

单材料几何微结构设计研究综述

田李昊¹⁾ 吕琳¹⁾ 彭昊¹⁾ 刘培庆¹⁾ 闫鑫¹⁾ 刘利刚²⁾ 屠长河¹⁾

¹⁾(山东大学计算机科学与技术学院山东青岛 266237)

²⁾(中国科学技术大学数学学院合肥 230026)

摘要 增材制造(3D打印)技术的快速发展促进了复杂几何结构在航空航天、辅助医疗、交通运输等工业生产中的应用。在自然界中广泛存在并具有优异物理性能的几何微结构可以通过3D打印的方式进行制备。如何设计几何微结构以达到特定物理性能目标的问题已成为计算机辅助设计、计算机辅助工程、机械工程与材料科学学科交叉的一项研究热点。本文对近年来面向单材料3D打印的几何微结构设计工作进行综述,系统地梳理了几何微结构的主要设计方法。首先,本文从几何约束和物理目标两个角度介绍了几何微结构的设计要求;随后将几何微结构单元的设计方法从优化方法、参数化方法和过程方法三个类型分别进行了详细阐述与分析;此外,本文也对几何微结构单元在给定形状空间内的合成方法进行了总结。最后,本文对目前几何微结构设计研究中待解决的问题进行了讨论,并展望了可能的发展方向。

关键词 几何微结构; 结构设计; 结构优化; 3D打印

中图法分类号 TP391

Recent Progress on Geometric Microstructure Design: A Survey

TIAN Li-Hao¹⁾ LU Lin¹⁾ PENG Hao¹⁾ LIU Pei-Qing¹⁾ YAN Xin¹⁾ LIU Li-Gang²⁾ TU Chang-He¹⁾

¹⁾(School of Computer Science and Technology, Shandong University, Qingdao 266237)

²⁾(School of Mathematical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

Abstract Living creatures interact with the natural environment in the long process of evolution and have high adaptability to the environment. Through natural selection, various microstructures with complex shapes and excellent properties have been formed. These microstructures have a series of unique physical properties. In recent years, microstructures have also received increasing attention in industrial manufacturing, tissue engineering, and biomedicine. Inspired by microstructures in nature, bionics is based on the principles of engineering mechanics to simulate and optimize the geometrical expression, structural combination, and physical properties of objects' microstructures. The shape of microstructures fabricated based on traditional manufacturing methods is relatively simple, but the emergence of additive manufacturing (also known as 3D printing) has broken this limitation. The rapid development of additive manufacturing technology has promoted the application of complex geometric structures in industrial production such as aerospace, auxiliary medical care, and transportation. Geometric microstructures that are widespread in nature and have excellent physical properties can be prepared by 3D printing. The geometric microstructure specifically refers to a geometric structure with a very small size relative to the model as a whole. Its shape can usually be defined in a small and

本课题得到国家自然科学基金(No.61972232, 620525207)资助。田李昊, 博士研究生, 计算机学会(CCF)学生会员, 主要研究领域为计算机图形学、数字几何处理。E-mail: tianlihao0420@gmail.com。吕琳(通信作者), 博士, 教授, 博士生导师, 计算机学会(CCF)高级会员, 主要研究领域为计算机图形学、数字几何处理和计算制造。E-mail: llu@sdu.edu.cn。彭昊, 博士研究生, 计算机学会(CCF)学生会员, 主要研究领域为计算机图形学。E-mail: penghao@mail.sdu.edu.cn。刘培庆, 硕士研究生, 计算机学会(CCF)学生会员, 主要研究领域为计算机图形学。E-mail: lpq17@mail.sdu.edu.cn。闫鑫, 博士研究生, 计算机学会(CCF)学生会员, 主要研究领域为计算机图形学。E-mail: yanxin91@mail.sdu.edu.cn。刘利刚, 博士, 教授, 博士生导师, 计算机学会(CCF)高级会员, 主要研究领域为计算机图形学。E-mail: lgliu@ustc.edu.cn。屠长河, 博士, 教授, 博士生导师, 计算机学会(CCF)高级会员, 主要研究领域为计算机图形学。E-mail: chtu@sdu.edu.cn。

regular geometric space with periodic boundary conditions, such that a given model can be filled with periodic paving. Designing geometric microstructures to achieve specific physical performance goals has become a research topic in the intersection of computer-aided design, computer-aided engineering, mechanical engineering, and material science. In this paper, the geometric structure design method concerned in computer graphics is the core, and the different design and optimization methods of microstructure are listed and analyzed. First, this article introduces the design requirements of geometric microstructures from the perspectives of geometric constraints and physical goals; then, the design methods of geometric microstructure units are described in detail from the three types of optimization methods, parameterization methods, and procedural methods. In addition, this article also summarizes the synthesis methods of geometric microstructure units in a given shape space. Finally, this article discusses the problems to be solved in the current research on geometric microstructure design and the possible development direction.

Key words microstructure; structural design; structural optimization; 3D printing

1 引言

生物在漫长的自然演化过程中与自然环境相互作用, 已对环境具有高度的适应性, 且通过物竞天择形成了各种具有复杂形状和优异功能的微结构, 如蜂巢、蚁穴、骨头、蜻蜓翅膀等(图 1)。这些微结构具有一系列独特的物理性质, 如能够达到更高的空间利用效率和在较小质量的情况下具有更高的力学强度等。近年来, 微结构在工业制造、组织工程、生物医疗等领域也得到了日益增加的关注。受到大自然中微结构的启发, 仿生学以工程力学原理为基础, 对物体微结构的几何表达、结构组合及物理性质等方面进行仿生模拟及优化设计, 已在材料科学、工程科学等领域进行了长期的研究^[1], 并在包装运输、建筑工程、航空航天、环境保护等领域中得到了实际应用, 如图 2(上)所示的轻质、散热、吸音、隔热等微结构材料。

1.1 微结构与3D打印

基于传统制造方式制备的微结构形状相对简单, 然而增材制造(又称 3D 打印)的出现打破了这一限制。相比于传统的减材制造或者等材制造方式, 3D 打印技术可制造出具有精细拓扑结构及复杂几何形状模型, 实现了精准数字化制造。经过三十余年的发展, 3D 打印的成型材料覆盖了光敏树脂、纳米陶瓷树脂等树脂材料, 各类尼龙及塑料、橡胶等软质材料, 以及不锈钢、铝合金、钛合金等金属材料^[2]。制造精度也有较大的进步, 如金属材料可达毫米级别, 树脂材料可达微米级别。同时,

多自由度 3D 打印技术的出现也为复杂、大型结构的免支撑制造提供了帮助^[3]。

增材制造的快速发展促使大量微结构工作的出现, 越来越多的复杂几何微结构通过 3D 打印的方式制造出来, 如图 2(下)所示。力学特性诸如强度、刚度, 是物体在实现目标功能时所必须的基本性质。因此在设计模型并通过 3D 打印制造的过程中, 验证力学性质是否满足约束是一个必不可少的步骤。由于 3D 打印精度可高于毫米级, 设计力学微结构可以在主流 3D 打印机所制造的数十厘米尺寸的模型上得到明确的验证, 易于计算机图形学研究者进行设计与制造的迭代优化, 所以在研究面向力学性质的几何微结构设计问题结合 3D 打印技术是十分自然的选择。

航空航天与机械工程领域的研究者们通过仿真计算以及物理实验, 验证了增材制造的微结构相较于无微结构的同类模型确实存在力学性质方面的优势。在 Li 等人^[4]的工作中, 使用微结构优化后的飞行器悬臂相对于使用传统大尺寸桁架结构填充的相同悬臂外形, 在相同的边界条件和载荷下变形更小, 如图 3(a)所示; Wu 等人^[5]通过物理实验发现, 其设计的含有微结构的拓扑优化结构, 相较于相同几何及相同重量的无微结构拓扑优化结果, 能够在刚度差距不大的情况下承受更大的压力, 如图 3(b)所示。

目前的 3D 打印技术在微结构成形方面仍有一些不足之处。一些单材料打印技术中的支撑材料需要通过人工后处理去除, 而微结构的复杂性导致这一操作不可行, 为解决该问题, 可在微结构设计中考虑结构免支撑约束。尽管具有闭孔的微结构可能

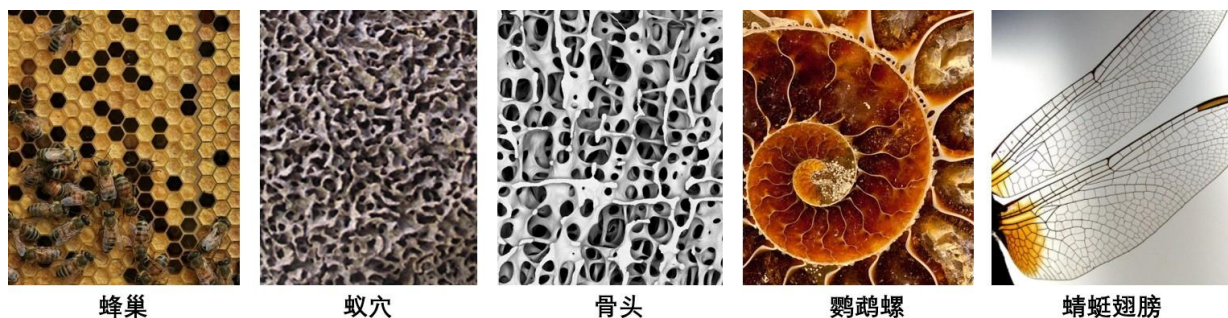


图 1 自然界中的微结构举例

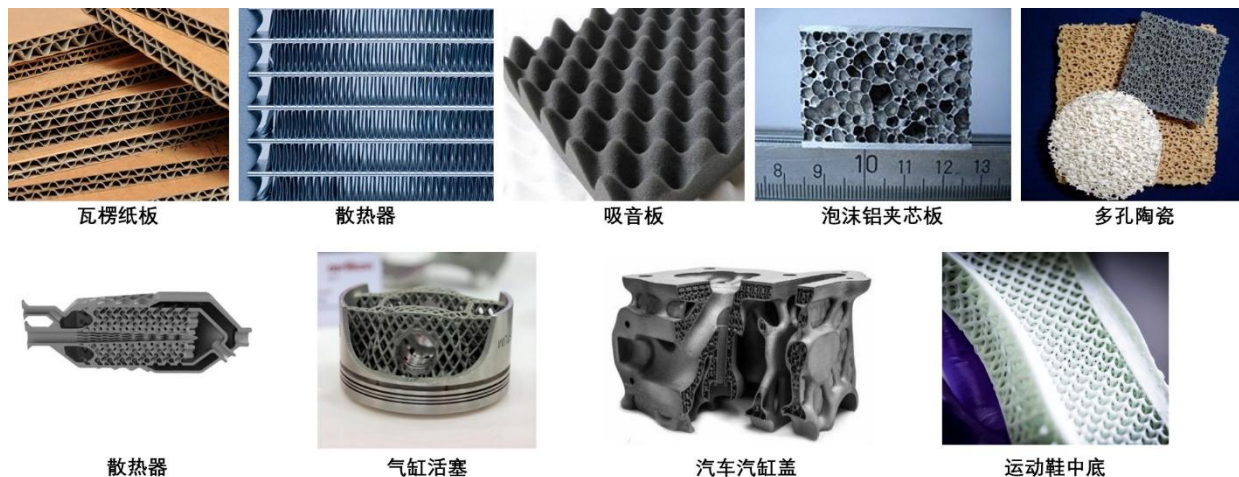


图 2 工业中的微结构举例：(上)传统制造方式制备的微结构；(下)3D 打印方式制备的微结构

具有更高的刚度^[6]，但在一些制造技术下无法实现。此外，由于微结构的各类应用要求小尺寸单元在较大的范围内密铺，而大多数高制造精度的 3D 打印机并不具有太大的打印幅面，导致可以应用微结构的模型类别受到限制。

在制造方式快速发展的同时，几何结构设计过程中涉及的数据表达以及结构优化的问题，需要计算机图形学相关的人员参与到几何微结构的相关研究中^[7,8]。

1.2 几何微结构的形式

首先给出本文中多次使用的微结构相关概念的描述。

几何微结构具体指相对于模型整体而言尺寸非常小的几何结构，通常可以在小范围的几何空间内充分定义其形状，并采用周期性密铺等方式填充整体模型^[7]。

周期性微结构指材料分布在可密铺形状单元内的几何微结构^[7]。

随机性微结构指边界形状可变，无法直接划分单元分布的周期的几何微结构，又被称为非周期性微结构^[8]。

微结构在材料学科中，定义为 25 倍以上光学显微镜所能观测到的小尺寸几何结构^[9]，但由于微结构设计的技术可以通过模型的整体放缩而自然适用于从精密工件到建筑尺度的规模，故本文中所提及的几何微结构的概念并不针对于实际的物理尺寸，而是指微结构的基本单元在所应用的模型整体中只占很小比例的体积。本文此后所提到的微结构均指代无关实际尺寸的几何微结构。

在计算机辅助设计等相关领域中，三维模型的内部复杂几何结构也被称为多孔结构。多孔结构定

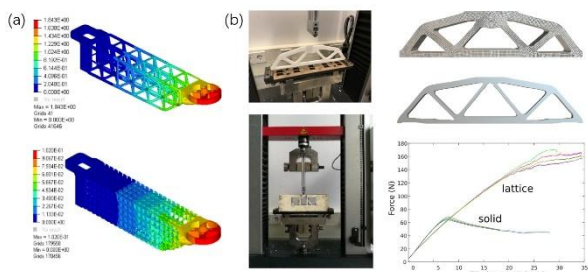


图 3 增材制造微结构的力学性质优势：(a)使用传统桁架结构的飞行器悬臂(上)与微结构填充的悬臂(下)^[4]；(b)相同体积分数的微结构填充的拓扑优化结果(右上)与传统拓扑优化结构(右下)，其力学性能测试(左)及结果曲线^[5]

义为由内部的相互封闭或贯通的孔洞构成的整体结构。多孔结构的定义与下文中周期性微结构具有一定的重合之处, 本文强调的关键区别在于多孔结构并没有需要由周期性的微结构单元组成的限制, 其中具有随机性的微结构没有明确的周期性边界。随机性更容易使整体结构达成各向同性, 以及使具有不同参数的微结构平滑连接。本文在第 3.3.1 节中介绍了一些具有随机性的微结构。

不同于随机性微结构, 周期性微结构的基本单元是固定边界的可密铺多面体, 绝大多数工作中采用正六面体。正六面体单元天然具有正交性, 在满足常见微结构应用场景中需求的同时, 正六面体单元可密铺扩展, 有易于邻接和进行计算分析的优势。采用均匀单元设计微结构的重要原因之一就是物理仿真计算的可行性。对于几何十分复杂的大尺度模型, 将全部细节完整表达并进行有限元法仿真对计算能力的要求过高, 而采用周期性边界的均匀单元排列, 可以使用均质化方法(Homogenization)^[10,11], 即通过计算单个六面体单元内部的结构, 来获得整体模型的等效物理性质, 从而显著降低计算量, 并能在一定程度上保证仿真的准确性。均质化作为针对微结构的有限元方法, 与传统方法存在部分差异。在应用场景上, 均质化方法需要给定周期性边界条件以表示单元的重复排列, 并且需要模型尺寸与微结构单元尺寸差距极大, 以保证计算结果数值准确。在结果上, 传统有限元计算出各单元的应力等数值结果, 而均化方法求解微结构整体的等效物理性质^[11]。在几何微结构设计过程中, 均质化方法的计算结果可以验证大量结构的性质, 从而获得几何与物理间的对应关系, 用于生成微结构数据集或指导拓扑优化过程。

