ACM SIGGRAPH / Eurographics 计算机动画研讨会 2022年 D. L. Michels 和 S. Pirk（客座编辑）

第41卷（2022年），第8期

用于微观结构模拟的高阶弹性插值函数

Antoine Chan-Lock，Jesús Pérez 和 Miguel A. Otaduy

胡安·卡洛斯国王大学，马德里，西班牙

arXiv:2303.03120v1 [cs.CE] 22 Feb 2023

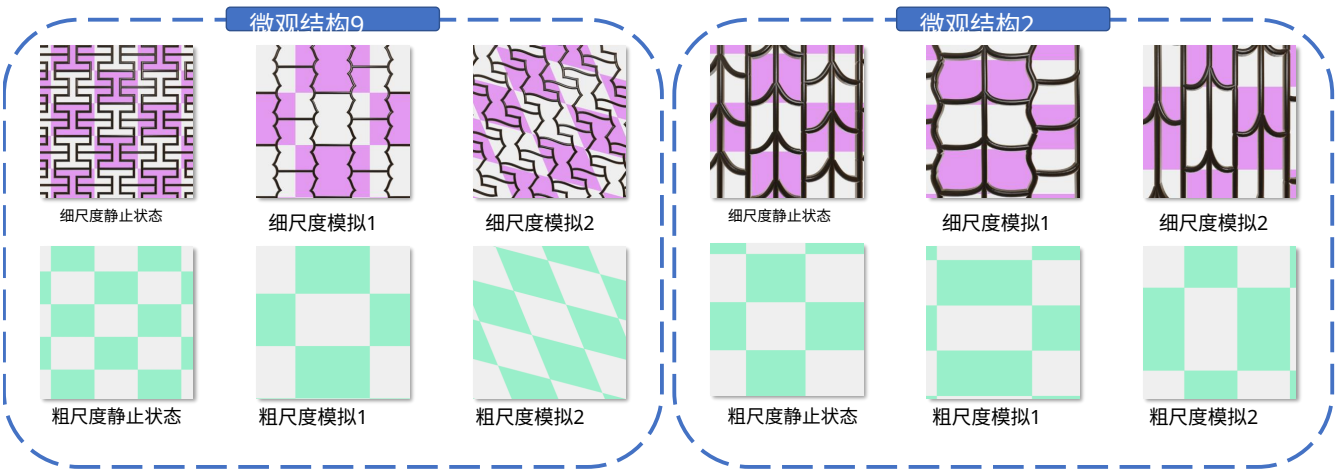

图 1： 我们使用基于高阶插值函数的弹性模型，对二维微结构进行均质化。如这两种不同微结构的图像所示，粗粒化均质材料准确地再现了微结构的介观变形响应。在这些示例中，我们通过周期性边界条件模拟微结构；这会产生均匀的介观尺度应变，我们用它来使紫白图案变形。左侧微结构表现出负泊松比行为，我们的模型准确地捕捉到了这一特性。

摘要

我们提出一种基于高阶插值函数的新型弹性材料表述，能够准确拟合复杂的弹性行为，同时保持保守性。所提出的高阶插值函数可视为径向基函数的高维扩展，并支持对弹性能导数进行插值，尤其是应力和刚度。基于所提出的弹性模型参数化方法，我们设计了一种利用训练数据寻找最优模型参数的算法。我们针对二维微结构的均匀化测试了这一方法，并证明它能够以很高的精度匹配复杂行为。

CCS概念

• 计算方法 → 物理模拟；

1. 引言

准确表示复杂材料的弹性响应，始终是计算机图形学和计算力学领域面临的一项挑战。此问题可用于为真实物体的物理测试拟合材料模型 [BBO*09, WOR11, SSBL*22]，为微观材料开发介观模型 [SBR*15]，或设计具有非线性响应的仿真模型 [XSZB15]。

设计复杂弹性材料行为的一种常见方法，是使用加权标量基函数来定义弹性能或应力–应变函数的参数 [BBO*09, WOR11, MMO16, SNW20, WDK*20]。然而，正如本文所示，这种方法存在诸多问题。有些变体无法准确表示弹性行为，而另一些则缺少弹性的基本属性，例如能量守恒。

本文提出了一种基于

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》 © 2022年 欧洲计算机图形学协会和 John Wiley & Sons Ltd. 由 John Wiley & SonsLtd. 出版。

高阶插值函数的新型弹性材料表述，能够精确拟合复杂的弹性行为，同时保持保守性。我们的工作贡献如下：

1. 用于插值弹性能导数的张量基函数设计（第 3 节）。这些基函数可视为径向基函数（RBFs）的高维扩展。2. 基于张量插值函数，我们设计了一种弹性模型参数化方法（第 4 节）。该参数化为拟合复杂材料的应力和刚度行为提供了适当的自由度。3. 一种基于训练数据优化参数化弹性模型的算法（第 5 节），该算法确定弹性插值函数的控制点和系数。4. 将该方法应用于二维微结构的均匀化（第6节）。这包括生成具有代表性的训练数据，以及应用上述估计算法。

在本文中，我们评估了我们的方法的精度，将其与其他变体进行了比较，并分析了各种设计选择的影响。总之，所提出的弹性模型设计方法成功捕捉了复杂行为，例如图 1 所示的行为。我们已在 11 种具有不同变形行为的二维微结构上测试了该方法，并讨论了完整结果。

2. 相关工作

2.1. 弹性插值

建模弹性行为的基线方法是设计具有表现力的本构模型。该方向的研究十分丰富，涵盖了复现有趣行为的能力（非线性、各向异性、体积守恒）以及稳健性 [LB15，SGK18，Kim20a，Kim20b]。然而，设计本构模型建立在材料均质这一固有假设之上，并不旨在准确表示非均质材料的复杂非线性。

在计算机图形学中，表示复杂非线性和各向异性的常见方法是对弹性模型进行插值。实现这一目标的方法种类繁多，各具不同特性。有些方法通过插值对非线性应力-应变关系进行建模。例如，对材料参数进行径向基函数插值 [BBO*09]、对位于应变域中的控制点处的刚度值进行插值 [WOR11]，，或基于径向基函数进行应力插值 [WDK*20]。遗憾的是，通过插值对应力-应变函数进行建模缺乏能量守恒，因为应力-应变函数不可积。这可能因能量增加或损失而产生伪影，并阻碍使用具有吸引力的基于优化的数值积分器 [GSS*15]。一个例外 [MBT*12] 针对各个应变值对应力-应变曲线进行建模，因此仍然保持保守性，但这在很大程度上限制了材料的表现力。

其他方法通过插值来建模弹性能函数，因此从构造上便是保守的。示例包括构造依赖于不同应变子域的能量加项 [MMO16]，，并对这类能量进行建模使用样条插值的加项 [SNW20]。Xu 等人 [XSZB15]在 Valanis-Landel各向同性假设下，使用样条插值对能量加项进行建模。他们单独处理了各向异性，但表达能力有限。

