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{u_t} \end{aligned}$$

分别代表伴随压力和伴随速度满足的边界条件。在计算法向梯度时，使用近似

$$\begin{aligned} \nu(\mathbf{n}\cdot\nabla)u_n &= \nu\frac{u_n-u_{n,neighbor}}{\Delta} \\ \nu(\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{u_t} &= \nu\frac{\mathbf{u_t}-\mathbf{u_{t,neighbor}}}{\Delta} \end{aligned}$$

因此出口处的压力边界表示为

```
const fvsPatchField<scalar>& phip =
    patch().lookupPatchField<surfaceScalarField, scalar>("phi");
const fvsPatchField<scalar>& phiap =
    patch().lookupPatchField<surfaceScalarField, scalar>("phia");
const fvPatchField<vector>& Up =
    patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("U");
const fvPatchField<vector>& Uap =
    patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("Ua");

const incompressible::RASModel& rasModel =
    db().lookupObject<incompressible::RASModel>("momentumTransport");
scalarField nueff = rasModel.nuEff()().boundaryField()[patch().index()];
const scalarField& deltainv = patch().deltaCoeffs(); // m^-1
operator==(phip*phiap/sqr(patch().magSf()) +
    (Uap&Up) +
    nueff*deltainv*(phiap/patch().magSf() -
    (Uap.patchInternalField()&patch().nf())) -
    0.5*sqr(mag(Up)) -
    magSqr(Up&patch().Sf()/patch().magSf()));

fixedValueFvPatchScalarField::updateCoeffs();
```

速度边界表示为

```
const fvsPatchField<scalar>& phiap =
    patch().lookupPatchField<surfaceScalarField, scalar>("phia");
const fvsPatchField<scalar>& phip =
    patch().lookupPatchField<surfaceScalarField, scalar>("phi");
const fvPatchField<vector>& Up =
    patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("U");
const fvPatchField<vector>& Uap =
    patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("Ua");

const incompressible::RASModel& rasModel =
    db().lookupObject<incompressible::RASModel>("momentumTransport");
const scalarField deltainv = patch().deltaCoeffs();
scalarField nueff = rasModel.nuEff()().boundaryField()[patch().index()];
scalarField Un(mag(patch().nf() & Up));
vectorField Ut(Up - phip*patch().nf()/patch().magSf());
vectorField Uaneigh(Uap.patchInternalField());
vectorField Uaneigh_n((Uaneigh&patch().nf())*patch().nf());
vectorField Uaneigh_t(Uaneigh - Uaneigh_n);
// Ut = (V-Vn)/Vn
vectorField Uap_t((Un*Ut + nueff*deltainv*Uaneigh_t)/(Un + deltainv*nueff));
vectorField Uap_n(phiap*patch().nf()/patch().magSf());
// U = Un + Ut
// Un = phi*\vec{A}/(A^2)
vectorField::operator=(Uap_t + Uap_n);

fixedValueFvPatchVectorField::updateCoeffs();
```

4.3 梯度下降法 （Deepest descent method）

完成伴随方程计算后，需要更新孔隙率，如前文推导

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = \mathbf{u_i} \cdot \mathbf{v_i} \mathbf{V_i}$$

按照梯度下降的方向寻找目标函数极值，定义步长为 λ 。则

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - \mathbf{u_i} \cdot \mathbf{v_i} V_i \lambda$$

在 *OpenFOAM* 的实现中，我们需要注意给 α 施加限制 $\alpha < \alpha_{max}$ ，并施加松弛因子保证稳定性，因此给出以下代码

```
// @mesh.fielfRelaxationFactor : fvSolution定义的松弛因子
        alpha +=
            mesh.fieldRelaxationFactor("alpha")
           *(min(max(alpha - lambda*(Ua & U), zeroAlpha), alphaMax) - alpha);
```