达成各类几何微结构所需要的不同设计方法介绍见 2.2 节。

1.3 超材料技术

通过设计微结构以达到不同物理性质目标的工作又与超材料(Metamaterial)^[12]技术有共通之处。超材料是指一类具有超常物理性质的人造材料, 具有各种自然界中不存在的性质, 如负磁导率和负介电常数^[13], 负折射率^[14]等。超材料的特殊性质来自于全新设计的结构, 它的基材料为传统材料, 这些材料通常在比影响某种物理现象的尺度更小的空间中排列为重复形状。超材料是一个新兴交叉学科领域。我国十分重视超材料, 并将其作为发展战略性新兴产业中的关键技术。根据所影响的物理性质不

同, 超材料可分为光学超材料、电磁超材料、力学超材料、热学超材料和声学超材料等。其中, 负热膨胀系数超材料也被划分为力学超材料。该超材料结构不同于传统材料热胀冷缩的性质, 能够在温度升高时整体体积减小。本文在描述与基于 3D 打印的微结构设计问题高度相关的力学超材料时, 并不涉及对于负热膨胀超材料的结构设计。因为负热膨胀超材料需求两种或以上的多材料打印技术, 依靠不同材料的热膨胀系数差异以及单元内结构设计达成目的。

鉴于当前的 3D 打印技术中使用单一材料的情况更加普遍, 本文将面向单材料 3D 打印, 对近十几年来的微结构与优化技术进行全面的整理与综述, 探讨高刚度的轻量化结构、高弹性结构、负泊松比结构以及各向同性结构的设计与建模。

1.4 本文内容

现有的微结构(超材料)研究综述中更偏向叙述传统的物理性质分类^[15], 关注微结构(超材料)的制备方式^[16]以及对超常物理性质的应用^[17], 涉及到几何拓扑设计等方面的内容相对较少。此外, 在各类综述文章以超材料作为主题介绍不同微结构单元结构时, 很少涉及计算机辅助设计及计算机图形学领域的工作。本文以计算机图形学领域关注的几何结构设计方法为核心, 梳理分析微结构的不同设计与优化方法。

接下来本文将按照以下思路进行组织: 第 2 节将介绍几何微结构的设计要求与设计方法; 第 3 节对微结构设计方式进行分类阐述与分析; 第 4 节介绍微结构的合成方法研究工作, 最后通过第 5 节对全文进行总结, 并讨论和展望微结构设计研究中的挑战以及未来的研究方向。

2 几何微结构研究概述

2.1 几何微结构的设计要求

几何微结构的设计需要遵循一系列的要求, 以满足微结构生产制造过程中可制造性的必要限制, 以及针对特定应用场景性能需求的优化目标。本节从几何约束和物理目标两个方面阐述几何微结构的设计要求。

2.1.1 几何约束

微结构在几何方面的关键约束条件以及评价指标如下。

实体连通为保证微结构组成的实体模型在单一材料下的可制造性,结构的实体部分需要保持连通并为单一整体。

空腔连通如果微结构的空腔部分不连通,即内部存在封闭孔隙空间,在制造过程中会造成材料残留,对于很多应用是无法接受的,如散热器件、辅助医疗中的骨植入体等。因此,空腔的连通性也是微结构设计中的重要约束。

免支撑对于熔融沉积成型(Fused Deposition Modelling, FDM)、光固化成型(Stereolithography, SLA)、数字光处理(Digital Light Processing, DLP)等3D打印技术,在制造中需要对悬空的几何结构添加支撑以保证制造可行性,因此在设计阶段确保没有悬空结构以达到制造免支撑也是一个可选几何约束。

光滑性表面光滑的结构具有更连续的力学性质,有助于避免应力堆积。此外,光滑性也对渗透性、通过性等性能有益,因此可以作为微结构设计中考虑的几何性质。

相对尺寸小引言中介绍的均质化技术通过微结构单元的物理性质近似计算由该单元密铺组成的大尺寸模型的等效物理性质,这一技术的前提是应满足微结构单元的尺寸远远小于实际模型的尺寸。

轻量化由微结构组成的物体往往具有更小的体积分数及质量,旨在减少重量的前提下满足应用所需的物理性质。另外,轻量化也可以减少3D打印的时间与材料代价,因此,轻量化往往是结构优化的目标之一。

2.1.2 物理性能

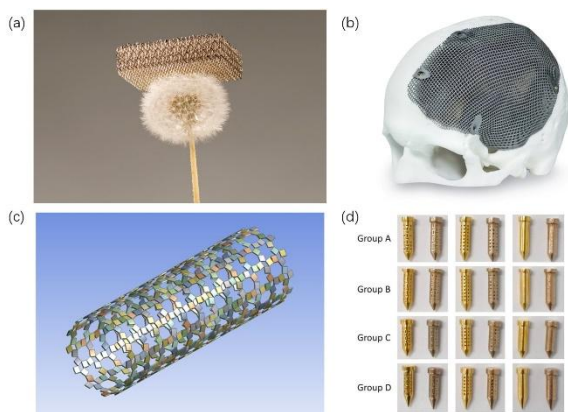


图4 力学微结构的应用举例:(a)轻量化结构^[18];(b)颅骨植入体^[19];(c)负泊松比食道支架^[20];(d)负泊松比钉子^[21]

人造物体的微结构应用领域十分广泛,研究人

员将各类应用场景所需求的物理性质抽象出来,将其作为微结构的衡量准则及优化目标。以微结构的力学性质为例,如图4(a)(b)所示的微结构应用,需要在保证较小质量的基础上增强刚度,图2中的运动鞋中底追求可控的弹性性质,图4(c)(d)则要求独特的负泊松比性质以满足其特殊的应用场景。本文讨论的力学目标如下。

刚度高刚度的力学微结构设计是一个经典的研究课题^[22]。对于航空航天器件以及交通工具部件生产等领域,满足实际力学性能指标要求的轻质工件是不可或缺的。通过微结构,可以制造超自重16万倍载荷的硬质结构^[23]。在工业生产中,这种结构能够节省材料,具有极高的孔隙率,适用于高压环境下的各类精密部件。与高刚度目标相反,极小的刚度数值可以达成超高弹性,这同样是另一类可变形物体应用微结构时的物理性质目标。

泊松比微结构单元的等效泊松比也是力学目标之一。泊松比是材料在某一方向受压力或拉力时,横向正应变与轴向正应变的绝对值比值,反映了该材料在受力的垂直方向上尺寸变化情况。通常来说,传统各向同性材料的泊松比范围在0至0.5之间,其对应的物理性质具体体现为:在材料沿某一方向受到压缩时,其正交方向显示出扩张的性质。由于微结构可以达成自然界中难以存在的力学响应,其被广泛研究的重要独特性能为负泊松比^[24,25]。负泊松比材料沿某一方向压缩时,其正交方向同样显示出压缩的性质,微结构表现为整体压缩^[26]。利用这种独特的物理性质,负泊松比微结构可作为方便扩张的新型食道支架^[27],负泊松比结构的轮胎能够起到减震效果^[28],负泊松比钉子具有更好的推入和拔出性能^[21]。此外,负泊松比结构具有吸声、隔热、抗冲击等物理特性,通过设计微结构来达成负泊松比性质是十分有意义的。

各向同性各向同性表示物体的物理性质在沿各个方向测量时均相同,在本文中指微结构在不同方向展现出相同的等效刚度。而各向异性表示在至少一个方向中,物体可测量出不同数值的物理性质。由于微结构天然的正六面体排布方式,其构成的模型整体天然具有一定的各向异性。具体来说,在现有的性能要求中,绝大多数工作只考虑三个正交方向上的物理性质,因而所设计的单元大多具有正交各向异性或正交各向同性。而在均匀的正六面体排列中,沿体心到面心的方向和体心到角点的方向具有不同的性质,这一点同样在晶体中有所体

现：不考虑晶格缺陷的均匀单晶呈现各向异性，而诸如石蜡等分子排列杂乱的化合物具有更近于各向同性的力学性质。在实际的设计需求中，任意方向的物理性质都可能需要满足一定的约束。如果微结构的各向异性过于明显，则当物体受外力方向出现变化时，微结构的表现将会有明显差异，这不符合将模型视为由单一均匀的等效材料构成的基本假设，会导致一系列设计之外的实际应用问题。因此通过设计几何结构使得正六面体的微结构单元尽量呈现各向同性，成为微结构设计中需要考虑的一个物理目标。

2.2 几何微结构的设计方法

为了制造出满足给定几何约束并符合物理目标的模型，内部结构设计方法的思路可分为两种。



图5 自上而下的结构设计流程。设计空间为整个输入模型，根据几何约束及物理目标确立优化算法，再根据边界条件完成模型内部结构的求解^[29]

1) 自上而下的优化方法：首先以整个模型内部区域作为设计空间，在确定模型的某种实际性能要求后，通过优化方法求解获得细粒度的最终结构，如图5所示。优化方法包含拓扑优化，将整个模型进行体素化划分，以每个体素为计算粒度，通过敏感性分析得到优化的模型内部体素分布。内部结构设计的优化方法中还包含基于形元的优化，优化由一系列特定的几何特征组成的内部结构。优化方法的仿真优化结果较好，计算精度更高，但较为复杂，同时计算需求量大导致求解速度缓慢，而且通过优化方法，每次针对特定需求的计算都仅能获得针对一个模型形状的优化结果。自上而下的优化方法与三维模型内部结构建模设计的方法思路一致，并已在多篇综述文章中详细介绍^[30,31]，因此本文对此类方法不再重复讨论，聚焦于对近年来的微结构设计工作中主要采用的自下而上方法进行讨论与分析。

2) 自下而上的单元方法：为了克服自上而下方法的优化复杂且效率低下的问题，达成能够在大范围设计空间内快速计算复杂内部结构及其性能的目的，如图6所示的自下而上的单元拼接方法为：

首先设计出能够填充局部空间的基本单元结构，再根据目标性能所对应的各类基本单元平铺填充整体模型。在这类结构设计工作中，研究人员通常对几何微结构进行专门的定义及分析，以此间接获得模型整体的性质。所以，自下而上的方法可以只进行局部的物理仿真和优化计算，因计算规模小从而可以快速求解。相较于自上而下的优化方法，应用自下而上的方法也存在着一系列难点。首先由于微结构的尺寸必须小于足以影响目标物理现象的尺度，故需要更高的制造精度。其次，如何设计满足丰富物理性能的微结构单元集合，建立结构与性能的可计算映射关系，以支持性能到结构的反向求解也是一个挑战。另外，微结构的边界周期性以及不同微结构之间的几何与性能连续性也需要考虑。

自下而上的单元方法包含两个步骤：首先设计微结构单元，再使用单元填充整个模型。第3节详细讨论了设计微结构单元的各类方法。在设计出微结构单元后，有两种方式填充模型，分别为平铺方法与合成方法，如图6所示。使用单一微结构单元平铺的方法易于实现，具有高度确定性并且易于计算整体模型性质，因此应用更为广泛。合成方法指根据一定的准则，使用边界连续的不同单元填充整体模型，使其在不同位置具有不同的物理属性，在第4节中会详细介绍。

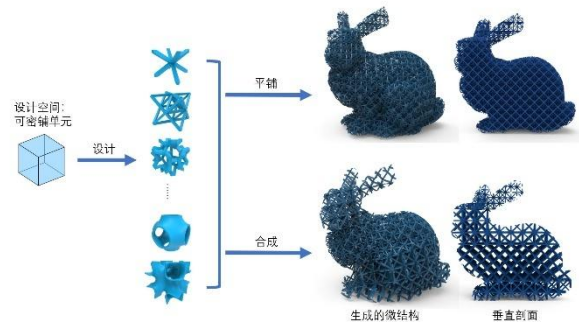


图6 自下而上的微结构设计流程：首先采取三维周期性可密铺单元作为设计空间，设计得到不同微结构单元并计算其对应的物理性质，再通过平铺或合成方式生成整体模型。平铺方法仅需要单一微结构；合成方法选择多种边界可以连续过渡的微结构，按照给定的分布方式填充整体模型

3 几何微结构的单元设计方法

为方便计算与应用，绝大部分微结构单元边界形状确定为大小统一的正六面体。由于空间内材料分布的可能情况随着分辨率增加而指数级上升，故

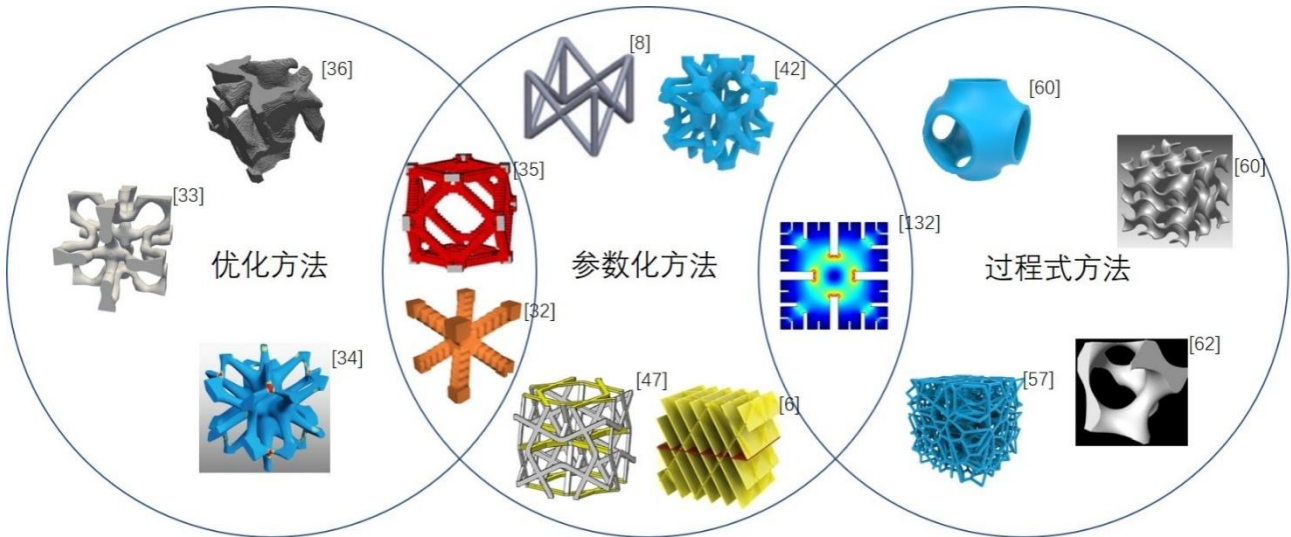


图7 几何微结构的单元设计方法分类

在正六面体空间内遍历全部结构是不可行的。所以，微结构的单元内形状设计是一个充满挑战性的问题。为了设计出合理的微结构，研究者采用一定的现存几何单元和先验知识，或采用特定的方程求解，在庞大的几何设计空间中求解符合性能要求的微结构。

各类微结构设计工作中，设计目标与微结构形状均存在着不小的差异，但不同的工作共享某些设计思路，对设计方法分类有助于研究者归纳并理解现有工作，选择各种物理性质目标及应用场景下最适合的微结构类型，并在今后的工作中借鉴或创新现存微结构设计，进一步丰富已有的微结构库。