在对微观尺度非均质材料进行建模时，数值粗化 [NKJF09、KMOD09、TREO16、CBW*18] 是弹性模型设计的一种替代方法。在数值粗化中，材料模型在高分辨率空间离散化下进行评估，同时保留非均质材料分布。不过，模拟是在粗介观尺度上进行的，并通过复杂的非线性形函数插值到微观尺度。

2.2. 微观结构模拟

二维和三维微结构是有限材料选择下控制介观尺度变形行为的有效手段，因此已成为可变形物体计算制造中的重要工具 [BBO*10、SBR*15、PZM*15、KLPCP18]。然而，以微观尺度分辨率模拟大型物体的计算成本高昂，这也使得微结构难以应用于设计优化算法。

均匀化是利用微结构进行计算设计的有效工具，因为它能够拟合出可准确表征总体微观尺度行为的介观尺度材料模型 [LS16]。我们在微结构均匀化的背景下测试了材料建模方法，并为此采用了一种广泛使用的均匀化方法。与以往工作相同 [SMGT18，SNW20]，我们在周期性边界条件下模拟微结构。这使介观尺度应变保持均匀，并便于将训练数据从微观结构模拟传递到介观尺度。

3. 保守导数插值

我们希望设计一个参数函数（弹性能），使其能够插值给定的导数值，即其梯度和海森矩阵（应力和刚度）。为此，我们采用径向基函数插值，但面临的问题是如何设计良好的参数化，使所得函数具有保守性，并能插值导数值。

为回答这个问题，本节将分析用于梯度插值的矩阵值径向基函数。我们得出结论，这种公式可以推广并扩展到任意高阶导数的插值。利用这些结论，我们将在后文说明如何为径向基函数能量设计良好的参数化。

3.1. 用于梯度插值的矩阵值径向基函数

在阐述高阶径向基函数插值器的基本原理时，我们将径向基函数插值的定义域记为x。给定径向基函数中心x_i、径向向量 $\Delta x_i = x - x_i$以及径向基函数半径$r_i = \|\Delta x_i\|$，相应的径向基函数表示为 $\phi_i \equiv \phi(r_i)$。附录 A 列出了本文中用到的径向基函数的一些导数。

矩阵值径向基函数可通过对标量值径向基函数 ϕ 进行两次微分构造，

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》 © 2022年欧洲计算机图形学协会和约翰·威立国际出版公司。

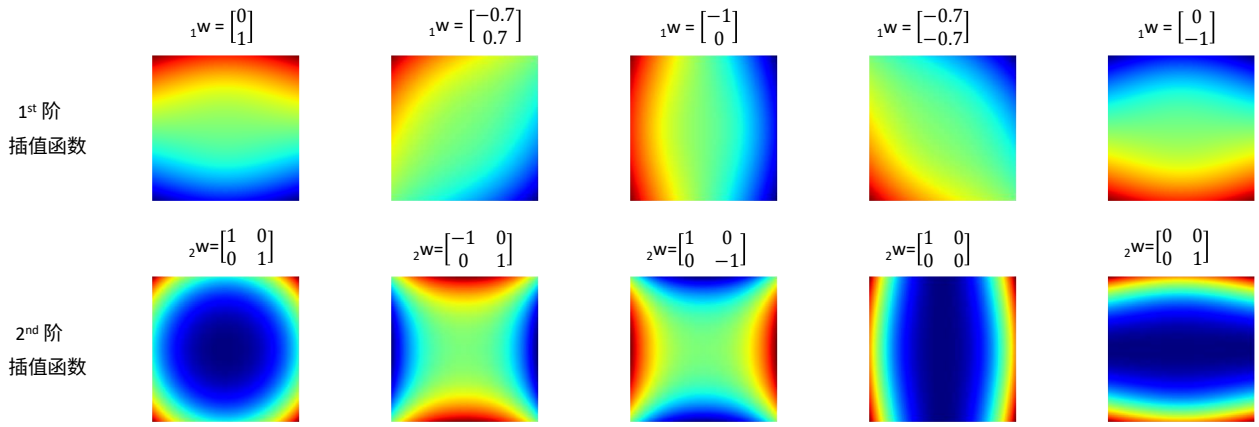

图 2： 我们提出的一阶插值函数（7）和二阶插值函数（8）分别对能量函数的梯度（应力）和曲率（刚度）进行局部控制。图中展示了径向基函数中心附近的能量，采用了具有代表性的径向基函数系数组合。我们使用了多二次径向基函数，其中蓝色表示低能量，红色表示高能量。请注意，顶排中梯度的方向受到控制，这决定了局部应力。还请注意，二阶插值函数可以对各向同性刚度（左）、方向刚度（右）以及鞍点构型（中）进行建模。

$\left(\alpha\nabla^2 I + \beta\nabla\nabla^T\right)\phi$，其中 α 和 β 为标量系数。向量值径向基函数系数 w_i 可生成一个向量场：

$$v(x) = \sum_i \left(\alpha\nabla^2 I + \beta\nabla\nabla^T\right)\phi_i w_i. \tag{1}$$

在对向量值进行插值时，矩阵值径向基函数会产生正定系统 [NW94]。

得益于亥姆霍兹-霍奇分解 [BNPB13], ，矩阵值径向基函数插值可分解为无旋向量场和无散向量场 [Fus08]：

$$v_{\text{curl-free}}(x) = \sum_i \nabla\nabla^T \phi_i w_i, \tag{2}$$

$$v_{\text{div-free}}(x) = \sum_i \left(\nabla^2 I - \nabla\nabla^T\right)\phi_i w_i. \tag{3}$$

此外，很容易证明，无旋向量场可由势函数 $f(x)$ 导出，因此可以得出该向量场也是保守的：

$$v_{\text{curl-free}}(x) = \nabla f(x), \text{ with } f(x) = \sum_i w_i^T \nabla\phi_i. \tag{4}$$

在附录 B 中，我们说明，基于径向基函数梯度的径向基函数插值函数可改写为直接基于径向基函数的形式。于是，插值函数 $w_i^T\nabla\phi_i$ 在 $f(x)$ 在（4）中可改写为 $\phi_i w_i^T \Delta x_i$，其中采用了另一种径向基函数。因此，式（4）中的无旋向量场可重写为：

$$v_{\text{curl-free}}(x) = \nabla f(x), \text{ with } f(x) = \sum_i \phi_i w_i^T \Delta x_i. \tag{5}$$

3.2. 推广到高阶导数

在上一节中，我们观察到，使用保守函数插值梯度的关键性质是，径向基函数插值函数可表示为径向向量 Δx_i 与一个径向基函数系数向量 w_i 的内积，该向量的维数与目标梯度相同。事实上，这一观察可以推广到任意高阶的 n 阶导数。使用保守函数插值 n 阶导数的充要条件是，径向基函数插值函数可表示为 n 个径向向量 Δx_i 的张量积与一个 n 维径向基函数系数张量 ${}_n w_i$ 进行张量缩并。形式化地说：

$$f(x) = \sum_i \phi_i {}_n w_i : \underbrace{(\Delta x_i \otimes \Delta x_i \cdots \otimes \Delta x_i)}_{\text{n times}} \tag{6}$$