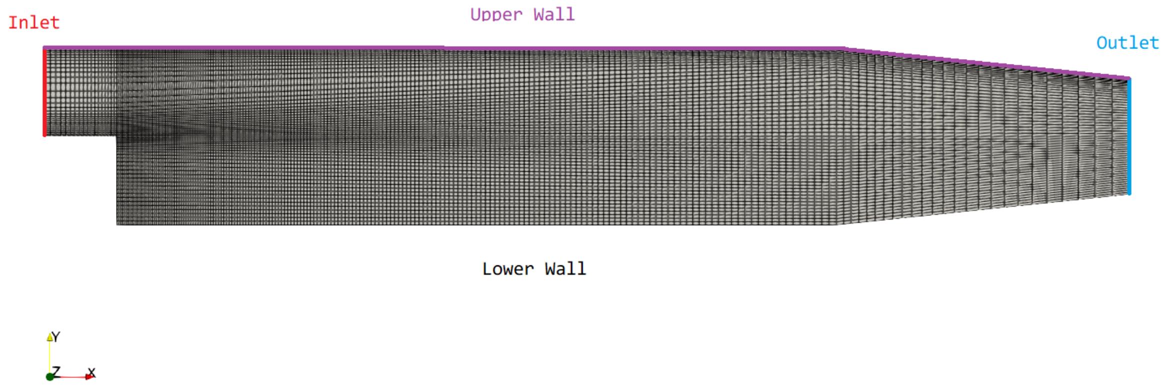
4.4 算例

测试算例为 *OpenFOAM* 自带算例 `pitzDaily`，管道内流动问题，使用 $k-\epsilon$ 湍流模型，采用的物性参数，湍流模型参数以及梯度下降算法参数如下：

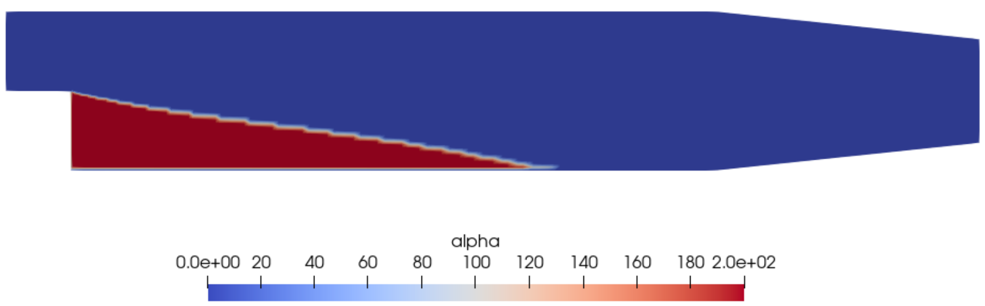
粘度	**入口湍动能**	**入口湍流耗散率**	**梯度下降步长**	α_{max}
$\nu = 1 \times 10^{-5}\ m^2/s$	$k = 0.375\ m^2/s^2$	$\epsilon = 14.855\ m^2/s^3$	$\lambda = 1 \times 10^5\ s/m^2$	$200\ s^{-1}$

边界条件和使用的网格如下图所示，壁面为无滑移条件。

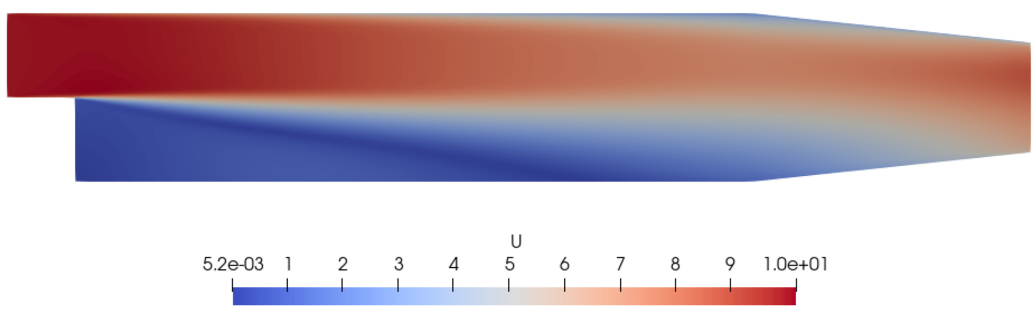
变量	Inlet	Outlet
$\mathbf{v}$	固定值 $10\ m/s$	零梯度
$\mathbf{u}$	固定值 $10\ m/s$	伴随速度条件
p	零梯度	固定值 0 pa
q	零梯度	伴随压力条件