本节以计算机辅助设计与图形学领域为主，同时跨学科地涵盖了材料学科、机械工程学科相关领域中以力学性质为目标的可进行单材料 3D 打印的微结构设计工作，并进行了如下分类：基于体素的优化方法，基于参数形元的参数化方法，以及基于函数表达的过程式方法。分类方法按照不同层次的设计参数进行划分，如图 7 所示。优化方法中的变量最为基础，将每个体素作为优化变量；参数化方法首先确定一系列基本的几何形状，并通过改变表达几何形状的参数生成不同的微结构；过程式方法使用函数表达来设计空间中的材料分布，并以函数中的参数调整微结构。从优化方法到过程式方法，随着可优化参数数量逐渐减少，单个参数所能控制的几何特征的抽象层级也在逐步提高。各种设计方法的特点见表 1。值得一提的是，这些分类是一种设计思路或理念上的分类，可以融合交叉使用，目前已有多个开创性的工作结合了不同分类下的微结构设计。结合 2.1 节中阐述的几何微结构设计要

求以及本节中即将详细讨论的内容，表 2 和表 3 分别列出了各种分类下现有微结构工作的具体几何约束及物理目标。

表 1 几何微结构单元设计方法的特点

| 设计方法 | 优化变量 | 参数数量 | 抽象层级 |
|-------|------|------|------|
| 优化方法 | 体素 | 最多 | 最低 |
| 参数化方法 | 形元 | 适中 | 适中 |
| 过程式方法 | 函数参数 | 最少 | 最高 |

3.1 优化方法

拓扑优化是一种对给定设计空间进行材料分布优化的设计方法。拓扑优化在求解中允许单元结构的拓扑发生变化，根据所需性能类型的区别，其最终结构具有较大的几何差异。拓扑优化方法通常直接以物理目标作为优化目标来求解特定的优化问题，几何约束作为优化中的约束项存在。求解此类问题时，挑战之一在于无法直接控制微结构的几何形状，研究人员需要思考如何将特定的几何约束与物理目标刻画为函数形式。同时，如何求解优化方程使得结构达成最优解，也是拓扑优化方法的难点。拓扑优化方法具有一定的瓶颈，基于梯度的优化计算结果为局部极小值，且有些问题只能求解数值梯度，导致计算代价较高，同时，如果找不到关于设计变量的目标函数，则无法使用优化方法。

通常拓扑优化求解微结构的方法与基于均质化的有限元方法结合，其目标函数为希望求取极值的物理性能，约束方程中含有该单元的周期性边界条件、载荷约束以及体积分数约束。不同的结构描述方式，优化变量也有所不同，如带惩罚项的变密度

(Solid Isotropic Material with Penalization, SIMP)方法中优化变量为设计空间中所有体素的密度值，水

表 2 代表性微结构工作满足的几何约束

| 结构分类 | 结构类型 | 有关工作 | 几何约束 | | | | |
|-------------------------------|----------------------------------|------------------------------|-----------------------------------|------------------------|-------|-----|---|
| | | | 空腔连通 | 光滑性 | 相对尺寸小 | 轻量化 | |
| 微结构单元 设计方法 (第 3 节) | 优化方法 (3.1) | Schumacher 等 ^[32] | √ | √ | √ | √ | |
| | | Wang 等 ^[33] | √ | √ | √ | × | |
| | | Panetta 等 ^[34] | √ | √ | √ | √ | |
| | | Xiao 等 ^[35] | √ | × | √ | √ | |
| | | Andreassen 等 ^[36] | √ | √ | √ | × | |
| | 参数化方法 (3.2) | 杆状单元 (3.2.1) | 面心、体心立方 ^[8] | √ | × | √ | √ |
| | | | Ling, Kaur 等 ^[37,38] | √ | × | √ | √ |
| | | | Gorguluarslan 等 ^[39] | √ | × | × | √ |
| | | | Choi, Yang 等 ^[40,41] | √ | × | √ | × |
| | | | Panetta 等 ^[42] | √ | × | × | × |
| | | | Gao 等 ^[43] | √ | × | √ | × |
| | | 手性单元 (3.2.2) | Prall, Grima 等 ^[44,45] | √ | √ | √ | × |
| | | | Ha, Lu 等 ^[46,47] | √ | × | √ | × |
| | | | Fu 等 ^[48] | √ | × | √ | × |
| | | 片状单元 (3.2.3) | TancogneDejean 等 ^[49] | × | × | √ | √ |
| | | | Bonatti, Wang 等 ^[6,50] | × | × | √ | √ |
| | | | Kuipers 等 ^[51] | √ | × | × | √ |
| | | | Overvelde 等 ^[52] | × | × | × | × |
| | | | Ion 等 ^[53-55] | √ | × | √ | × |
| | | 过程式方法 (3.3) | 显式函数 (3.3.1) | Tian 等 ^[56] | √ | √ | √ |
| | Martinez 等 ^[57,58] | | | √ | × | √ | × |
| | Martinez 等 ^[59] | | | × | × | √ | × |
| | 隐式函数 (3.3.2) | | Yoo ^[60,61] | √ | √ | √ | × |
| | | | Yan, Li 等 ^[4,62] | √ | √ | √ | √ |
| | | | 王等 ^[63] | √ | √ | × | √ |
| | | | Feng, Hu 等 ^[64,65] | √ | √ | √ | √ |
| | | | Yan 等 ^[66] | √ | √ | × | √ |
| Hu 等 ^[67,68] | | | √ | √ | × | √ | |
| 潘esar, Wu 等 ^[5,69] | | | √ | √ | √ | √ | |
| 微结构形状合成方法 (第 4 节) | Garner, Luo 等 ^[70,71] | × | × | √ | √ | | |
| | Zhu 等 ^[72] | × | × | √ | √ | | |
| | Liu 等 ^[73] | √ | × | √ | √ | | |

表 3 代表性微结构设计工作的物理性能表现与是否包含优化过程

| 结构分类 | 结构类型 | 有关工作 | 物理性能 | | | | 优化 | |
|--------------------------|-----------------------------------|------------------------------|------------------------------------|------------------------|------|------|----|---|
| | | | 高刚度 | 高弹性 | 负泊松比 | 各向同性 | | |
| 微结构单元 设计方法 (第 3 节) | 优化方法 (3.1) | Schumacher 等 ^[32] | × | √ | × | × | √ | |
| | | Wang 等 ^[33] | × | × | √ | × | √ | |
| | | Panetta 等 ^[34] | √ | × | × | × | √ | |
| | | Xiao 等 ^[35] | √ | × | × | × | √ | |
| | | Andreassen 等 ^[36] | × | × | √ | × | √ | |
| | 参数化方法 (3.2) | 杆状单元 (3.2.1) | 面心、体心立方 ^[8] | √ | × | × | × | × |
| | | | Ling, Kaur 等 ^[37, 38] | √ | × | × | × | × |
| | | | Gorguluarslan 等 ^[39] | √ | × | × | × | √ |
| | | | Choi, Yang 等 ^[40, 41] | × | × | √ | × | × |
| | | | Panetta 等 ^[42] | × | √ | × | √ | √ |
| | | | Gao 等 ^[43] | × | × | √ | × | √ |
| | | 手性单元 (3.2.2) | Prall, Grima 等 ^[44, 45] | × | × | √ | × | × |
| | | | Ha, Lu 等 ^[46, 47] | × | × | √ | × | × |
| | | | Fu 等 ^[48] | × | × | √ | × | √ |
| | | 片状单元 (3.2.3) | TancogneDejean 等 ^[49] | √ | × | × | √ | × |
| | | | Bonatti, Wang 等 ^[6, 50] | √ | × | × | √ | × |
| | | | Kuipers 等 ^[51] | √ | × | × | √ | √ |
| | | | Overvelde 等 ^[52] | × | √ | × | × | × |
| | | | Ion 等 ^[53-55] | × | √ | × | × | √ |
| | | 过程式方法 (3.3) | 显式函数 (3.3.1) | Tian 等 ^[56] | √ | × | × | √ |
| | Martinez 等 ^[57, 58] | | | × | √ | × | √ | √ |
| | Martinez 等 ^[59] | | | × | √ | × | √ | √ |
| | 隐式函数 (3.3.2) | | Yoo ^[60, 61] | √ | × | × | × | × |
| | | | Yan, Li 等 ^[4, 62] | √ | × | × | × | √ |
| | | | 王等 ^[63] | √ | × | × | × | × |
| | | | Feng, Hu 等 ^[64, 65] | √ | × | × | × | √ |
| | | | Yan 等 ^[66] | √ | × | × | × | √ |
| Hu 等 ^[67, 68] | | | √ | × | × | × | √ | |
| 微结构形状合成方法 (第 4 节) | Panesar, Wu 等 ^[5, 69] | | √ | × | × | × | √ | |
| | Garner, Luo 等 ^[70, 71] | | √ | × | × | × | √ | |
| | Zhu 等 ^[72] | | √ | × | × | × | √ | |
| | Liu 等 ^[73] | √ | × | × | × | × | | |

集方法中的优化变量为水平集函数的控制参数。基于体素的拓扑优化的数据表达方式更加直观,易于结合均质化技术,有大量的相关工作,因此本文介绍的方法均基于体素优化。一般地,优化问题被描述为:

$$\begin{cases} \min_{\rho} & J(\rho) \\ \text{s. t.} & Ku = F, \\ & g_i(\rho) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{cases} \quad \#(1)$$

其中, ρ 为优化变量, $J(\rho)$ 为目标函数, $Ku = F$ 为满足周期性边界条件下的刚度方程, $g_i(\rho)$ 为约束条件, 由于可同时存在多个条件, i 表示约束条件的编号。

Sigmund 等人^[74]将杆结构作为初始输入, 通过拓扑优化, 设计出特定力学性质的微结构。Xiao 等人^[35]进一步通过控制载荷区域进行拓扑优化, 生成了类似杆状结构的微结构并测量此三种结构的物理性质。图 8(d)展示了三种不同载荷约束所优化出的杆状结构。Schumacher 等人^[32]使用优化方法来设计图 8(e)中一系列具有所需性质的可密铺微结构, 支持在大范围内平滑地改变材料特性, 最终使用 3D 打印制造具有空间变化弹性的物体。Panetta 等人^[34]分析了微结构在最坏情况下的应力分布, 使用形状优化方法最小化微结构的应力集中, 结果如图 8(c)所示。Chen 等人^[75]基于有限元分析, 通过拓扑优化设计了高刚度微结构单元, 使其具有较好的各向同性。

考虑力学性质的拓扑优化工作中, 常见的最大化刚度目标并不是几何微结构设计的唯一标准。Andreassen 等人^[36]使用拓扑优化, 生成了具有极高弹性特性以及负泊松比的周期性微结构单元, 并保证了单元之间的连续性, 图 8(a)展示了其中一种结果。Wang 等人^[33]提出了一种在有限应变下设计具有恒定泊松比的三维拉胀单元的方法, 并通过拓扑优化方法获得了两组具有不同对称性的单元, 见图 8(b)。通过对形状优化的材料结构进行插值, 可以实现具有可编程泊松比的微结构。Chen 等人^[76]进一步计算了单一材料的微结构族及其力学性质图谱, 并从微结构族中识别出拓扑相似的结构, 进行骨架提取, 基于提取出的骨架使用优化方法对微结构族进行拓展, 并进行力学性质的探讨。

在本节中, 本类方法的优化变量是体素。为了突破基于梯度的拓扑优化方法的瓶颈, 一系列结合人工智能的优化设计方法被提出^[77-79]。一些工作通

过使用机器学习方法代替拓扑优化, 以获得特定物理目标下的最优结构设计思路^[80,81]。一系列工作给出了预测微结构物理性能的机器学习算法, 并据此逆向设计性能更好的微结构。逆向设计方法仍然是一种基于梯度的优化方法, 其中通过机器学习算法求解的梯度是解析的^[77,82,83]。一类工作使用随机生成的数据集, 通过生成式对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)批量生成微结构, 可以逼近刚度上限^[84,85]。Wang 和 Chen 等人^[86,87]使用变分自编码器(Variational Autoencoder, VAE)在超材料数据库中进行训练, 实现微结构之间的插值以及物理性能快速计算。

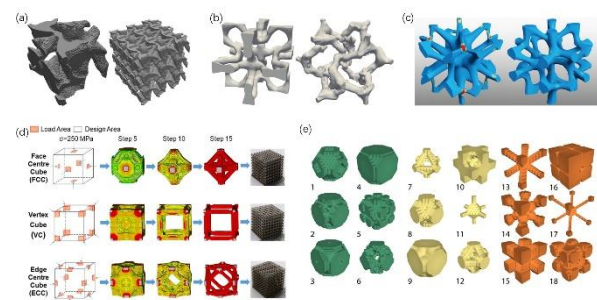


图 8 基于体素进行拓扑优化的微结构设计工作: (a)拓扑优化设计负泊松比单元^[36]; (b)两种负泊松比单元^[33]; (c)最坏情况载荷下优化前后的微结构^[34]; (d)拓扑优化设计杆状结构^[35]; (e)优化设计一系列可平滑连接微结构^[32]过拓扑优化设计了高刚度微结构单元, 使其具有较好的各向同性

3.2 参数化方法

参数化方法是指, 预先给定一系列较为基础的几何形状, 用一组参数刻画几何形状的特征, 最终将微结构使用参数化的几何元件组合而成的方法。相较于优化方法, 参数化方法直接给定了微结构的几何特征, 并且可以使用数量更少的变量刻画微结构。由于微结构设计空间十分庞大, 使用参数化方法设计微结构更加直观。参数化方法的计算模型大多是直接设计几何形状, 使得设计出的几何微结构天然满足一系列几何约束。此后, 通过改变参数生成微结构库, 并通过仿真计算来判断微结构是否满足物理目标。由于此类方法并不直接控制物理目标, 故设计出可以达成特定物理目标的参数化建模方法成为了此类问题的挑战。在设计时, 需要考虑参数空间是否足以达成多样的几何结构, 同时, 判断该类几何结构的能力是否覆盖目标物理性质, 需要对此类问题具有丰富的经验与直觉。参数化方法的瓶颈在于当前各个工作中使用的几何元件的形状种类是一定的, 导致结构可以达成的物理性质空

间受到了限制。

从各类工作选择的简单的几何形状进行分类,参数化方法可以分为三种:杆状单元,手性单元,以及片状单元。除了这三类存在较多的微结构单元设计工作,还存在基于其它几何形状的参数化设计方法。如 Lal 和 Sun^[88]使用球状空腔填充微结构, Kantaros 等人^[89]设计出三种具有球形空腔的参数化微结构单元,并对各种单元的物理性质进行仿真与实际测试。在较新的工作中, Efremov 等人^[90]定义了参数化的单元形状和每个格点的星形集,通过渐变的增长过程创造出一种新型的微结构,并验证了它的弹性性质。Zhao 等人^[91]介绍了一种多孔支架建模方式,通过控制六边形蜂窝状结构的孔径、孔隙互连程度等参数来影响力学性能,讨论了参数与结构的机械强度之间的关系。不同几何形状的参数化方法采用数量、语义均不相同的控制参数。下面对三种分类中的典型工作分别进行介绍。

3.2.1 杆状单元

杆状单元是参数化设计方法中最早使用和应用最为广泛的一种。其基本的设计方式为,确定杆结构和其连接节点的数量以及各自的分布位置,再确定杆结构的几何参数:包括圆柱形、棱柱等形状分类,以及杆结构的横截面尺寸。某些工作同样优化了连接节点的形状。控制杆状单元的参数包括杆的宽度、每个节点位置以及节点间的连接关系。当宽度参数变大时,杆状单元的实体率随着杆结构变粗而增大,当节点与连接关系的参数变化时杆状单元的拓扑结构发生改变。杆状单元定义清晰简明,且杆状单元的几何复杂程度并不高,部分由杆状单元组成的物体在 3D 打印技术普及之前就可以通过各种方式制造,因而具有较长的使用历史。Cheah 等人^[92,93]提供了一个由杆状结构组成的参数化微结构单元库,除正六面体单元形状外,还包含五面体、三棱柱等其它可密铺单元形状。Ahmadi 等人^[94]也在工作中设计了六种杆状微结构单元,并使用金属打印制造,给出了各类微结构的体积分数与各种力学性质之间的关系。