是一个函数，其 n 阶导数能够插值 n 维张量数据，即目标 n 阶导数。

例如，对梯度（一阶导数）和海森矩阵（二阶导数）进行保守插值，最终可归结为定义以下形式的插值函数：

$$\text{Gradient:} \quad \phi_i {}_1 w_i : \Delta x_i = \phi_i {}_1 w_i^T \Delta x_i, \tag{7}$$

$$\text{Hessian:} \quad \phi_i {}_2 w_i : (\Delta x_i \otimes \Delta x_i) = \phi_i \Delta x_i^T {}_2 w_i \Delta x_i, \tag{8}$$

其中，${}_1 w_i$ 分别为径向基函数系数向量，${}_2 w_i$ 分别为径向基函数系数矩阵。

图2 展示了采用若干具有代表性的径向基函数系数取值 ${}_1 w_i$ 和 ${}_2 w_i$ 时的一阶和二阶插值函数示例。可以看出，一阶插值函数能够局部控制能量的梯度（包括数值和方向），而二阶插值函数能够局部控制能量的曲率。在下一节中，我们将利用这些插值函数来定义径向基函数弹性能量函数。

© 2022年 作者 ComputerGraphics Forum © 2022年
TheEurographicsAssociation 和 John Wiley & Sons Ltd.

4. 径向基函数弹性能

我们希望定义由当前变形参数化的非线性各向异性弹性材料，并采用基于径向基函数的散乱数据插值策略来实现。我们首先介绍一些定义，并讨论所需的性质。然后，我们将引入能量参数化方法，并利用第 3 节推导的高阶径向基函数插值函数。

4.1. 定义与设计目标

设计弹性材料时，我们希望保留应力-应变响应。这既包括特定应变下的应力值，也包括其导数，即切线刚度。

我们选择格林应变 $\varepsilon = \frac{1}{2}\left(F^T F - I\right)$ 作为应变或变形的表示，其中F 为变形梯度。为方便起见，我们用沃伊特记号E表示应变，它构成径向基函数插值方法的插值域$E = x$。在二维示例中，我们有$E = (\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, 2\varepsilon_{xy})$。

按照格林应变的沃伊特记号E，并记弹性能量密度为 Ψ，我们将应力定义为能量对应变的梯度，$s = \nabla\Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial E}^T$，它是第二类皮奥拉-基尔霍夫应力的向量形式。我们还将切线刚度定义为能量对应变的海森矩阵，$K = \nabla\nabla^T\Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial E^2}$。

我们希望构建一个材料模型 $\Psi = f(E, \{w_i\})$，使其根据某些材料参数 $\{w_i\}$ 将应变与能量关联起来。在为弹性模型设计良好的参数化方案时，我们会关注希望匹配的量的性质，即应力和切线刚度。设计应力（应变）函数的一种简单方法，是在应变域中构造标量基函数（例如径向基函数），并配以向量型基系数。遗憾的是，这样得到的函数无法保证产生保守场。最重要的是，无法通过适当地选择基函数系数来强制实现保守性；缺乏保守性是这种构造方式本身的固有限制。

确保应力场具有保守性的关键，是将应力视为能量场的梯度。这样，拟合应力场就可以表述为一个梯度插值问题，其中应力是底层能量场的梯度。同理，拟合刚度场可以表述为一个海森矩阵插值问题，其中刚度是底层能量场的海森矩阵。为此，我们考察第 3 节中的高阶径向基函数插值函数。

4.2. 能量及其偏导数

我们设计了一种径向基函数能量公式，其中包含保守梯度插值（7），用于拟合目标应力场；还包含保守海森矩阵插值函数（8），用于拟合目标切线刚度场。我们将每个梯度插值记作 $\Psi_{\mathrm{GI},i}$，其径向基函数中心为 E_i，向量径向基函数系数为 w_i（即（7）中的 $1\mathrm{w}_i$）。类似地，我们将每个海森矩阵插值函数记作 $\Psi_{\mathrm{HI},i}$，其径向基函数中心为 E_i，矩阵径向基函数系数为 W_i（即（8）中的 $2\mathrm{w}_i$）。此外，我们还在能量公式中加入了两个偏移项 Ψ_{GO} 和 Ψ_{HO}，分别产生应力偏移量 $\mathrm{s_O}$ 和刚度偏移量 $\mathrm{K_O}$。我们将应力偏移量加入公式中，以便轻松实现零应变时的零应力；刚度偏移量则用于轻松拟合平均刚度。这样，径向基函数插值函数便可作为相对于偏移项的修正项。

完整的能量公式总结如下：

$$
\begin{aligned}
\Psi &= \Psi_{\mathrm{GO}} + \Psi_{\mathrm{HO}} + \sum_i \Psi_{\mathrm{GI},i} + \sum_i \Psi_{\mathrm{HI},i}, \qquad (9)\\
\Psi_{\mathrm{GO}} &= s_{\mathrm{O}}^T E,\\
\Psi_{\mathrm{HO}} &= \frac{1}{2} E^T K_{\mathrm{O}} E,\\
\Psi_{\mathrm{GI},i} &= \phi_i w_i^T \Delta E_i,\\
\Psi_{\mathrm{HI},i} &= \phi_i \Delta E_i^T W_i \Delta E_i.
\end{aligned}
$$

请注意，上述公式（以及我们的实现）对梯度和海森矩阵插值使用相同的径向基函数 ϕ 和径向基函数中心 $\{E_i\}$，但在实际应用中二者可以不同。

根据能量定义（9），我们可以得到应力和切线刚度。

$$
\begin{aligned}
s &= \nabla\Psi_{\mathrm{GO}} + \nabla\Psi_{\mathrm{HO}} + \sum_i \nabla\Psi_{\mathrm{GI},i} + \sum_i \nabla\Psi_{\mathrm{HI},i}, \qquad (10)\\
\nabla\Psi_{\mathrm{GO}} &= s_{\mathrm{O}},\\
\nabla\Psi_{\mathrm{HO}} &= K_{\mathrm{O}} E,\\
\nabla\Psi_{\mathrm{GI},i} &= \phi_i w_i + w_i^T \Delta E_i \frac{\partial \phi_i}{\partial E}^T,\\
\nabla\Psi_{\mathrm{HI},i} &= 2\phi_i W_i \Delta E_i + \Delta E_i^T W_i \Delta E_i \frac{\partial \psi_i}{\partial E}^T.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
K &= \nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{HO}} + \sum_i \nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{GI},i} + \sum_i \nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{HI},i}, \qquad (11)\\
\nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{HO}} &= K_{\mathrm{O}},\\
\nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{GI},i} &= w_i \frac{\partial \phi_i}{\partial E} + \frac{\partial \phi_i}{\partial E}^T w_i^T + w_i^T \Delta E_i \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial E^2},\\
\nabla\nabla^T\Psi_{\mathrm{HI},i} &= 2 W_i \Delta E_i \frac{\partial \phi_i}{\partial E} + 2\frac{\partial \phi_i}{\partial E}^T \Delta E_i^T W_i\\
&\quad + 2\phi_i W_i + \Delta E_i^T W_i \Delta E_i \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial E^2}.
\end{aligned}
$$