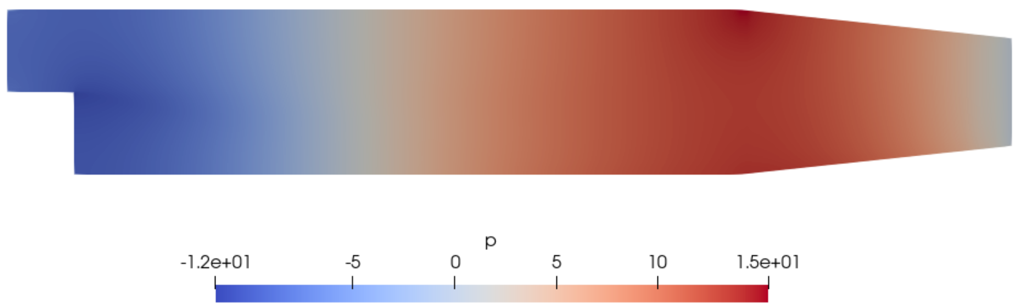


N-S方程和伴随方程的求解采用SIMPLE算法， α 松弛因子设为0.1。每步计算收敛条件为相对残差小于0.1或绝对残差小于1e-8。为保证稳定性，N-S方程对流项使用二阶迎风格式，伴随方程及湍流模型有关项使用一阶迎风格式。最终得到 α 的分布情况：

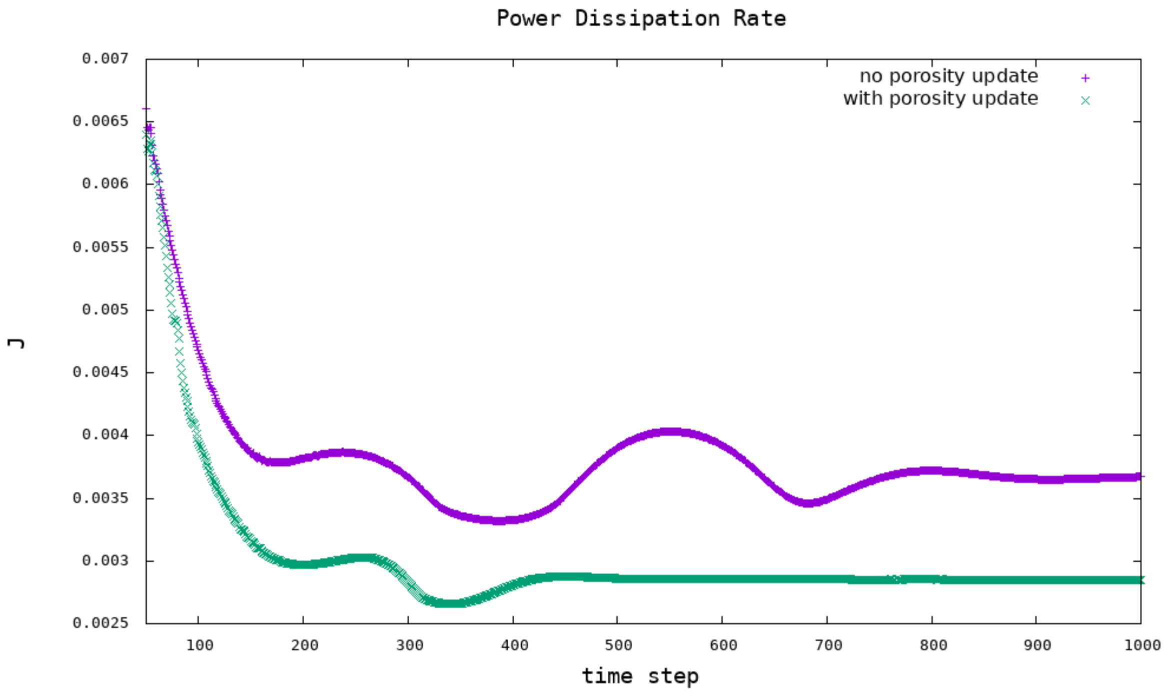


可以看到，α 值大的地方也就是被惩罚的区域，将这部分挖掉后流动将更加自然，台阶处的涡消失。





可以计算出损失函数 J 的变化情况，与不进行伴随优化的解对比，实现了流动能量耗散率的减小。



5. 总结

伴随优化方法可以扩展到流动、传热、结构耦合问题的求解，也可以与基于梯度的其他优化算法相结合；不仅可以进行形状优化，也可以扩展到其他多参数，目前正得到越来越多的应用。

参考资料

[1] C. Othmer, A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows
[2] Andrew M. Bradley, PDE-constrained optimization and the adjoint method
[3] Luis Fernando Garcia Rodriguez, Topology Optimisation of Fluids Through the Continuous Adjoint Approach in OpenFOAM
[4] Ulf Nilsson, Description of adjointShapeOptimizationFoam and how to implement new objective functions