在对于杆状结构设计的分析中,经常用来分析模型整体表现出刚性还是弹性的几何评价指标之一是麦克斯韦数(Maxwell Number)^[95,96]。杆状结构的麦克斯韦数 M 满足

$$M = b - 3j + 6(2)$$

其中 b 为单元内杆结构数量, j 为单元内节点数量。当 $M > 0$ 或 $M = 0$ 时,结构为拉伸主导,整体表现出高

刚度;当 $M < 0$ 时结构为弯曲主导,表现出易于形变的柔性特质^[97],如图 9 所示。Zheng 等人^[23]介绍了两种不同的结构进行对比。其中图 9(A)所对应的结构名为 Octet-truss,单元由中心的八面体与每个面上延伸出来的四面体组成,麦克斯韦数 $M = 0$,属于拉伸主导结构。图 9(D)中所对应的结构是 Kelvin-Foam,由 36 个杆组成,杆组成六个小正方形和八个正六边形,麦克斯韦数 $M = -30$,故易于变形。

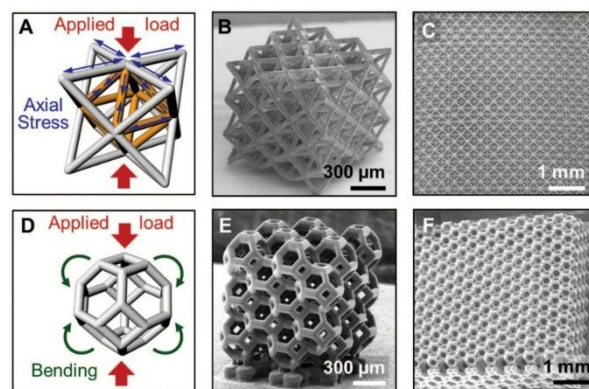


图 9 A 为 Octet-truss 结构, B 和 C 为该微结构在不同尺度下的展示。D 为 Kelvin-Foam 结构, E 与 F 为该微结构的较大规模应用展示^[23]

杆状单元在各类应用场景中最主要的用途是制造高刚度的轻质结构。其中,最基本的杆状单元结构设计方式参考了晶体结构的排布,将杆结构的连接节点排列于晶体结构中的原子位置,即放置于六面体的角点、面中点以及中心位置,并在此基础上进行杆的连接。这种方式分别构成体心立方(Body-centered Cubic, BCC)与面心立方单元(Face-centered Cubic, FCC),其中体心立方的节点位于正六面体的八个角点以及中心,面心立方单元的节点位于角点以及正六面体每个正方形面的中心。这两种简单方式所构造的结构均为拉伸主导,表现为具有一定的强度,如图 10(a)所示。Zok 等人^[98]在文章中阐述了 BCC 与 FCC 等杆状结构的定义。图 10(b)中的 Octet-truss 是一种广泛应用于轻量化设计的几何微结构。Deshpande 等人^[97]详细讨论了 Octet-truss 结构的物理性质,并使用麦克斯韦准则分析出其拉伸主导性质。Johnston 等人^[99]进一步地探索了 Octet-truss 的力学性质,并通过非线性有限元分析以及实际的机械测试,描述了该结构的受力以及扭转下的材料行为。Chen 等人^[37]研究了增材制造的 Octet-truss 结构在准静态、动态载荷下

的力学行为。Gorgularslan 等人^[39]在 Octet-truss 结构的基础上调整杆单元的连接,并对图 10(d)所示的新型单元进行非线性有限元仿真测试力学性能,并据此通过优化单元内不同杆的粗细调整单元性质。除这些杆状结构外,Kaur 等人^[38]探究了一种图 10(c)中的拉伸主导杆状单元,利用仿真和实验测试了多种物理性能。

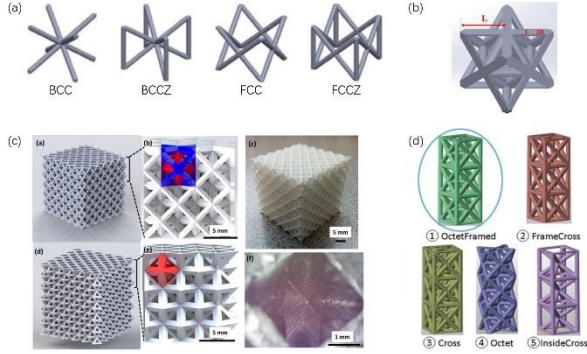


图 10 针对高刚度轻量化的杆状单元微结构工作:(a)BCC 为体心立方,BCCZ 在其基础上增加了沿竖直 Z 方向的杆结构,FCC 为面心立方,FCCZ 同样沿 Z 轴增加了杆结构^[8];(b)Octet-truss 单元^[37];(c)a, d 为设计出的不同微结构密铺;b, e 为整体结构中的单元;c, f 为打印模型^[38];(d)五种不同的拉伸主导杆状结构,圈内为文中所采用的结构^[39]

在高刚度杆状结构被广泛研究的同时,具有负麦克斯韦数的弯曲主导单元也得到了研究人员的关注。负麦克斯韦数表明微结构单元整体易于弯折,表现出弹性性质。Panetta 等人^[42]提供了一种全新的杆状单元设计思路,通过调整杆结构在四十八分之一一个正六面体空间中的分布情况,提出了一种参数化的杆状单元建模算法,如图 11 所示,能够生成多种不同拓扑的杆状结构,并对边界进行了优化,保证了不同拓扑微结构单元之间的连接性。该工作对连接节点进行了形状调节,并支持节点位置与杆件粗细的优化。由于该种设计思路下复杂的杆状结构为弯曲主导结构,如图 12(d)所示的微结构在保证各向同性的同时实现了目标弹性性能。

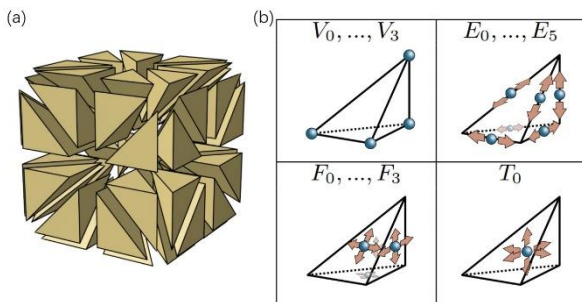


图 11 一种杆状单元结构建模方法:(a)将正六面体空间划

分为 48 个对称的四面体,(b)每个四面体上可选的节点位置和编号,杆结构连接其中已选的节点^[42]

在各种弹性杆状单元中,一部分特定形状的弯曲主导单元具有负泊松比特性。Lakes 的文章^[100]指出,材料所展现的负泊松比受微观结构中旋转自由度的控制,并提出了几种二维微结构,在宏观上表现出负泊松比性质。以图 9D 所示的 Kelvin-Foam 为基础,Choi 等人^[40]通过增加节点以及杆结构,使得图 12(a)的杆状单元易于弯折,并展现出负泊松比性质。Yang 等人^[41]以二维可折叠结构为基础,设计了如图 12(b)所示杆状单元的三维的负泊松比膨胀结构。Gao 等人^[43]提出了图 12(c)中的双 V 结构,由两组三维 V 型杆状单元组合而成。研究表明该微结构具有负泊松比特性,并测试了准静态载荷下的坍塌应力与杆夹角的变化关系。

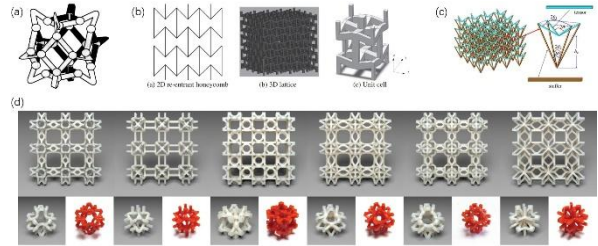


图 12 针对负泊松比及弹性性能的杆状单元微结构工作:(a)负泊松比单元示意图^[40];(b)一种二维负泊松比单元与其启发的三维单元^[41];(c)负泊松比双 V 结构^[43];(d)六种具有高弹性的杆状单元^[42]

3.2.2 手性单元

为通过设计微结构达到负泊松比的功能要求,一系列工作在杆状单元中增加了弯曲的部分,从而建立具有中心对称性质的手性结构。手性结构指无法与自身的镜像结构重合的单元结构。如图 13 所示,手性微结构单元中的杆排列趋势为沿某方向旋转,使得结构在受压时扭转收缩,从而表现出负泊松比性质。控制手性结构形状的参数与杆状单元的参数相似,均包含杆径、节点位置与连接关系。此外部分手性结构中还包括圆环结构,由参数控制位置与半径。

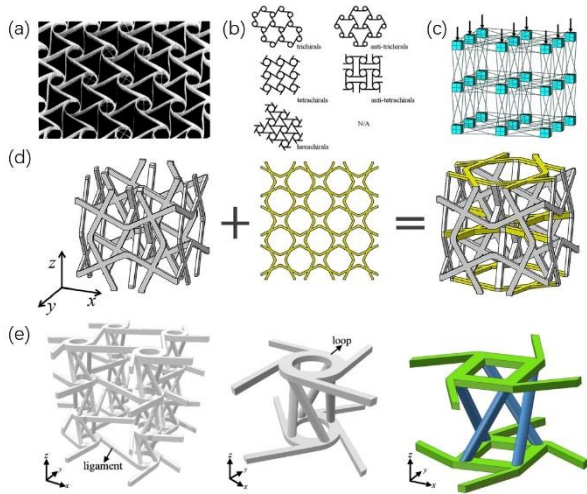


图 13 针对负泊松比性质的手性单元微结构：(a) 泊松比为 -1 的二维手性结构^[44]；(b) 平面手性结构单元：三阶手性，三阶反手性，四阶手性，四阶反手性及六阶手性^[45]；(c) 三维负泊松比单元^[46]；(d) 通过单元间的运算变换，提出的两种负泊松比单元^[47]；(e) 具有不同形状旋转中心的两种负泊松比结构^[48]

Prall 等人^[44]通过建模计算得出，如图 13(a)所示的二维手性结构的泊松比为-1。Grima 等人^[45]进一步分析了二维中图 13(b)所示各类手性结构，结果显示反手性结构能够导致负泊松比。Mizzi 等人^[101]研究了二维手性结构中无序的节点移动对整体负泊松比性质的影响。Rossiter 等人^[102]使用记忆材料制造二维手性结构，通过不同的刺激使材料改变形状，以达到具有可调刚度的拉胀性质。参考二维负泊松比结构的设计思路，研究人员设计出满足负泊松比性质的三维手性结构。Ha 等人^[46]提出图 13(c)中以立方体作为可旋转节点的三维手性结构，通过有限元分析发现调整杆结构相对于立方体的长度，可以调节泊松比的大小。Lu 等人^[47]通过有限元方法测试了图 13(d)中介绍的两种三维负泊松比手性结构的弹性性质，研究了参数变化对它们的性质影响，并与其它三维负泊松比结构进行了比较。Fu 等人^[48]发现通过改变三维负泊松比手性结构中每个旋转中心所连接的杆数量，可以得到其它负泊松比结构，同时，负泊松比的弹性性质与杆的弯曲有关，与旋转中心的形状无关，可以设计为任何形状。通过改变杆的倾斜角度，可以调节不同方向的泊松比，如图 13(d)所示。

3.2.3 片状单元

片状单元是另一种微结构设计形式，相较于杆状单元，片状单元得益于其几何形状，能够有更多

体积的材料承受应力。在特定实体体积比例范围内，相比杆状单元，片状单元表现出更高的刚度，并能够通过优化得到更好的各向同性，如图 14 所示。本节讲述的片状单元由固定厚度的平面片构成，参数为厚度以及各平面所在的位置。片状单元可分为闭孔和开孔两种，闭孔表示该三维结构内部含有不与外部连通的空腔，闭孔结构在使用某些增材制造方式如数字光处理（DLP）进行打印时，会有一定制造上的问题，如内部液体无法排出，因此应依据 3D 打印制造方法以及实际应用需求的不同，具体选择不同结构和性质的片状单元。

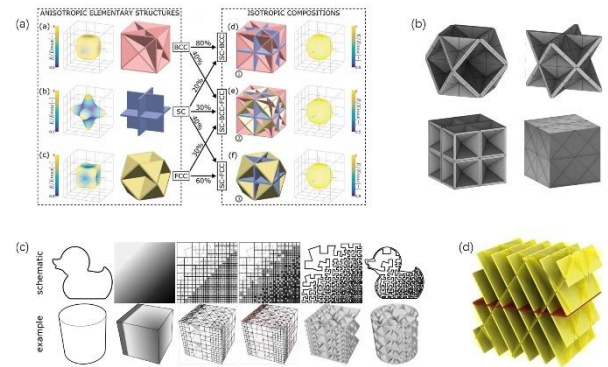


图 14 针对高刚度及各向同性物理目标的片状单元微结构：(a) 各向同性的片状结构的拼接组合结果，以及各种结构对应的各向同性程度比较^[49]；(b) 通过立方体内三角面片的不同方式组合成的四种闭孔片状结构^[50]；(c) 具有空间渐变密度的片状结构^[51]，保持模型外表面并保证了打印路径的连续；(d) 使用不同方向平板组成的各向同性的准周期片状结构^[6]

Bonatti 等人^[50]通过增删构成立方体的四面体中的面片，设计出图 14(b)中四种基本的片状单元并测试了它们的物理性质。Kuipers 等人^[51]考虑了 3D 打印时喷头移动的连续性，设计出支持空间渐变密度的片状结构，见图 14(c)。类似于杆状单元，片状单元也可以通过拼接组合的方式，在保持高刚度的同时达到各向同性。Tancogne-Dejean 等人^[49]使用多个方向的平板结构互相拼接，设计出一系列图 14(a)中的片状单元，具有高刚度和极佳各向同性，并与杆状单元进行对比，结果表明片状单元的刚度质量比高于最硬的杆状单元三倍。Wang 等人^[6]使用多组均匀排列的不同方向平板，拼接成为各向同性的准周期结构，图 14(d)展示了其中一种结构。

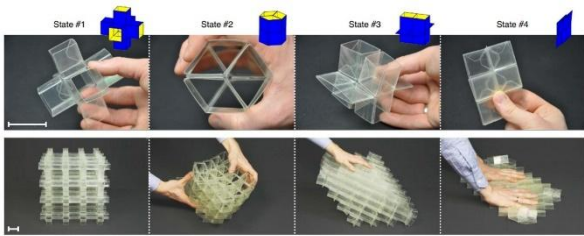


图 15 四种模块化设计的可折叠片状结构。上排为四种不同的片状结构单元展示,下排为各种结构的密铺以及在外力作用下的折叠变形效果^[52]

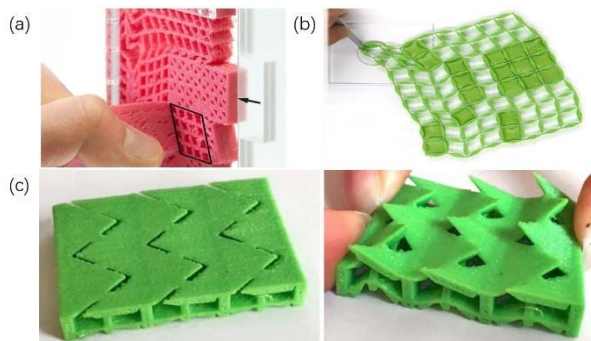


图 16 通过折叠执行机械功能的片状结构:(a)通过表达剪切的片状单元实现的可变性门把手^[53]; (b)通过对网格内部单元施加变形约束,可以使得结构按照用户设定的运动路径变形^[55]; (c)将片状结构作为表面的几何纹理,在图中两种模型变形情况下达成不同纹理间的过渡^[54]