径向基函数的一阶和二阶偏导数列于附录 A 中。

我们的能量模型（9）由应力和刚度偏移量 s_{O}、K_{O}，以及梯度和海森矩阵插值中心与系数 $\{E_i、w_i、W_i\}$进行参数化。请注意，得益于我们的保守径向基函数插值，应力（10）和切线刚度（11）均表示为加权基函数之和（即，它们相对于基函数系数呈线性关系）；每个径向基函数引入的自由度与应力和/或刚度具有相同的维数，并且该公式在构造上保持保守。

5. 材料拟合算法

在上一节定义了径向基函数能量模型后，我们将介绍如何估计该模型的参数。

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》© 2022年欧洲计算机图形学协会和约翰·威立国际出版公司

我们的算法包含两个方面：一是能量系数的优化，二是元参数的优化（即径向基函数中心以及半径/平滑度参数）。

5.1. 径向基函数系数的优化

我们假设已知一组应变对应的目标应力和刚度数据 $\{s_j,\ K_j\}$。第 $\{E_j\}$节介绍了我们如何获取二维微结构的代表性目标数据。此处我们还假设能量径向基函数中心 $\{E_i\}$ 已给定。在下一小节中，我们将讨论如何优化这些中心。

能量函数包含以下待优化参数（见第4.2节）：应力和刚度偏移量 s_O，K_O，以及应力和刚度插值函数的系数 $\{w_i\}$，$\{W_i\}$。通过约束零应变时的应力为零，可隐式定义应力偏移量。由式（10）可得：

$$s(0) = s_O + \sum_i \nabla\Psi_{GI,i}(0) + \sum_i \nabla\Psi_{HI,i}(0) = 0 \Rightarrow$$
$$s_O = -\sum_i \nabla\Psi_{GI,i}(0) - \sum_i \nabla\Psi_{HI,i}(0). \tag{12}$$

我们将剩余的参数集记为 $p = (K_O,\ \{w_i\},\ \{W_i\})$。我们通过最小化目标值与估计值之间的应力和刚度值差异来计算这些参数。形式化表示如下：

$$p = \arg\min_p \sum_j \frac{1}{s_{RMS}^2} \|s(E_j,p) - s_j\|^2 + \frac{1}{K_{RMS}^2} \|K(E_j,p) - K_j\|^2. \tag{13}$$

请注意，我们分别用目标应力和目标刚度值的均方根对相应的应力与刚度误差进行归一化。

该优化是一个简单的线性最小二乘问题，可得到一个正定线性系统，用于求解参数 p。

5.2. 径向基函数元参数

除径向基函数系数外，弹性能函数还由径向基函数的数量、中心以及其他径向基函数特有的平滑度或支撑参数（例如高斯径向基函数的方差）进行参数化。我们采用贪心算法来优化这些元参数。

我们从不包含任何径向基函数开始，逐步添加径向基函数，直至能量拟合误差（定义见 (13)）小于目标阈值。给定 k 个径向基函数后，我们首先优化径向基函数中心的位置 $\{E_i, 1 \le i \le k\}$。我们通过对目标应变值 $\{E_j\}$ 进行 k 均值聚类，将其划分为 k 个聚类簇。然后，在遍历平滑度或支撑参数的同时求解优化问题 (13)，并选取最优结果。图 3 展示了两种不同微观结构的 k-均值聚类示例结果。在某些情况下（例如图 3上方），目标应变 $\{E_j\}$ 分布均匀，少量径向基函数便可能很好地覆盖整个区域。在其他情况下（例如图 3下方），目标应变呈现不连续性，例如由微观结构屈曲引起，此时可能需要更多径向基函数。

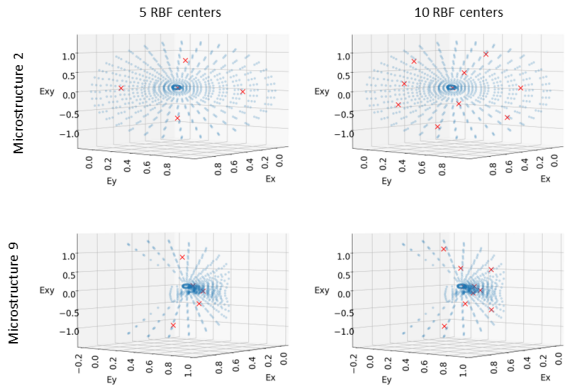

图 3： 用于计算径向基函数中心的若干 k 均值聚类结果。图中展示了两种不同微观结构的训练应变分布，以及聚类簇数为 *5* 和 *10* 时得到的径向基函数中心。微观结构*9*呈现出屈曲效应，使训练数据不连续，因此需要更多径向基函数才能充分覆盖定义域。

我们用于选择径向基函数中心的方法并非最优，因为聚类算法未考虑局部误差。优化径向基函数元参数还有其他可能的方法，例如递归正交最小二乘法 [GY00,CCG91], , 但我们将其留待未来工作。在第 7 节中，我们将讨论元参数和径向基函数的选择如何影响拟合误差。

6. 二维微结构的均匀化

我们应用参数化能量模型（第 4 节）和估计算法（第 5 节），为二维微结构设计均匀的介观尺度弹性模型。在此过程中，我们特别关注为估计算法生成具有代表性的应变、应力和刚度数据。

为了生成训练数据，我们模拟二维微结构在带有周期性边界条件（PBCs）的平面变形下的行为，方法与Schumacher等人 [SMGT18]的工作类似。具体而言，为了模拟带有周期性边界条件的高分辨率微观结构，我们采用Sperl等人 [SNW20]提出的方法。

我们使用有限元网格，以高分辨率对可重复的微结构单元进行建模。网格节点的位置记为$\mathbf{x}$，其由粗尺度均匀变形E和局部网格位移$\mathbf{u}$共同决定。按照Sperl等人的方法，我们施加已知的粗尺度变形E，并求解使该单元弹性能量密度最小的网格位移 Ψ，同时满足周期性边界条件。形式化地，可表示为：

$$\mathbf{u} = \arg\min \Psi(\mathbf{x}(E,\mathbf{u})),\ \text{s.t. } \mathbf{c}(\mathbf{u}) = 0, \tag{14}$$

其中 $\mathbf{c}(\mathbf{u})$ 包含周期性边界条件，以及避免单元发生整体刚体运动的约束。

我们以受控方式生成训练数据，产生涵盖各个方向平面单轴拉伸变形的微观结构变形。这些数据涵盖了变形存在

© 2022年 作者 ComputerGraphics Forum © 2022年
TheEurographicsAssociation 和 约翰·威立国际出版公司。