除了针对高刚度及各向同性的设计目标,Overvelde 等人^[52]采取了折纸结构的模块化设计,提出了一种可调形状、体积和刚度的片状微结构。如图 15 所示,类似于 $M < 0$ 的杆状结构,该片状单元同样可以实现可折叠的柔性性能。Ion 等人^[53]认为超材料可以执行机械功能,并使用具有剪切变形能力的片状结构单元,将单元的运动转换为模型的宏观运动,如图 16(a)所示。此外,他们设计出通过四边形网格相互连接并施加变形约束的单元^[55],可以使得整体结构按照用户输入的目标运动路径变形,如图 16(b)所示。在这两个工作中,模型的运动方向限定在同一个平面中,模型在垂直于运动平面的方向由均匀厚度的片状结构组成。在另一个工作中, Ion 等人^[54]将片状结构应用于表面,设计出超材料纹理,在模型变形时可以达成不同几何纹理之间的转换,如图 16(c)所示。

不同于上述各类由平面组成的片状结构,更加复杂的一类光滑曲面结构在下节介绍。

3.3 过程式方法

上一节中的参数化方法中,单元本身是基于简单几何形状拼接,存在一定的局限性,用户难以通过简单的少量全局参数控制复杂的微结构,也难以将不同的参数化方法所生成的微结构通过微结构合成的方式应用于同一模型中,从而获得连续变化的力学性质。而在微结构单元设计中,通过定义域无限延伸的函数表达微结构,是一个重要且自然的更高抽象层次的方案,这类方法通称为过程式方法。通过定义设计空间内的函数,可以由少量的参数生成连续填充任意范围的微结构。过程式方法在处理几何约束与物理目标时思路与参数化方法相似,其设计的函数表达使得微结构满足几何约束,并通过函数变量使得微结构满足各种物理目标。在这种定义方式下,设计出合适的函数及调节方式,使微结构具有较大变形能力以及满足物理目标即为过程式方法的求解难点。这种基于函数表达的设计方法可以分为两类:一类是显式函数表达,即在解析式中,表达微结构的参数直接地由函数自变量决定;另一类是隐式函数表达,微结构形状隐含在覆盖设计空间的定义域中,需要通过提取等值面等技术将结构表现出来。过程式方法的瓶颈在于满足几何微结构设计要求的函数种类较少,此类微结构无法覆盖大范围的物理性质空间。

3.3.1 显式函数表达

显式函数表达方法使用人为定义的解析式直接表达微结构的几何。该方法显式地使用多个参数控制微结构内的形状,通常可以提供足够的几何复杂性。特别地,通过少数参数可生成含有一定随机性的微结构。

与具有严格周期性的结构相比,随机性微结构的优点为:在大尺寸的范围上,更容易达到各向同性。同时,使用随机性微结构的方法都天然支持不同参数结构的平滑连接,更适用于物理性质连续变化的微结构生成,如图 17(a)(c)所示。然而在使用随机性微结构填充模型整体时需要进行复杂的全局计算,这为大尺度下的几何表达带来挑战。同时在计算随机性微结构填充的整体结构的物理性能时,通常采用统计方法,通过多次生成同参数的不同结构,可以一定程度上预测其几何参数所对应的物理性质。由于无法使用针对周期性微结构的均质化计算方法,无法严格控制某种参数指标下的物理性能,不适用于要求高精度控制的场景。

在显式函数表达方法中,最常用的结构基于计

算几何领域中的 Voronoi 图表达。对于给定空间 S 中的点集 $\{s_i\}_{i=1}^n$ ，对 S 的 Voronoi 划分定义为

$$\Omega_i = \{ \mathbf{x} \in S \mid \|\mathbf{x} - s_i\| \leq \|\mathbf{x} - s_j\|, \forall j \neq i \} \quad (3)$$

其中 Ω_i 为划分得到的各 Voronoi 单元， $\|\cdot\|$ 为距离度量。通过修改点集、距离度量等定义方式，可以得到多种形式的 Voronoi 单元。

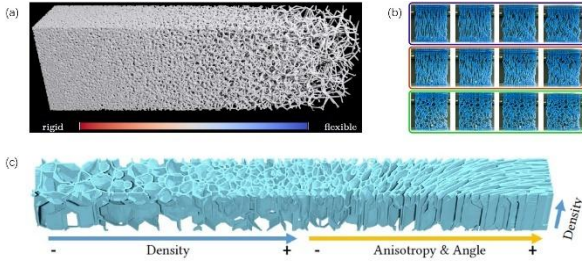


图 17 基于 Voronoi 结构的显式函数表达的微结构：(a) 由密度渐变的杆状 Voronoi 结构组成的模型^[57]；(b) 不同程度正交各向异性的 Voronoi 结构^[58]；(c) 密度与各向异性程度变化的类 Voronoi 结构^[59]

Martinez 等人^[57-59]采用 Voronoi 结构制造具有随机性的微结构，如图 17 所示。图 17(a)的工作应用 Voronoi 单胞间的边结构作为杆，建立了 Voronoi 单胞密度与结构整体弹性之间的映射关系，生成了具有可控的高弹性性质的模型。此外又基于 Voronoi 边结构对微结构表达物体的受力、密度、体积分数等进行了研究^[103-105]。图 17(b)的工作使用 Voronoi 中的杆结构，结合张量场生成具有正交各向异性的微结构，使得模型整体在不同方向表现出不同的弹性性质。图 17(c)的工作改变了使用杆结构的思路，使用片状结构表达 Voronoi 单胞，并对 Voronoi 的表达式进行修改，使得 Voronoi 单胞可以表达为凹多边形，并支持自由调节微结构的各向异性弹性。

3.3.2 隐式函数表达

隐式函数不能直接通过函数自变量表达微结构的几何，需要使用提取等值面等间接方式获取结构。隐式函数在空间中定义出一个函数场，并由各处的函数取值决定该位置是结构的实体或孔隙部分。为了表达实际结构，相关的研究工作通常将函数场进行体素化，使用均匀分布的采样点获得隐式函数中所蕴含结构的实际形状。单纯使用体素表达无法使得结构具有光滑且准确的表面，更加合适的三维表达方式是三角面片表达。Marching Cubes 算法^[106]基于体素表达的标量场，将其中取值为 0 的表面提取为三角面片数据。通过此算法，隐式函数表达的微结构可以转换为显式表示的三维几何数据结构。

具有周期性的各类代数曲面均可通过隐式函数表达复杂的几何结构，其中最广泛使用的是三周期极小曲面(Triply Periodic Minimal Surface, TPMS)，本节详细介绍基于极小曲面生成的隐式函数表达的微结构。极小曲面表示该曲面结构中平均曲率处处为零，此种性质多见于肥皂泡等自然结构，是限制曲面边界的情况下能够自然达到的最省能量结构。TPMS 沿 X,Y,Z 轴均具有周期性，可以视为基于正六面体单元的微结构，根据不同的方程形式，有多种结构类型如图 18。Wang^[107]在文章中给出了各种 TPMS 的数学表达并介绍它具有多种超越传统微结构的优点。

TPMS 的一般表示方法是用傅立叶级数来定义周期函数，

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \cos[2\pi\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \alpha(\mathbf{k})] = C \quad (4)$$

其中 $A(\mathbf{k})$ 是振幅因子， \mathbf{k} 是晶格矢量， $\alpha(\mathbf{k})$ 是相位偏移， C 为常数项，该定义方式在其它 TPMS 相关工作中出现^[60,108]。在表达 TPMS 时通常将式(4)中的高频项截断，得到近似表达，几种常用的 TPMS 表达式如下，分别对应于图 18 中的 P 曲面、G 曲面和 D 曲面：

$$\begin{cases} \phi_P(x, y, z) = \cos(x) + \cos(y) + \cos(z) = 0 \\ \phi_G(x, y, z) = \sin(x) \cos(y) + \sin(z) \cos(x) \\ \quad + \sin(y) \cos(z) = 0 \\ \phi_D(x, y, z) = \cos(x) \cos(y) \cos(z) \\ \quad - \sin(x) \sin(y) \sin(z) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

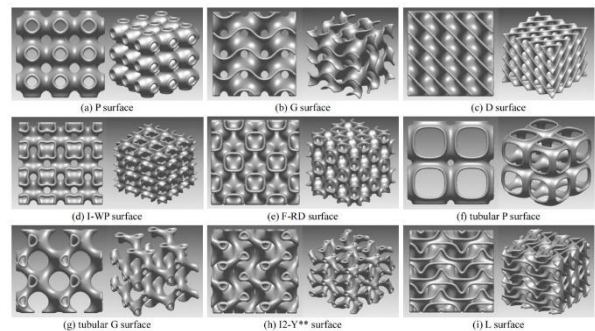


图 18 不同隐式函数表达的九种类型的 TPMS 结构^[60]

基于 TPMS 可生成出类杆单元和类片状单元，在本节中对这两种微结构进行介绍。一部分 TPMS 将空间划分为大小差异较大的区域，显示出类似弯曲杆的结构，如图 18(f)(g)(h)所示。人们通常不使用曲面表达此类结构，而是填充空间使其作为类杆单元表达，如图 19(a)(b)所示。其余 TPMS 单元的几何结构虽然表现形式类似于片状结构，但其拓扑结构却较为复杂，同时具有光滑性和开孔连通性质。

相较于人工设计的由平面构成的片状结构, TPMS 单元由于其光滑性, 显著地减少了应力集中, 具有更好的力学性质。Melchels 等人^[109]对体积分数可变的 TPMS 结构进行了物理仿真, 并对打印制造的结果进行力学测试。此外 TPMS 具有超高的渗透性, 在医学方面也有重要作用^[110]。

通过 Marching Cubes 算法将 TPMS 从距离场重建为网格曲面, 并对距离场进行偏移, 进而得到可制造的加厚实体结构。使用隐函数的参数, 可以实现对加厚实体结构的形状调整。Yoo 将 TPMS 结构在三维标量场中表达, 并对给定的输入模型计算距离场, 在标量场中完成外表面与 TPMS 的布尔运算操作^[61]。Yoo 还提出了 TPMS 实体结构的应用方案, 对模型进行六面体划分, 使用了有限元方法中对形状函数进行坐标映射的方法, 快速将极小曲面单元映射到任意六面体单元^[60]。Yan 等人^[62]利用图 19(a) 中所示的 Gyroid 类型的 TPMS 结构曲面特征, 设置其旋转方向, 实现免支撑打印的晶格结构, 减少了材料耗费和打印时间。Li 等人^[4]分析 Gyroid 型 TPMS 微结构不同相对密度下力学性质, 并将其用于结构优化。图 19(b) 中展示了不同参数下的多种该类型微结构。王等人^[63]结合 TPMS 和分形几何理论, 提出一种松质骨微观结构的建模方法。图 19(c) 显示了该工作的结构造型。雷等人^[111]提出一种参数驱动的 TPMS 类型多孔结构建模思路, 并进行增材制造。

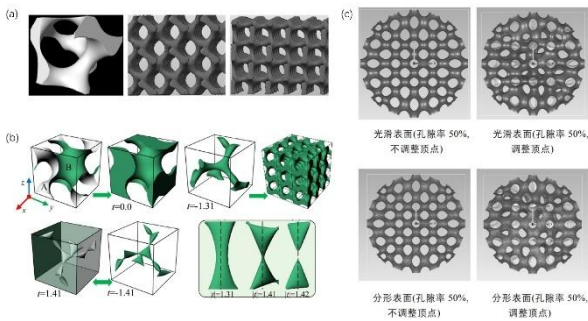


图 19 基于 TPMS 方程的隐式函数表达的微结构工作: (a) 完全填充的 Gyroid 类型单元^[62]; (b) 不同参数控制的完全填充 Gyroid 类型单元^[4]; (c) 变形及应用分形前后的 P 类型 TPMS 结构^[63]

对于不同类型的极小曲面单元的连接问题, Maskery 等人^[112]对不同类型的单元进行有限元仿真, 探讨了其力学性质, 并提出不同类型结构之间混合连接方案, 通过混合多种结构类型, 实现目标材料性质。为了扩展 TPMS 的应用场景, 达成微结构的合成, 通过引入 Sigmoid 等插值函数的方式^[113,114], 几个工作分别设计了不同 TPMS 单元之间

的光滑过渡方法。在基于参数曲面的方法中, Feng 等人^[64]基于 T 样条进行 TPMS 设计, 最终获得一种非均质多孔支架结构, 并允许不同种类 TPMS 以及不同孔隙率结构之间进行平滑过渡。Hu 等人^[65]通过参数域构建 TPMS 多孔结构, 再将结构映射到三变量 B 样条以构建异质多孔结构, 并保证结构的完整性及光滑连续性。Wang 等人通过深度学习方法生成了多种 TPMS 组合的隐式函数的不同参数, 并获得该类微结构与物理性质之间的关系^[115]。

上述工作建立了不同参数表达下极小曲面的微结构单元, 在另外的工作中, 通过对标准的 TPMS 函数中的参数进行修改, 达到各向异性性质。Yan 等人^[66]使用 SchwarzP-Surface 类型 TPMS 结构对模型内部支撑结构进行了优化, 并通过材料注射实现了模型的结构加强, 充分发挥了 TPMS 结构高渗透率、高强度、免支撑的特点, 结果如图 20(a) 所示。图 20(b) 和 (c) 中, Hu 等人的工作中^[67,68], 利用了 TPMS 曲面的隐函数表达的特点, 可直接对 TPMS 曲面所形成的实体进行解析式的力学计算, 能够进行快速高效的拓扑和几何优化, 实现了模型内部结构的轻量化设计。值得一提的是, 这一类的变形操作会使 TPMS 改变原有的平均曲率, 而具体这种极小曲面的性质在 TPMS 结构的应用场景中能够发挥怎样的效用值得进一步的探索。

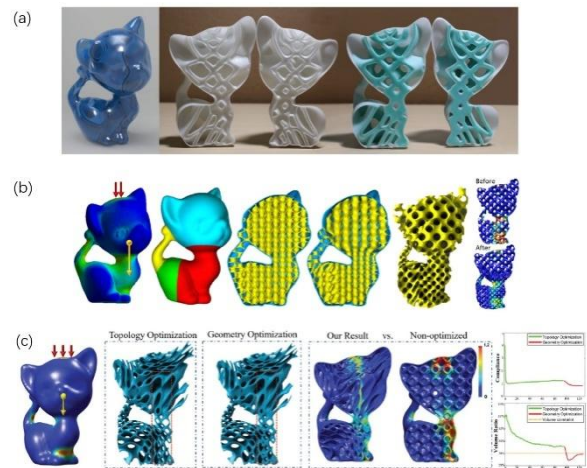


图 20 进行力学优化的变周期 TPMS 微结构: (a) 注射填充 3D 打印 TPMS 结构的双材料结构^[66]; (b) 不同密度 TPMS 结构分布下的力学优化结果^[67]; (c) 基于 TPMS 结构变形的力学优化结果^[68]

除了 TPMS, 还有其它的结构可以用隐式函数表示。对于生成具有一定随机性的微结构工作, Tian 等人^[56]定义了一种支持各向异性孔洞分布以及形状调节的微结构, 并支持通过定义在全局中的复合

高斯函数参数直接控制微结构的几何变化，生成保证空腔连通的高刚度轻量化结构。该工作将每一个孔洞定义为各向异性的高斯核函数，将函数值全部相加作为表达微结构的隐式函数。此种方法将非周期性微结构与全局的隐式函数表达方法结合，与现有结构相比，提供了一种直接表达光滑连通孔洞的类骨质多孔仿生结构的方法，同时提供了轻量化和可控各向异性等多种性质。图 21 为该工作中生成的微结构单元，分别展示了孔洞分布、空腔结构（绿色）、实体部分（蓝色）以及打印结果。

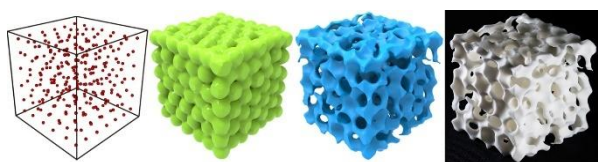


图 21 一种基于高斯核函数的各向异性多孔结构单元^[56]

本节介绍了三类几何微结构的设计方法并分析了不同方法的特点。针对同一物理目标，基于不同设计方法的结构并不相同。不同设计方法获得的微结构的杨氏模量或泊松比等物理性质的可达范围并不相同，同时，在工业、医疗等真实的微结构应用场景中要考虑的性质通常多于一种，故在评价设计方法的有效性时，需要综合考虑各类微结构的多种物理性质是否在目标范围内，并经过仿真与大量的物理测试。Liu 等人^[116]提出了微结构力学性质画像的概念，建立了基于均质化理论的微结构力学性能分析器，将常用的微结构力学性质进行可视化，对比了多种微结构之间的力学性能差异，为不同场景应用微结构提供了力学性能参考。

4 几何微结构的形状合成方法

上一章节综述了各种针对不同目标，以不同的参数选取方法设计几何微结构单元的工作。在几何微结构设计完成后，大多数工作通过密铺组成整体模型，并采用均质化方法计算整体的等效物理性质。同时，如 2.2 节所述，另一类工作侧重于在给定模型中同时使用不同微结构，改变微结构的分布方式从而使得整体模型在不同区域显示出不同特性。为了实现不同微结构之间的连接，可合成的微结构单元需要具有连续的边界。表 1 和表 2 同样含有各种合成设计方法工作中的几何约束及物理目标。

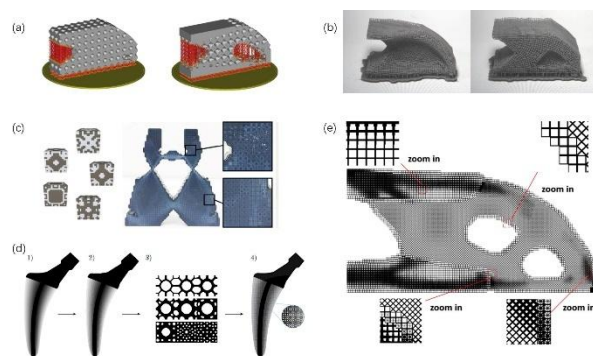


图 22 几何微结构的几种合成设计方法：(a) 功能梯度微结构结合拓扑优化^[69]；(b) 杆状微结构符合设计空间边界的拓扑优化打印结果^[5]；(c) 双尺度拓扑优化结构^[72]；(d) 保证邻接的不同微结构连续变化的拓扑优化结果^[70]；(e) 设计不同微结构连接界面的拓扑优化结果^[71]

在目前的工作中，指导不同微结构合成的方式大多基于拓扑优化方法，还可以由用户指定的功能来调节结构的分布情况。Plocher 等人^[117]对比了使用传统拓扑优化和使用微结构设计得到的结构。在 3.1 节介绍的拓扑优化方法中，将空间中材料的物理性质视为可以连续变化的，并以此来优化每个位置的材料密度。在传统的拓扑优化中，材料密度最终趋近于 1 或 0 以表示材料的有无。使用微结构合成的方式，可以使得每个位置通过微结构表现出材料密度处于 0 到 1 之间的物理性质。为达到这一目标，Li 等人^[118]提出了一种利用具有功能梯度的微结构的分层拓扑优化方法。Panesar 等人^[69]将体积分数连续变化的功能梯度单元结构与拓扑优化结合，表明在优化刚度的目标下，该策略十分理想，该结构见图 22(a)。Wu 等人^[5]所使用的拓扑优化方法结合一种符合主应力方向和形状边界的杆状微结构，在特定外部载荷下优化刚度，见图 22(b)。Zhu 等人^[72]生成了大量不同的微结构覆盖物理性质的设计空间，并利用不同性质的微结构填充几何模型完成大范围的拓扑优化目标，以达到图 22(c)所展示的两层级结构设计。Garner 等人^[70]通过对临近单元的组合作进行拓扑优化，保证不同拓扑微结构之间材料的连接性和物理性质的连续性，如图 22(d)。Li 等人^[119]使用 TPMS 作为基本单元，通过基于均质化方法的力学仿真调节 TPMS 的参数，以结合拓扑优化实现复合微结构的合成。Wang 等人^[120]使用一种参数化的杆状微结构单元用于合成，通过参数调节带边框的体心立方单元中杆结构的半径，以满足宏观尺度的拓扑优化所需要的单元设计空间。文章提出了一个多尺度并行优化框架，共同优化宏观尺度上模型

各位置的局部体积分数, 以及微结构的参数。Luo 等人^[71]提出了一种自连接材料插值技术来处理基于多个相互连接的微结构的拓扑优化。通过这种插值, 可以分别定义不同微结构之间的界面中的材料分布, 可以设计连接界面以确保良好的连通性, 如图 22(e)。Sanders 等人^[121]将连续变化的微结构单元应用在拓扑优化的模型中, 并将直接将微结构嵌入 3D 打印切片过程。关于此类研究内容, Liu 等人^[122]在综述中讨论了多尺度微结构的几何建模及优化方法, 还对适用于多尺度微结构的仿真方法进行了综述, 并总结了各类方法的优缺点。

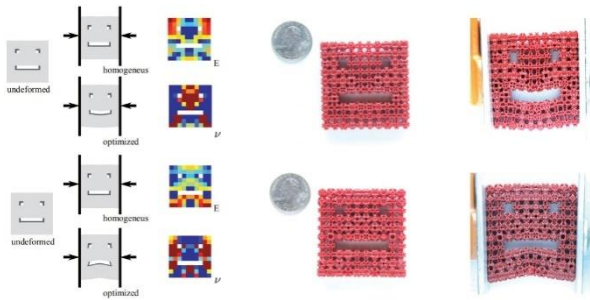


图 23 给定物理性质分布的微结构合成工作^[42], 可以通过调整微结构分布改变受压时的变形情况

除拓扑优化方法的微结构合成外, 可以通过指定材料性质分布的方式以计算出微结构的分布, 生成功能梯度结构或满足用户变形需求的结构。Onal 等人^[123]通过增材制造生产了功能梯度结构, 通过改变体心立方结构的杆单元尺寸控制孔径以及孔隙率, 并对垂直方向参数连续变化的结构进行力学性能测试, 发现功能梯度结构相较于均匀单元密铺, 改善了在大负载下突然出现结构坍塌的情况。对于非周期性的微结构, Wang 等人^[124]以整体结构的高刚度轻量化为设计目标, 给出了一种满足相邻微结构间功能渐变的设计框架, 并通过比较说明可达到空间中物理性质的连续变化。与拓扑优化的微结构合成相比, 在方法上, 功能梯度结构更加侧重于设计参数连续变化的微结构, 以预制某类微结构合成与物理性质的关系, 而拓扑优化的微结构合成更加关注达到特定模型的物理性质优化。Liu 等人^[73]提出了使用微结构进行多层次结构设计的框架, 该框架通过递归地组合微结构, 能够实现微观结构复杂的多层级结构。如图 23 所示, 在 Panetta 等人的工作^[42]中, 用户可以指定模型在左右两端受压时的不同变形情况, 将卡通形状挤压成不同的表情, 使得同一形状具有不同的微结构分布。

微结构形状合成方法中也出现了结合人工智能

方法的工作。一系列工作使用拓扑优化结构作为训练数据, 通过深度学习加速或替代传统的拓扑优化过程, 获得材料分布从而可以指导微结构形状合成^[125-129]。Gu 等人^[130]提出了一种基于机器学习的分层级的微结构设计方法, 生成了高机械性能的微结构分布模式, 从而产生更坚韧的材料。Wilt 等人^[131]使用模拟数据训练神经网络, 以预测并指导具有负泊松比特性的功能梯度微结构。

众多的研究考虑了在物体的设计空间中排布不同的微结构单元, 以使得物体的不同区域具有物理性质差异。在这样的工作中, 如何设计并评估微结构的邻接方案, 将不同的已知性能的大量微结构结合从而充分利用各种结构的特点, 既是几何设计方面的挑战, 同时也是微结构领域研究方向的未来展望之一。

5 总结与展望

5.1 总结

随着 3D 打印技术的快速发展, 成型材料不断扩充, 同时打印精度也在逐步提高。以 3D 打印为基础, 使用微结构增强物体力学性能的研究工作渐成规模。作为跨领域的交叉研究方向, 微结构的物理仿真、几何表达与优化方面的挑战需要计算机辅助设计、计算机辅助工程与图形学相关的知识背景。本文以微结构的单元结构设计为核心, 介绍了微结构在力学方面受到研究关注的物理性质, 如高强度、高弹性、负泊松比等, 并将当前工作中所存在的几何结构设计方法分为了优化方法、参数化方法、过程式方法三大类, 对现有工作进行了跨学科范围的综述。

5.2 研究展望

通过关注几何结构与物理性能, 并对现存的几何设计方法加以创新, 计算机图形学研究势必能给微结构领域带来更加创新性的突破。在目前微结构研究工作中, 还存在着一系列亟待解决的开放性问题等待探索。

5.2.1 混合设计方法探索

虽然已经存在大量的几何单元结构, 但由于三维正六面体单元内的设计空间十分庞大, 仍然有海量的潜在几何结构并未为人所知。如图 7 所示, 在相邻的设计方法分类之间存在一定的混合设计方法。优化方法与参数化方法相结合, 可以通过以所

有体素为参数的优化问题,求解出如杆状等可以通过参数控制的几何形状;参数化与过程式方法相结合设计出特定的微结构,使得组成其结构的基本几何形状可以通过参数控制,同时整体结构又可以使用函数进行全局性的表达,如使用 L-System 生成可分形结构等^[132]。在微结构设计工作中,混合不同层级的设计方法的微结构是否具有值得探索的性质,此类问题在未来的相关领域研究中必然会得到进一步的解答。

5.2.2 仿生结构探索

如引言所述,自然界中广泛存在多种几何微结构,如骨骼、蜂巢,及表达负泊松比的动物皮肤等等。研究人员发现并探索了自然界中表现出特殊物理性能的结构,并进行仿生设计,制造出了物理性能优异的仿生结构。例如,人们发现了荷叶的超疏水性和自清洁性,研究了荷叶的表面微结构,受此启发,开展了一系列相关研究。此外,研究人员也对鲨鱼皮进行了相关研究,发现了其超低的流体阻力,并基于此设计了游泳衣和抗污表面^[133]。在各自的应用场景下,结构各异的物体有不同的功能性要求,这些要求大都表现为多种物理性能的结合。各个仿生结构工作中的性能验证方法说明,优秀的仿生结构应该在特定功能上优于现有的人造结构,而评价仿生结构的量化指标是完成各种目标功能所对应的物理性质。由于生物中特殊的拓扑结构是长久自然选择的结果,它反映了自然演化的趋势:如轻量化性质^[134]等出色的物理特性,所以可为结构设计过程提供宝贵的灵感来源,类似鲨鱼皮泳衣、蜂窝状多孔结构等仿生结构的优势对比也说明,单纯基于人工设计或单目标优化的微结构性能往往在相同的领域无法完全胜出自然存在的高效能结构。Yang 等人^[135]的综述表明,3D 打印制造仿生结构的发展能够证明受自然启发的结构具有潜力。如何从仿生出发进行微结构设计,如何表达仿生几何结构,如何评估自然结构并分析物理性质,以及如何进一步优化仿生结构等,都仍然是开放性问题,值得研究者的进一步探索。

仿生结构的表达如图 1 所示,自然的微结构均具有可被直观识别的结构图形式样。然而这些式样并没有完全被合适的参数化方式表达出来。现有的参数化方法可以构建类似于自然微结构的几何表达,但并不能完全还原。而同时,对每个体素进行优化求解的优化方法在理论上可以表达自然微结构,但目前找到每种自然微结构所对应的优化方程

还并未实现。据此分析,仿生结构的设计应该在第 5.2.1 节中介绍的优化方法与参数化方法混合的设计方法中,而第 5.2.3 节中的机器学习设计方法也可能成为生成仿生结构的一种解决方案。

仿生结构的分析在本文重点关注的几何结构方面,当前各种工作所面临的挑战之一,是如何处理使用微结构技术制造的物体所具有的较高几何复杂性。一方面,几何复杂性体现在结构的完整表达。微结构单元的实际尺寸与完整的物体尺寸相差极大,模型整体具有极其复杂精细的内部结构,在技术发展的过程中,3D 打印制造精度愈来愈高,会产生更小尺寸的微结构单元,造成目标物体与微结构单元的体积比愈来愈大,用合适的方式精确地表达几何结构是一个值得考虑的问题。同时几何复杂性也影响了物理仿真方式。目前对于使用微结构技术下的结构进行物理仿真,大多数工作先验地使用均质化的有限元方法,通过单元结构计算出等效物理性质。而在逐渐增多的工作中,当对具有性能差异的不同结构进行合成时,均质化技术的有效性值得进一步的验证。因此,对高几何复杂性的结构整体进行物理仿真也成为了计算方面的挑战之一。

5.2.3 人工智能方法探索

近些年来微结构与机器学习、深度学习等人工智能技术的结合逐渐成为领域研究的热点。相比于传统的微结构设计,借助人工智能技术能够大大提高微结构设计效率。在微结构设计与人工智能技术结合较为紧密的两个领域是微结构性质预测和微结构生成。研究者通过使用深度学习等方法替代传统均质化方法来预测微结构性质^[136-139],从而取得比传统方法高几百倍到上千倍的速度。但基于学习方法的预测一般只针对某一类或某几类微结构,缺乏对全体微结构的泛化能力,甚至可能存在过拟合情况。对于数据集中不存在的微结构性质预测误差较大,在这一点上基于学习方法的微结构性质预测还有较大的进步空间。另一方面,研究者也直接将人工智能技术用于微结构的生成。其中一种路径是使用机器学习、深度学习等方法学习提取已有的符合目标要求的微结构特征,然后在更大的搜索空间内搜索符合此类特征的新型微结构^[80-82];另一种路径是直接根据现有微结构或者微结构设计技术生成新的微结构,比如使用生成对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)和微结构拓扑优化直接预测微结构^[128,140,141],或者根据现有的微结构使用深度学习网络生成具有特定性质的微

结构, 比如仿生结构^[130], 手性结构^[142]和拉胀结构(负泊松比)^[143]等。上述研究都充分说明微结构设计和人工智能算法结合有广阔的前景。

5.2.4 泛化的力学微结构探索

本文综述了优化力学性质的单材料 3D 打印的微结构工作, 在本文所详细探讨的研究范围之外, 针对力学性质的其它技术和目标的微结构设计同样是重要的未来研究方向。

多材料探索在多材料共存的 3D 打印的制造方式中, 可打印材料的种类以及多材料打印的精度在逐步提升, 使用这种制造方式生产具有更加多样化物理性质的微结构具有了可能性。同时, 一些特殊的物理性质只能由不同性质的多材料组合后的微结构产生, 这一点使得多材料制造微结构具有重大意义。诸如负热膨胀性质的微结构, 不同于传统材料热胀冷缩的性质, 能够在温度升高时整体体积减小, 在温差巨大及高温的生产环境中, 负热膨胀及相同原理达到的零热膨胀是极其重要的。

性能耦合探索另外一个值得思考的研究内容是设计满足多种目标性能的微结构。目前众多的负泊松比的结构大多具有较高孔隙率, 从而导致其刚度和强度性能降低, 限制了微结构的具体应用场景, 并不能完全发挥出负泊松比材料的能量吸收等优秀特性。另一方面, 在其它目标的微结构设计中, 力学性能反映了最基本的结构承载能力和稳定性, 是满足实际应用需求时不可忽视的优化目标。于是, 诸如同时考虑力学性能及电磁、热学或光学等其它性质的多功能微结构设计成为潜在的发展方向。在面向多物理目标的结构优化中, 有些梯度的求解非常困难, Guirguis 等人^[144]提出可以将结构优化作为黑盒问题来求解, 使用全局搜索算法来寻找最优结构, 该方法可应用于多功能结构的设计与优化。

综上所述, 几何微结构设计是一个具有巨大应用前景以及多种技术挑战的前沿交叉学科方向, 相信在更多计算机辅助设计与图形学相关研究人员的参与探索下, 有望解决更多的科学问题并设计出更多新颖且实用的全新结构。

参 考 文 献

[1] GIBSON L, ASHBY M. *Cellular solids: Structure and properties*. Cambridge Solid State Science Series. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2001.