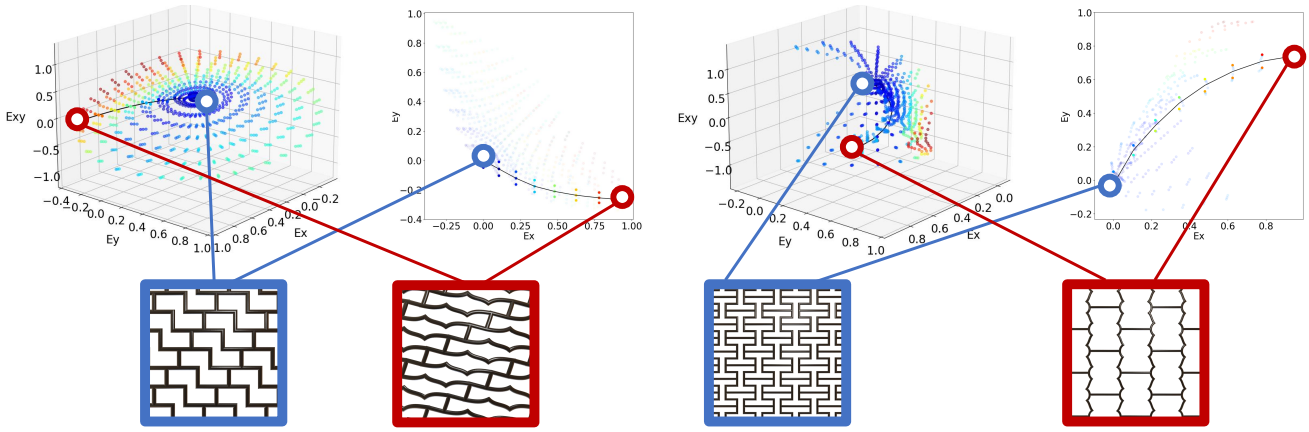

图 4： 这些图对比了两种不同微结构在应变域中的训练数据（按应力范数着色）。我们还标出了从静止状态（蓝色）到变形构型（红色）的定向拉伸。将数据投影到二维后，可以清楚地看到这两种微结构的行为截然不同；右侧的微结构在这次拉伸中表现出负泊松比，并且训练数据分布在应变域的另一个区域。

主导方向的情况，这也是先前多项研究的主要关注点 [WOR11,SMGT18,SSBL*22]。变形梯度的旋转不变部分可定义为 $F = \mathrm{Rot}(\theta)\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2)\,\mathrm{Rot}(\theta)^T$，其中 λ_1 和 λ_2 为主伸长，θ 为伸长方向。我们定期在 0.9—2.0 的范围内采样第一主伸长 λ_1，并在 0—π 的范围内采样伸长方向 θ。对于每种组合 (λ_1,θ)，我们模拟微观结构，并搜索能产生零正交应力的正交拉伸 λ_2，即 $\frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_2} = 0$。然后，我们通过将正交拉伸改变 ± 0.05，再添加两种变形。

我们收集完整的变形集合，并为每个变形计算粗尺度应变、应力和切线刚度，$\{E_j、s_j、K_j\}$。训练数据大致以各个方向的单轴拉伸为中心。图 4 展示了两种行为迥异的微结构的训练数据；左侧的微结构表现出负泊松比，因此训练数据分布在应变域中截然不同的区域。请观看随附视频，了解训练数据生成过程的动画以及应变域中数据的三维可视化。

7. 实验与讨论

我们已将高阶弹性插值方法应用于 11 种不同周期性微结构的均匀化，并对其进行了测试。所有微结构如图 6 所示。它们表现出多种非线性和各向异性行为，包括负泊松比响应。

本节首先讨论元参数的选择与估计。随后，我们分析所有微观结构的拟合误差，并讨论验证测试的结果。最后，我们将讨论与其他方法的比较。

RBF	应力与刚度误差（%）
多二次	6.53
高斯	6.89
逆二次	6.66
逆多二次	6.62

表 1： 我们使用四种不同的径向基函数拟合所有微观结构，每种径向基函数的中心数量相同（*10* 个），且误差差异极小。

7.1. 元参数

我们的第一个测试评估在参数数量相同的情况下，哪种径向基函数的精度最高。我们测试了四种光滑的径向基函数，以确保海森矩阵有良好定义：多二次、高斯、逆二次和逆多二次。

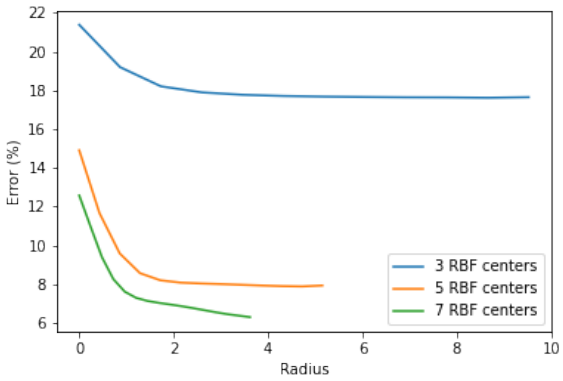

图 5： 此图展示了微结构 *1* 的拟合误差随多二次径向基函数的光滑半径变化的情况。请注意，随着径向基函数数量的增加，最优半径会变小。当估计问题变得病态时，曲线会中断。

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》© 2022年欧洲计算机图形学协会和约翰·威立国际出版公司。

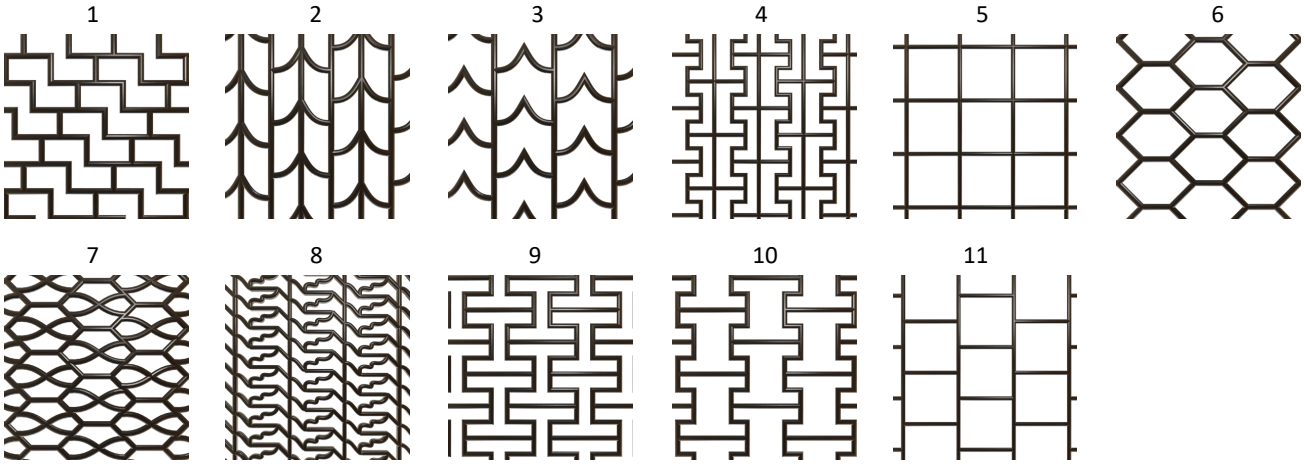

图 6： 所有 实验中测试的 *11* 种周期性微结构。它们呈现出多种非线性和各向异性 .