[2] Materialise. <https://www.materialise.com/>.

[3] WU Chen-Ming, DAI Cheng-Kai, WANG Charlie CL, LIU Yong-Jin. Recent Progress on Multi-DOF 3DPrinting: A Survey. *Chinese Journal of Computers*, 2019, 42(9):1918-1938. (in Chinese)
(吴陈铭, 戴澄恺, 王昌凌, 刘永进. 多自由度 3D 打印技术研究进展综述. *计算机学报*, 2019, 42(9):1918-1938.)

[4] LI D, LIAO W, DAI N, et al. Optimal design and modeling of gyroidbasedfunctionally graded cellular structures for additive manufacturing. *Computer-Aided Design*, 2018, 104:87-99.

[5] WU J, WANG W, GAO X. Design and optimization of conforminglattice structures. *IEEE Transactions on Visualization and ComputerGraphics*, 2021, 27(1):43-56.

[6] WANG Y, SIGMUND O. Quasiperiodic mechanical metamaterialswith extreme isotropic stiffness. *Extreme Mechanics Letters*, 2020, 34:100596.

[7] Li, S. Boundary Conditions for Unit Cells from Periodic Microstructures and Their Implications. *Composites Science and Technology*, 2008, 68(9):1962-1974.

[8] NAZIR A, ABATE K M, KUMAR A, et al. A state-of-the-art reviewon types, design, optimization, and additive manufacturing of cellularstructures. *The International Journal of Advanced ManufacturingTechnology*, 2019, 104(9-12):3489-3510.

[9] VANDER VOORT G F, LAMPMAN S R, SANDERS B R, et al. *ASM handbook. Metallography and microstructures*, 2004, 9:44073-0002.

[10] ARABNEJAD S, PASINI D. Mechanical properties of lattice materialsvia asymptotic homogenization and comparison with alternativehomogenization methods. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2013, 77:249-262.

[11] DONG G, TANG Y, ZHAO Y F. A 149 line homogenization codefor three-dimensional cellular materials written in matlab. *Journal ofEngineering Materials and Technology*, 2019, 141(1): 011005.

[12] SMITH D R, PADILLA W J, VIER D C, et al. Composite mediumwith simultaneously negative permeability and permittivity. *PhysicalReview Letters*, 2000, 84(18):4184-4187.

[13] HU C, LI X, FENG Q, et al. Introducing dipole-like resonance intomagnetic resonance to realize simultaneous drop in transmission andreflection at terahertz frequency. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108(5):053103.

[14] VESELAGO V G. THE ELECTRODYNAMICS OF SUBSTANCESWITH SIMULTANEOUSLY NEGATIVE VALUES OF ϵ AND μ . *Soviet Physics Uspekhi*, 1968, 10(4):509-514.

[15] AL-KETAN O, ROWSHAN R, AL-RUB R K A. Topologymechanicalproperty relationship of 3d printed strut, skeletal, and sheetbased periodic metallic cellular materials. *Additive Manufacturing*, 2018, 19:167-183.

[16] LIANG Qingxuan, YANG Zhen, HE Jin, JIANG Zijie, CHEN Tianning, LI Dichen. Research Progress of Additive Manufacturing Technology and Its Applicationsfor Metamaterial Structure. *Aeronautical Manufacturing Technology*, 2019, 62(1):30-37. (in Chinese)
(梁庆宣, 杨贞, 何锦, 江子杰, 陈天宁, 李涤尘. 超材料结构增材

- 制造技术及其应用研究进展. 航空制造技术, 2019,62(1):30-37.)
- [17] YU Xianglong, ZHOU Ji. Mechanical Metamaterials:Architected Materials and Unexplored Properties. Materials China,2019, 38(01):14-21.(in Chinese)
(于相龙, 周济. 力学超材料的构筑及其超常新功能. 中国材料进展, 2019, 38(01):14-21.)
- [18] SCHAEGLER T A, JACOBSEN A J, TORRENTS A, et al. Ultralightmetallic microlattices. Science, 2011, 334(6058):962-965.
- [19] Kls martin group. <https://www.klsmartin.com/en/products/imp-lants-cmf/>.
- [20] GATT R, MIZZI L, AZZOPARDI J I, et al. Hierarchical auxetic mechanicalmetamaterials. Scientific Reports, 2015, 5(1):8395.
- [21] XIN R, JIANHU S, PHUONG T, et al. Auxetic nail: Design and experimentalstudy. Composite Structures, 2017, 184(JAN.):288-298.
- [22] LIU Yuan-li, SU Ji-long, WU Jin-dong. Progress inelastic property and impact resistance of honeycombstructure mechanical metamaterial. Journal of Materials Engineering, 2019, 47(8):49-58.(in Chinese)
(刘远力, 苏继龙, 吴金东. 蜂窝结构力学超材料弹性及抗冲击性能的研究进展. 材料工程, 2019, 47(8):49-58.)
- [23] ZHENG X, LEE H, WEISGRABER T H, et al. Ultralight, ultrastiff mechanical metamaterials. Science, 2014, 344(6190):1373-1377.
- [24] YU Jingjun,XIE Yan,PEI Xu. State-of-art of Metamaterials with Negative Poisson's Ratio. Journal of Mechanical Engineering,2018,0(13):1-14.(in Chinese)
(于靖军, 谢岩, 裴旭. 负泊松比超材料研究进展. 机械工程学报, 2018, 0(13):1-14.)
- [25] Ren Xin, Zhang Xiangyu, XieYimin. ResearchProgress in Auxetic Materials and Structures. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics,2019, 51(3):656-689. (in Chinese)
(任鑫, 谢亿民, 张相玉. 负泊松比材料和结构的研究进展. 力学学报, 2019, 51(3):656-689.)
- [26] LOVE A E H. A treatise on the mathematical theory of elasticity.Cambridge,UK: Cambridge university press, 2013.
- [27] BHULLAR S, AHMED F, KO J, et al. Design and fabrication of stent with negative poisson's ratio. Waset Org, 2014(2):213-219.
- [28] MA Z D, LIU Y, LIU X, et al. Ultralightweightrunflat tires based uponnegative poisson ratio (npr) auxetic structures: US8544515B2. 2013.
- [29] LU L, SHARF A, ZHAO H, et al. Build-to-last. ACM Transactions on Graphics, 2014, 33(4):1-10.
- [30] LIU Li-Gang, XU Wen-Peng, WANG Wei-Ming,YANG Zhou-Wang, LIU Xiu-Ping. Survey on Geometric Computing in 3D Printing. Chinese Journal ofComputers, 2015, 38(6):1243-1267. (in Chinese)
(刘利刚, 徐文鹏, 王伟明, 杨周旺, 刘秀平. 3D 打印中的几何计算研究进展. 计算机学报, 2015, 38(6):1243-1267.)
- [31] Xu Wenpeng, Miao Longtao, Liu Ligang. Reviewon Structure Optimization in 3D Printing. Journal of Computer-Aided Design Computer Graphics, 2017,29(7):1155-1168. (in Chinese)
(徐文鹏, 苗龙涛, 刘利刚. 面向 3D 打印的结构优化研究进展. 计算机辅助设计与图形学学报, 2017, 29(7):1155-1168.)
- [32] SCHUMACHER C, BICKEL B, RYS J, et al. Microstructures to controlelasticity in 3d printing. ACM Transactions on Graphics, 2015, 34(4):1-13.
- [33] WANG F. Systematic design of 3d auxetic lattice materials with programmablepoisson's ratio for finite strains. Journal of the Mechanicsand Physics of Solids, 2018, 114:303-318.
- [34] PANETTA J, RAHIMIAN A, ZORIN D. Worst-case stress relief formicrostructures. ACM Transactions on Graphics, 2017, 36(4):1-16.
- [35] XIAO Z, YANG Y, XIAO R, et al. Evaluation of topology-optimizedlattice structures manufactured via selective laser melting. Materials& Design, 2018, 143:27-37.
- [36] ANDREASSEN E, LAZAROV B S, SIGMUND O. Design of manufacturable3d extremal elastic microstructure. Mechanics of Materials,2014, 69(1):1-10.
- [37] LING C, CERNICCHI A, GILCHRIST M D, et al. Mechanical behaviourof additively-manufactured polymeric octet-truss lattice structuresunder quasi-static and dynamic compressive loading. Materials& Design, 2019, 162:106-118.
- [38] KAUR M, YUN T G, HAN S M, et al. 3d printed stretching-dominatedmicro-trusses. Materials & Design, 2017, 134:272-280.
- [39] GORGULUARSLAN R M, GANDHI U N, MANDAPATI R, et al.Design and fabrication of periodic lattice-based cellular structures.Computer-Aided Design and Applications, 2015, 13(1):50-62.
- [40] CHOI J B, LAKES R S. Nonlinear analysis of the poisson's ratio ofnegative poisson's ratio foams. Journal of Composite Materials, 1995,29(1):113-128.
- [41] YANG L, HARRYSSON O, WEST H, et al. Mechanical properties of3d re-entrant honeycomb auxetic structures realized via additive manufacturing.International Journal of Solids and Structures, 2015, 69-70:475-490.
- [42] PANETTA J, ZHOU Q, MALOMO L, et al. Elastic textures for additivefabrication. ACM Transactions on Graphics, 2015, 34(4):1-12.
- [43] GAO Q, WANG L, ZHOU Z, et al. Theoretical, numerical and experimentalanalysis of three-dimensional double-v honeycomb. Materials& Design, 2018, 139:380-391.
- [44] PRALL D, LAKES R. Properties of a chiral honeycomb with a poisson'sratio of -1. International Journal of Mechanical Sciences, 1997,39(3):305-314.
- [45] GRIMA J N, GATT R, FARRUGIA P S. On the properties of auxeticmeta-tetrachiral structures. physica status solidi (B), 2008, 245(3):511-520.
- [46] HA C S, PLESHA M E, LAKES R S. Chiral three-dimensional latticeswith tunable poisson's ratio. Smart Materials and Structures, 2016, 25 (5):054005.
- [47] LU Z, WANG Q, LI X, et al. Elastic properties of two novel auxetic 3d cellular structures. International Journal of Solids and Structures, 2017, 124:46-56.

- [48] FU M, LIU F, HU L. A novel category of 3d chiral material with negative poisson's ratio. *Composites Science and Technology*, 2018, 160:111-118.
- [49] TANCOCNE-DEJEAN T, DIAMANTOPOULOU M, GORJI M B, et al. 3d plate-lattices: An emerging class of low-density metamaterials exhibiting optimal isotropic stiffness. *Advanced Materials*, 2018, 30(45):1803334.
- [50] BONATTI C, MOHR D. Mechanical performance of additively manufactured anisotropic and isotropic smooth shell-lattice materials: Simulations & experiments. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, 122:1-26.
- [51] KUIPERS T, WU J, WANG C C. CrossFill: Foam structures with graded density for continuous material extrusion. *Computer-Aided Design*, 2019, 114:37-50.
- [52] OVERVELDE J T, DE JONG T A, SHEVCHENKO Y, et al. A three-dimensional actuated origami-inspired transformable metamaterial with multiple degrees of freedom. *Nature Communications*, 2016, 7(1):10929.
- [53] ION A, FROHNHOFEN J, WALL L, et al. Metamaterial mechanisms. *Proceedings of the 29th Annual Symposium on User Interface Software and Technology*. Tokyo Japan, 2016:529-539.
- [54] ION A, KOVACS R, SCHNEIDER O S, et al. Metamaterial textures. *Proceedings of the 2018 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*. Montreal, Canada, 2018:1-12.
- [55] ION A, LINDLBAUER D, HERHOLZ P, et al. Understanding metamaterial mechanisms. *Proceedings of the 2019 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*. Glasgow, UK, 2019:1-14.
- [56] TIAN L, LU L, CHEN W, et al. Organic open-cell porous structure modeling. *Symposium on Computational Fabrication*. Virtual Event USA, 2020:1-12.
- [57] MARTÍNEZ J, DUMAS J, LEFEBVRE S. Procedural voronoi foams for additive manufacturing. *ACM Transactions on Graphics*, 2016, 35(4):1-12.
- [58] MARTÍNEZ J, SONG H, DUMAS J, et al. Orthotropic k-nearest foams for additive manufacturing. *ACM Transactions on Graphics*, 2017, 36(4):1-12.
- [59] MARTÍNEZ J, HORNUS S, SONG H, et al. Polyhedral voronoi diagrams for additive manufacturing. *ACM Transactions on Graphics*, 2018, 37(4):1-15.
- [60] YOO D J. Porous scaffold design using the distance field and triply periodic minimal surface models. *Biomaterials*, 2011, 32(31):7741-7754.
- [61] YOO D J. Computer-aided porous scaffold design for tissue engineering using triply periodic minimal surfaces. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 2011, 12(1):61-71.
- [62] YAN C, HAO L, HUSSEIN A, et al. Advanced lightweight 316L stainless steel cellular lattice structures fabricated via selective laser melting. *Materials & Design*, 2014, 55:533-541.
- [63] Wang Qinghui, Xia Gang, Xu Zhijia, Li Jingrong. Modelling the Microstructures of Cancellous Bone Based on Triply Periodic Minimal Surface for Tissue Engineering. *Journal of Computer Aided Design Computer Graphics*, 2016(28):1949-1956. (in Chinese)
(王清辉, 夏刚, 徐志佳, 李静蓉. 面向组织工程的松质骨微观结构 TPMS 建模方法. *计算机辅助设计与图形学学报*, 2016(28):1949-1956.)
- [64] FENG J, FU J, SHANG C, et al. Porous scaffold design by solid T-splines and triply periodic minimal surfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 336:333-352.
- [65] HU C, LIN H. Heterogeneous porous scaffold generation using trivariate b-spline solids and triply periodic minimal surfaces. *Graphical Models*, 2021, 115:101105.
- [66] YAN X, RAO C, LU L, et al. Strong 3d printing by TPMS injection. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 2020, 26(10):3037-3050.
- [67] HU J, WANG S, WANG Y, et al. A lightweight methodology of 3d printed objects utilizing multi-scale porous structures. *The Visual Computer*, 2019, 35(6-8):949-959.
- [68] HU J, LI M, YANG X, et al. Cellular structure design based on free material optimization under connectivity control. *Computer-Aided Design*, 2020, 127:102854.
- [69] PANESAR A, ABDI M, HICKMAN D, et al. Strategies for functionally graded lattice structures derived using topology optimization for additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 2018, 19:81-94.
- [70] GARNER E, KOLKEN H M, WANG C C, et al. Compatibility in microstructural optimization for additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 2019, 26:65-75.
- [71] LUO Y, HU J, LIU S. Self-connected multi-domain topology optimization of structures with multiple dissimilar microstructures. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021, 64(1):125-140.
- [72] ZHU B, SKOURAS M, CHEN D, et al. Two-scale topology optimization with microstructures. *ACM Transactions on Graphics*, 2017, 36(4):1.
- [73] LIU X, SHAPIRO V. Multiscale shape - material modeling by composition. *Computer-Aided Design*, 2018, 102:194-203.
- [74] SIGMUND O. Tailoring materials with prescribed elastic properties. *Mechanics of Materials*, 1995, 20(4):351-368.
- [75] CHEN W, WATTS S, JACKSON J A, et al. Stiff isotropic lattices beyond the maxwell criterion. *Science Advances*, 2019, 5(9):1937.
- [76] CHEN D, SKOURAS M, ZHU B, et al. Computational discovery of extremal microstructure families. *Science Advances*, 2018, 4(1):7005.
- [77] CHEN C T, GU G X. Generative deep neural networks for inverse materials design using backpropagation and active learning. *Advanced Science*, 2020, 7(5):1902607.
- [78] GUO K, YANG Z, YU C H, et al. Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials. *Materials Horizons*, 2021, 8(4):1153-1172.
- [79] CHEN C T, GU G X. Machine learning for composite materials. *MRS*