我们按照第 5 节所述的方法估算了全部 11 个微结构，每个微结构使用 10 个径向基函数中心。如表 1 所示，不同径向基函数类型之间的差异很小。这一结果与先前的实验一致 [CB92]。鉴于优势微乎其微，我们选择多二次径向基函数 $\phi(r) = \sqrt{r^2 + r_0^2}$。

如第 5.2 节所述，作为估计算法的一部分，我们对径向基函数的半径/平滑度参数进行扫描。对于多二次径向基函数，该参数为半径 r_0。图 5 展示了微结构 1 的总误差随 r_0, 的变化情况，其中采用了不同数量的径向基函数中心。当半径 r_0, 达到一定值后，拟合问题会变得病态，因此不再显示误差。请注意，随着径向基函数数量增加、彼此间距缩小，病态问题会在较小的 r_0 值处出现。因此，无法为所有数量的径向基函数选择同一个最优 r_0 值。

大多数材料，刚度误差会出现一些较高的尖峰。这再次表明，要提高精度，需要更高程度的局部控制。

我们还在测试仿真中验证了均匀化弹性模型。我们根据训练数据中的主伸长 λ_1 和伸长方向 θ 拉伸均匀化后的材料，但针对正交拉伸 λ_2 进行优化，使其能量最小化。我们对微结构采用相同的流程来生成训练数据，详见第6节；但这次，我们在均匀化后的材料上执行该流程。我们将正交拉伸 λ_2 的误差作为验证指标。表2列出了全部 11 种材料的结果。请注意，除一种材料外，所有材料的误差都低于 10%。此外，所有仿真都表现稳定。通过准确拟合应力和刚度，我们在实际中获得了稳定的材料模型。

7.2. 拟合误差与验证

我们拟合了所有测试微结构的训练应力和刚度。我们不断增加径向基函数的数量，直到应力和刚度的平均误差达到 5%；但若达到 19 个径向基函数，则停止这一过程。误差的定义以及基于均方根值的归一化方法见（13）。表 2 汇总了所有材料的拟合质量。所有材料的应力误差均低于或略高于 5%，刚度误差则均低于 10%，只有两种材料例外（其误差超过 20%）。对某些材料而言，增加径向基函数的数量只能带来微乎其微的改善。这些情况可能需要更高程度的局部控制，例如非均匀地选择径向基函数中心和光滑半径。

所有材料的详细拟合结果见表5 和表6。这些表格展示了训练数据中应力和刚度所有数值的范数、拟合值以及误差百分比（相对于均方根值进行归一化）。有趣的是，对于许多材料，应力误差始终较低且分布于整个定义域中，尽管某些材料的局部误差较高。另一方面，对于

材料	#径向基函数	应力误差（%）	刚度误差（%）	正交误差（%）
1	7	2.23	7.71	6.39
2	4	2.34	6.28	8.59
3	5	1.87	5.27	6.08
4	19	3.99	6.70	4.30
5	11	2.21	7.15	5.49
6	9	2.35	7.15	6.59
7	4	2.04	7.24	12.02
8	19	6.02	21.3	6.96
9	17	2.59	7.33	3.01
10	19	5.14	5.86	4.52
11	19	5.23	30.8	6.60

表 2： 全部 *11* 种微结构材料的拟合误差（应力和刚度）。最后一列报告了定向拉伸实验中正交拉伸的验证误差，并将结果与微观结构及我们拟合的均质化弹性模型进行比较。

© 2022年 作者 ComputerGraphics Forum © 2022年
TheEurographicsAssociation 和约翰·威立国际出版公司。

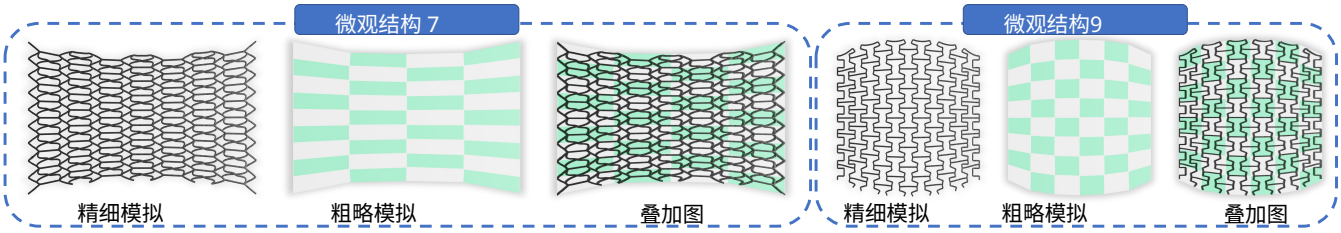

图7： 在此，我们评估模型在非均匀应变变形下的表现。我们使用拟合能量，将高分辨率有限元微观结构模型的模拟结果与粗略有限元模型进行比较。图中展示了数据集中的两种微结构：部分边界施加狄利克雷条件，其余部分施加零牵引力诺伊曼条件。测试的微观结构片区分别由*63*个和*48*个单元块组成，并分别使用含有*4252*个和*5786*个单元的有限元模型进行模拟。粗略模型采用*36*和*48*个四边形网格。如叠加图所示，我们的拟合模型与完整微观结构模拟结果几乎完全吻合。

7.3. 外推

模型的训练数据由规定范围内的均匀单轴拉伸数据构成。因此，我们从多个方面考察并测试外推能力。一种方式是将训练数据中的应变范围外的能量行为进行外推。不过，我们并不预期模型一定能在这方面取得成功，因为微结构材料在训练范围之外的行为可能难以预测。另一种方式是将模型外推至非均匀变形。与前一种情况不同，这是我们预期且至关重要的行为，因为它能使模型适用于实际应用。

为评估应变范围之外的外推能力，我们进行了两项测试。首先，我们使用拉伸范围下半部分的数据进行训练，并测试向上半部分的外推。所有11种材料的训练数据误差为5.27% ± 3.48%，测试数据误差为114.44% ± 60.70%。其次，我们使用一半拉伸方向的数据进行训练，并测试向另一半方向的外推。所有11种材料的训练数据误差为12.39% ± 9.10%，测试数据误差为147.08% ± 131.45%。正如预期，模型无法进行外推。但这并非方法的局限，而是该问题本身固有的挑战，因为训练范围之外的行为可能高度非线性且难以预测。因此，我们在训练过程中对预期的变形范围进行全面采样。

为评估对非均匀应变的外推能力，我们使用高分辨率有限元模拟和采用拟合能量模型的粗略模拟，对大块微结构进行了模拟。图 7 展示了两种不同微结构的对比结果。我们证明，得益于拟合后的能量模型，我们能够用粗略模拟网格（分别包含 36 和 48 个单元）复现复杂微观结构片区（分别包含 4252 和 5786 个有限元单元）的行为。

7.4. 比较

我们的第一项比较旨在分析弹性模型中的某些项是否更为重要。为此，我们在微结构 1 上比较了：(a) 仅使用应力插值函数拟合应力数据；(b) 仅使用刚度插值函数拟合刚度数据；(c) 使用完整方法，同时利用应力和刚度插值函数拟合应力与刚度数据。为确保比较公平，所有情况下使用的参数数量均相同（36 个）：(a) 11 个径向基函数加上应力偏移量；(b) 5 个径向基函数加上刚度偏移量；(c) 3 个径向基函数以及应力和刚度偏移量。如表 3所示，我们的方法在同时拟合应力和刚度方面取得了最佳平衡。仅拟合刚度会导致较大的应力误差。仅拟合应力会产生较大的刚度误差，但更重要的是，这种做法无法控制刚度的质量，可能导致材料模型不稳定。

我们还将我们的方法与直接对弹性能进行插值的模型进行了比较，因此这些模型无法像我们的方法一样直接控制应力和刚度。我们设计了一种形式为 $\Psi = \sum_i \phi_i w_i$的能量模型，其中标量径向基函数系数为w_i [MMO16]。我们比较了（a）使用能量插值拟合能量数据，（b）使用能量插值拟合我们的应力和刚度指标，以及（c）我们的方法。为进行公平比较，所有情况下我们都使用了相同数量的参数（54 个）：（a）和（b）使用 54 个径向基函数，（c）使用 5 个径向基函数以及应力和刚度偏移量。如表4所示，我们的方法在所有情况下都达到了最高精度。

最后，我们还尝试使用一个模型拟合微结构 1 的应力

	应力误差（%）	刚度误差（%）
应力拟合	7.67	30.23
刚度拟合	19.72	18.98
应力 + 刚度拟合	12.28	19.40

表3： 在参数数量相同的情况下，我们评估了仅拟合应力数据、仅拟合刚度数据，以及同时拟合应力和刚度数据的准确性。我们的方法在应力误差和刚度误差之间实现了最佳平衡。

	应力误差（%）	刚度误差（%）
能量拟合，能量插值	17.54	65.67
我们的拟合，能量插值	6.43	16.56
我们的方法	3.06	9.21

表4： 在参数数量相同的情况下，我们评估了采用能量插值拟合能量数据、采用能量插值拟合应力和刚度指标，以及采用我们的方法的准确性。我们的方法达到了最高的准确性。

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》 © 2022年欧洲计算机图形学协会和约翰·威立国际出版公司。

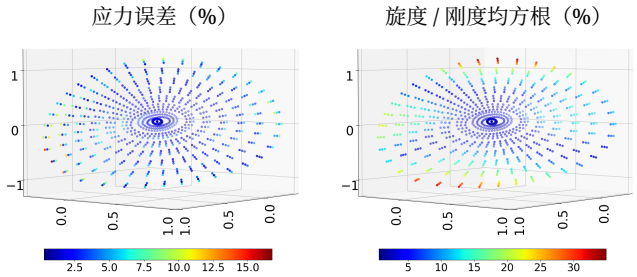

图 8： 我们尝试使用形式为 s 的应力插值函数来拟合微结构 *1* 的应力 $=\sum_i \phi_i w_i$ *[WDK*20]*。使用 *20* 个径向基函数时，应力误差低于 5% （左）。然而，该材料模型远非保守。应力的旋度（以刚度均方根归一化）有时会超过 30% 。

非保守应力插值方法。具体而言，我们将应力 $s = \sum_i \phi_i w_i$表示为向量径向基函数系数 w_i，做法与 Wang 等人 [WDK*20] 相同。优化需要使用 20 个径向基函数，才能将应力误差降至 5% 以下。图 8 左侧显示了应力误差的分布。最重要的是，我们量化了应力的旋度 $\nabla \times s$，并以刚度的均方根对其进行了归一化。请注意，旋度衡量的是海森矩阵的非对称性。如图 8右侧所示，应力旋度有时达到刚度均方根的 30% 以上。

8. 结论与未来工作

本文提出了一种基于高阶插值函数的新型弹性能量模型形式。这些插值函数将标量径向基函数扩展为可对能量函数的导数（即应力和刚度）进行局部控制。我们证明，将该方法用于二维微结构均匀化时，我们的形式比以往方法具有更高的精度。最优高阶径向基函数插值函数的设计仍是数值分析领域的活跃研究课题 [DFW21]，我们的方法也可应用于一般的高阶插值问题，而不仅限于弹性仿真。为便于复现，项目网页提供了示例实现：http://mslab.es/projects/HiOInterp。

我们还发现了一些可为未来研究提供方向的局限性。具体而言，当应力或刚度存在强烈的局部不连续性时，我们当前的估计方法似乎会受到限制。可以通过以非均匀密度和非均匀半径分布径向基函数中心来解决这一问题。同样，自适应地对变形范围进行采样也会有所助益，在非线性较高的区域增加训练样本。总的来说，若能找到使所得能量的参数化更加紧凑的方法，将会有所裨益。

我们仅将这一公式和方法应用于二维微结构的面内变形。可能的扩展包括：三维微结构、薄壳的弯曲响应（这是将该方法应用于三维布料仿真所必需的）、塑性和/或黏性。其中一些扩展可能较为直接，例如三维微结构，或通过插值耗散势来模拟黏性 [SBO18]；其他扩展则尚不明确。

最后，在基于示例的均质化之外的其他应用场景中采用我们的方法，也会很有意思。这些应用可以包括根据其他类型的数据估计材料（例如，力-变形示例，或稀疏的时空变形观测），也可以是在材料探索中使用该模型。从真实世界的力-变形示例中获得均质化应变十分直接。应力可以根据边界力 [SMGT18]获得。刚度的获取并非立竿见影，但可以通过增量变形进行有限差分近似来获得。

致谢。 我们感谢匿名审稿人提出的宝贵意见，也感谢 Igor Santesteban 在渲染管线方面提供的帮助。本研究部分由欧洲研究委员会资助（ERC-2017-CoG-772738 TouchDesign）。

参考文献

[BBO*09] BICKEL B.、BÄCHER M.、OTADUY M. A.、MATUSIK W.、PFISTER H.、GROSS M.：非线性异质软组织的捕获与建模。载于《ACM SIGGRAPH 2009论文集》（美国纽约州纽约市，2009年），SIGGRAPH '09，计算机协会。1, 2[BBO*10] BICKEL B.、BÄCHER M.、OTADUY M. A.、LEE H. R.、PFISTER H.、GROSS M.、MATUSIK W.：具有预期变形行为的材料设计与制造。《ACM图形学汇刊》29卷第4期（2010年）。2[BNPB13] BHATIA H.、NORGARD G.、PASCUCCI V.、BREMER P.-T.：亥姆霍兹-霍奇分解——综述。《IEEE可视化与计算机图形学汇刊》19卷第8期（2013年），1386–1404。3[CB92] CHEN S.、BILLINGS S. A.：用于非线性动态系统建模与辨识的神经网络。《国际控制杂志》56卷第2期（1992年），319–346。7[CBW*18] CHEN J.、BAO H.、WANG T.、DESBRUN M.、HUANG J.：利用不连续形函数进行数值粗化。《ACM图形学汇刊》37卷第4期（2018年）。2[CCG91] CHEN S.、COWAN C.、GRANT P.：用于径向基函数网络的正交最小二乘学习算法。《IEEE神经网络汇刊》2卷第2期（1991年），302–309。5[DFW21] DRAKE K.、FUSELIER E.、WRIGHT G.：用于散度自由或旋度自由径向基函数逼近的单位分解法。《SIAM科学计算杂志》43卷（2021年），A1950–A1974。9[Fus08] FUSELIER E.：散度自由和旋度自由径向基函数插值函数的Sobolev型逼近率。《数学计算》77卷（2008年），1407–1423。3[GSS*15] GAST T. F.、SCHROEDER C.、STOMAKHIN A.、JIANG C.、TERAN J. M.：用于大时间步长的优化积分器。《IEEE可视化与计算机图形学汇刊》21卷第10期（2015年），1103–1115。2[GY00] GOMM J.、YU D.：采用递归正交最小二乘训练选择径向基函数网络中心。《IEEE神经网络汇刊》11卷第2期（2000年），306–314。5[Kim20a] KIM T.：Baraff-Witkin布料的有限元公式。《计算机图形论坛》39卷第8期（2020年），171–179。2[Kim20b] KIM T.：Baraff-Witkin布料的有限元公式。《计算机图形论坛》39卷第8期（2020年），171–179。2

© 2022年 作者 ComputerGraphics Forum © 2022年 TheEurographicsAssociation 和 John Wiley & Sons Ltd.