- Communications, 2019, 9(2):556-566.
- [80] LIU R, KUMAR A, CHEN Z, et al. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design. *Scientific Reports*, 2015, 5(1):11551.
- [81] PAUL A, ACAR P, KENG LIAO W, et al. Microstructure optimization with constrained design objectives using machine learning-based feedback-aware data-generation. *Computational Materials Science*, 2019, 160:334-351.
- [82] GU G X, CHEN C T, BUEHLER M J. De novo composite design based on machine learning algorithm. *Extreme Mechanics Letters*, 2018, 18:19-28.
- [83] LIU Z, WU C, KOISHI M. A deep material network for multiscale topology learning and accelerated nonlinear modeling of heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 345:1138-1168.
- [84] MAO Y, HE Q, ZHAO X. Designing complex architected materials with generative adversarial networks. *Science Advances*, 2020, 6(17):4169.
- [85] HSU T, EPTING W K, KIM H, et al. Microstructure generation via generative adversarial network for heterogeneous, topologically complex 3d materials. *JOM*, 2020, 73(1):90-102.
- [86] WANG L, CHAN Y C, AHMED F, et al. Deep generative modeling for mechanistic-based learning and design of metamaterial systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 372:113377.
- [87] CHAN Y C, AHMED F, WANG L, et al. METASET: Exploring shape and property spaces for data-driven metamaterials design. *Journal of Mechanical Design*, 2020, 143(3):031707.
- [88] LAL P, SUN W. Computer modeling approach for microsphere-packed bone scaffold. *Computer-Aided Design*, 2004, 36(5):487-497.
- [89] KANTAROS A, CHATZIDAI N, KARALEKAS D. 3d printing assisted design of scaffold structures. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2015, 82(1-4):559-571.
- [90] EFREMOV S, MARTÍNEZ J, LEFEBVRE S. 3d periodic cellular materials with tailored symmetry and implicit grading. *Computer-Aided Design*, 2021, 140:103086.
- [91] ZHAO H, LI L, DING S, et al. Effect of porous structure and pore size on mechanical strength of 3d-printed comby scaffolds. *Materials Letters*, 2018, 223:21-24.
- [92] CHEAH C, CHUA C, LEONG K, et al. Development of a tissue engineering scaffold structure library for rapid prototyping. part 1: Investigation and classification. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2003, 21(4):291-301.
- [93] CHEAH C, CHUA C, LEONG K, et al. Development of a tissue engineering scaffold structure library for rapid prototyping. part 2: Parametric library and assembly program. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2003, 21(4):302-312.
- [94] AHMADI S, YAVARI S, WAUTHLE R, et al. Additively manufactured open-cell porous biomaterials made from six different space filling unit cells: The mechanical and morphological properties. *Materials*, 2015, 8(4):1871-1896.
- [95] MAXWELL J C. L. on the calculation of the equilibrium and stiffness of frames. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1864, 27(182):294-299.
- [96] CALLADINE C. Buckminster fuller's "tensegrity" structures and clarkmaxwell's rules for the construction of stiff frames. *International Journal of Solids and Structures*, 1978, 14(2):161-172.
- [97] DESHPANDE V, FLECK N, ASHBY M. Effective properties of the octet-truss lattice material. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(8):1747-1769.
- [98] ZOK F W, LATTURE R M, BEGLEY M R. Periodic truss structures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2016, 96:184-203.
- [99] JOHNSTON S, ROSEN D, REED M, et al. Analysis of mesostructured unit cells comprised of octet-truss structures. *Solid Freeform Fabrication Symposium*, Austin, USA, 2006:421-432.
- [100] LAKES R. Deformation mechanisms in negative poisson's ratio materials: structural aspects. *Journal of Materials Science*, 1991, 26(9):2287-2292.
- [101] MIZZI L, ATTARD D, GATT R, et al. Influence of translational disorder on the mechanical properties of hexachiral honeycomb systems. *Composites Part B: Engineering*, 2015, 80:84-91.
- [102] ROSSITER J, TAKASHIMA K, SCARPA F, et al. Shape memory polymer hexachiral auxetic structures with tunable stiffness. *Smart Materials and Structures*, 2014, 23(4):045007.
- [103] WANG G, SHEN L, ZHAO J, et al. Design and compressive behavior of controllable irregular porous scaffolds: Based on Voronoi tessellation and for additive manufacturing. *ACS Biomaterials Science & Engineering*, 2018, 4(2):719-727.
- [104] LIU W, TANG G, SHI Y. Apparent permeability study of rarefied gas transport properties through ultra-tight VORONOI porous media by discrete velocity method. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2020, 74:103100.
- [105] LEI H Y, LI J R, XU Z J, et al. Parametric design of voronoi-based lattice porous structures. *Materials & Design*, 2020, 191:108607.
- [106] LORENSEN W E. Marching cubes: A high resolution 3d surface construction algorithm. *ACM siggraph computer graphics*, 1987, 21(4):163-169.
- [107] WANG Y. Periodic surface modeling for computer aided nano design. *Computer-Aided Design*, 2007, 39(3):179-189.
- [108] SHI J, ZHU L, LI L, et al. A TPMS-based method for modeling porous scaffolds for bionic bone tissue engineering. *Scientific Reports*, 2018, 8(1):1-10.
- [109] MELCHELS F P, BERTOLDI K, GABBRIELLI R, et al. Mathematically defined tissue engineering scaffold architectures prepared by stereolithography. *Biomaterials*, 2010, 31(27):6909-6916.
- [110] MELCHELS F P, BARRADAS A M, VAN BLITTERSWIJK C A, et

- al. Effects of the architecture of tissue engineering scaffolds on cell seeding and culturing. *Acta Biomaterialia*, 2010, 6(11):4208-4217.
- [111] Lei Hongyuan, Li Jingrong, Xu Zhijia, Wang Qinghui. TPMS-Based Porous Structures Modelling Driven by Pore Characteristic Parameters. *Journal of Computer-Aided Design Computer Graphics*, 2020, 32(1):156-163, 172. (in Chinese)
(雷鸿源, 李静蓉, 徐志佳, 王清辉. 孔隙表征参数驱动的TPMS多孔结构建模. *计算机辅助设计与图形学学报*, 2020, 32(1):156-163, 172.)
- [112] MASKERY I, AREMU A, PARRY L, et al. Effective design and simulation of surface-based lattice structures featuring volume fraction and cell type grading. *Materials & Design*, 2018, 155:220-232.
- [113] YANG N, QUAN Z, ZHANG D, et al. Multi-morphology transition hybridization CAD design of minimal surface porous structures for use in tissue engineering. *Computer-Aided Design*, 2014, 56:11-21.
- [114] VIJAYAVENKATARAMAN S, ZHANG L, ZHANG S, et al. Triply periodic minimal surfaces sheet scaffolds for tissue engineering applications: An optimization approach toward biomimetic scaffold design. *ACS Applied Bio Materials*, 2018, 1(2):259-269.
- [115] WANG J, CHEN W W, DA D, et al. IH-GAN: A conditional generative model for implicit surface-based inverse design of cellular structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 396:115060.
- [116] LIU P, LIU A, PENG H, et al. Mechanical property profiles of microstructures via asymptotic homogenization. *Computers & Graphics*, 2021, 100:106-115.
- [117] PLOCHER J, PANESAR A. Review on design and structural optimization in additive manufacturing: Towards next-generation lightweight structures. *Materials & Design*, 2019, 183:108164.
- [118] LI H, LUO Z, ZHANG N, et al. Integrated design of cellular composites using a level-set topology optimization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 309:453-475.
- [119] LI D, DAI N, TANG Y, et al. Design and optimization of graded cellular structures with triply periodic level surface-based topological shapes. *Journal of Mechanical Design*, 2019, 141(7):071402.
- [120] WANG C, GU X, ZHU J, et al. Concurrent design of hierarchical structures with three-dimensional parameterized lattice microstructures for additive manufacturing. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020, 61(3):869-894.
- [121] SANDERS E D, PEREIRA A, PAULINO G H. Optimal and continuous multi lattice embedding. *Science Advances*, 2021, 7(16):4838.
- [122] LIU Y, ZHENG G, LETOV N, et al. A survey of modeling and optimization methods for multi-scale heterogeneous lattice structures. *Journal of Mechanical Design*, 2021, 143(4):040803.
- [123] ONAL E, FRITH J, JURG M, et al. Mechanical properties and in vitro behavior of additively manufactured and functionally graded Ti6Al4V porous scaffolds. *Metals*, 2018, 8(4):200.
- [124] WANG J, HUANG J. Functionally graded non-periodic cellular structure design and optimization. *Journal of Computing and Information Science in Engineering*, 2021:1-10.
- [125] YAO X, MOON S K, BI G. A hybrid machine learning approach for additive manufacturing design feature recommendation. *Rapid Prototyping Journal*, 2017, 23(6):983-997.
- [126] SOSNOVIK I, OSELEDETS I. Neural networks for topology optimization. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 2019, 34(4):215-223.
- [127] BANGA S, GEHANI H, BHILARE S, et al. 3d topology optimization using convolutional neural networks. arXiv:1808.07440.
- [128] RAWAT S, SHEN M H H. A novel topology design approach using an integrated deep learning network architecture. arXiv:1808.02334.
- [129] OH S, JUNG Y, LEE I, et al. Design automation by integrating generative adversarial networks and topology optimization. Volume 2A: 44th Design Automation Conference, American Society of Mechanical Engineers: Quebec City, Canada, 2018:V02AT03A008.
- [130] GU G X, CHEN C T, RICHMOND D J, et al. Bioinspired hierarchical composite design using machine learning: simulation, additive manufacturing, and experiment. *Materials Horizons*, 2018, 5(5):939-945.
- [131] WILT J K, YANG C, GU G X. Accelerating auxetic metamaterial design with deep learning. *Advanced Engineering Materials*, 2020, 22(5):2070018.
- [132] HAZDRA P, MAZANEK M. L-system tool for generating fractal antenna structures with ability to export into EM simulators. *Radio engineering*, 2006, 15(2):18-21.
- [133] SHIMOMURA M. The new trends in next generation biomimetic material technology: Learning from biodiversity. *Sci Technol Trends Q Rev*, 2010, 37:53-75.
- [134] YANG Y, ZHU Q X, WANG W, et al. Structure bionic design method oriented to integration of biological advantages. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021, 64(3):1017-1039.
- [135] YANG Y, SONG X, LI X, et al. Recent progress in biomimetic additive manufacturing technology: from materials to functional structures. *Advanced Materials*, 2018, 30(36):1706539.
- [136] LI X, ZHANG Y, ZHAO H, et al. A transfer learning approach for microstructure reconstruction and structure-property predictions. *Scientific Reports*, 2018, 8(1):1-13.
- [137] POKURI B S S, GHOSAL S, KOKATE A, et al. Interpretable deep learning for guided microstructure-property explorations in photovoltaics. *Computational Materials*, 2019, 5(1):1-11.
- [138] YANG Z, YABANSU Y C, AL-BAHRANI R, et al. Deep learning approaches for mining structure-property linkages in high contrast composites from simulation datasets. *Computational Materials Science*, 2018, 151:278-287.
- [139] PENG H, LIU A, HUANG J, et al. PH-Net: Parallelepiped Microstructure Homogenization via 3D Convolutional Neural Networks. arXiv:2201.09672.

- [140] YU X, ZHOU J, LIANG H, et al. Mechanical metamaterials associated with stiffness, rigidity and compressibility: A brief review. *Progress in Materials Science*, 2018, 94:114-173.
- [141] ZHANG H, YANG L, LI C, et al. ScaffoldGAN: Synthesis of scaffold materials based on generative adversarial networks. *Computer-Aided Design*, 2021, 138:103041.
- [142] MA W, CHENG F, LIU Y. Deep-learning-enabled on-demand design of chiral metamaterials. *ACS Nano*, 2018, 12(6):6326-6334.
- [143] WHITE D A, ARRIGHI W J, KUDO J, et al. Multiscale topology optimization using neural network surrogate models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 346:1118-1135.
- [144] GUIRGUIS D, AULIG N, PICELLI R, et al. Evolutionary black-box topology optimization: Challenges and promises. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2020, 24(4):613-633.



TIAN Li-Hao, Ph.D. candidate. His major research regions are computer graphics and digital geometry processing.

LU Lin Ph.D., professor. Her research interests include computer graphics, digital geometry processing and computational fabrication.

PENG Hao Ph.D. candidate. His research interests include computer graphics and computational fabrication.

Background

The microstructures in nature have a series of unique properties, such as high space utilization efficiency or high mechanical strength with low mass. Inspired by microstructures in nature, structural bionics is based on the principles of engineering mechanics to simulate the geometric expression, material combination, and physical properties of the microstructure, and optimize the geometric structure design. A lot of research has been conducted in materials science, engineering, and computer science fields. The rapid development of additive manufacturing has stimulated the emergence of a large number of microstructure works, and more complex geometric microstructures are manufactured by 3D printing. At the same time, the problems related to the complex expression of geometric structure design and structural optimization have also attracted researchers related to computer

LIU Pei-Qing Master student. His research interests include computer graphics and computational fabrication.

YAN Xin Ph.D. candidate. His research interests include computer graphics and computational fabrication.

LIU Li-Gang Ph.D., professor. His research interest is computer graphics.

TU Chang-He Ph.D., professor. His research interest is computer graphics.

graphics to participate in microstructure design and optimization research.

Unlike the existing research reviews of microstructures, this article focuses on the structural design methods concerned in the field of computer graphics. It mainly discusses the design and optimization of microstructures based on single-material 3D printing. This article reviews the geometric microstructure design work under single material, systematically sorts the main design methods of single material geometric microstructure, and groups them into optimization, parametric, and procedural methods. At the end of this article, a series of challenging problems and potential research topics worthy of further exploration are discussed.

This project is supported by the National Natural Science Foundation of China under Grant No. 61972232, 62025207.