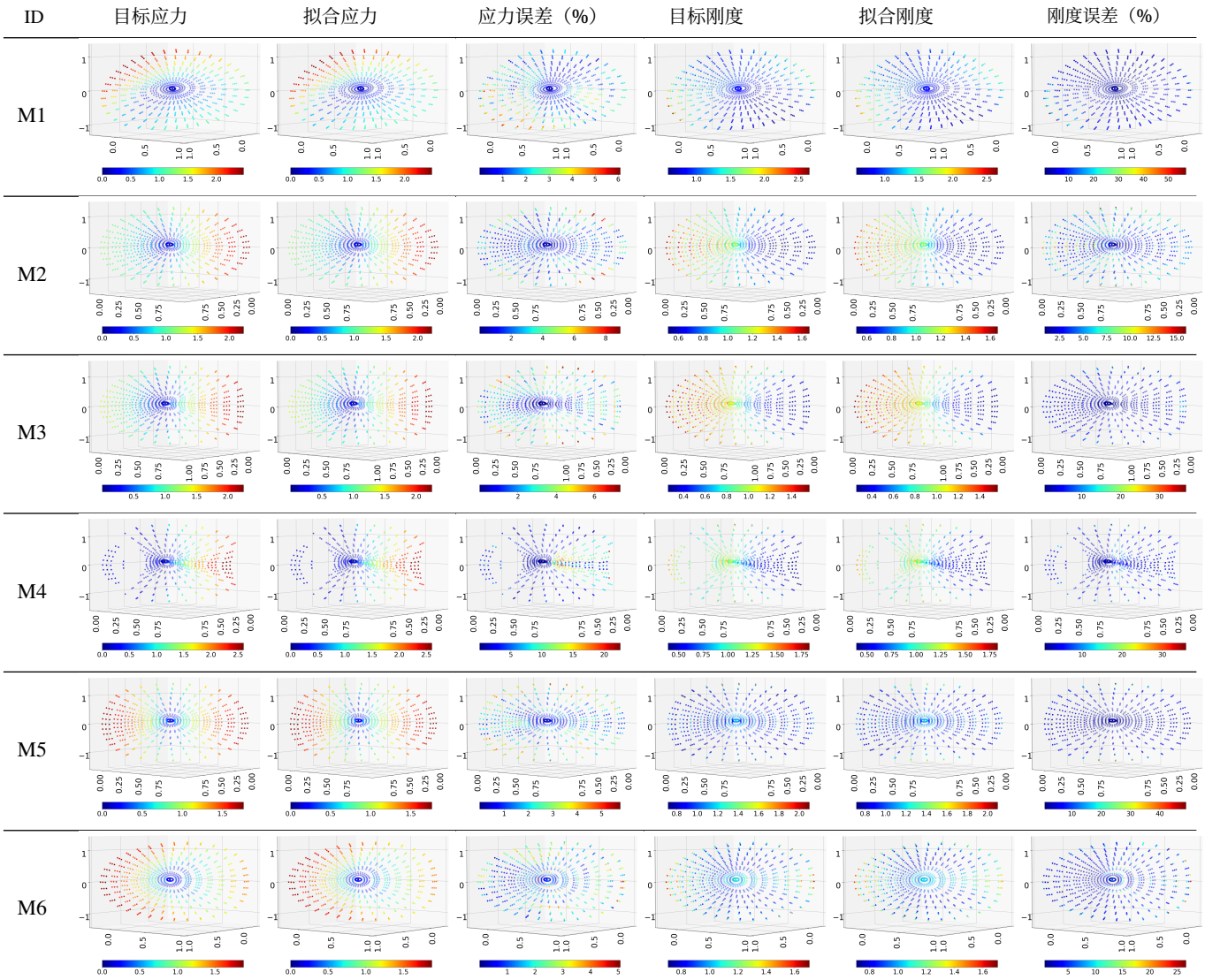

表5： 材料*1*至*6*的目标应力与拟合应力及刚度对比。颜色表示应力、刚度或误差的范数。

[KLPCP18] KONAKOVI´C-LUKOVI´C M., PANETTA J., CRANE K., PAULY M.：通过可编程负泊松比材料快速部署曲面。*ACM*图形学汇刊*37*卷第4期（2018年）。2[KMOD09] KHAREVYCH L.、MULLEN P.、OWHADI H.、DESBRUN M.：非均匀弹性材料的数值粗化。*ACM*图形学汇刊*28*卷第3期（2009年），51:1–51:8。2[LB15] LI Y.、BARBIC J.：稳定各向异性材料。*IEEE*可视化与计算机图形学汇刊*21*卷第10期（2015年），1129–1137。2[LS16] LIU X.、SHAPIRO V.：增材制造结构中材料属性的均质化。计算机辅助设计*78*卷（2016年），71–82。2[MBT*12] MIGUEL E.、BRADLEY D.、THOMASZEWSKI B.、BICKEL B.、MATUSIK W.、OTADUY M. A.、MARSCHNER S.：数据驱动的布料仿真模型估计。《计算机图形论坛》*31*卷第2部分第2期（2012年），519–528。2[MMO16] MIGUEL E.、MIRAUT D.、OTADUY M. A.：建模与估计基于能量的超弹性对象。《计算机图形论坛》35，2（2016年），385–396。1，2，8[NKJF09] NESME M.、KRY P. G.、JERÁBKOVÁ L.、FAURE F.：为嵌入式可变形模型保留拓扑和弹性。ACM图形学汇刊28，3（2009年），52:1–52:9。2[NW94] NARCOWICH F. J.、WARD J. D.：通过矩阵值条件正定函数实现广义Hermite插值。《计算数学》63，208（1994年），661–687。3[PZM*15] PANETTA J.、ZHOU Q.、MALOMO L.、PIETRONI N.、CIGNONI P.、ZORIN D.：用于增材制造的弹性纹理。ACM图形学汇刊34，4（2015年）。2[SBO18] SÁNCHEZ-BANDERAS R. M.、OTADUY M. A.：弹性变形的应变率耗散。《计算机图形论坛》37，8（2018年），161–170。9[SBR*15] SCHUMACHER C.、BICKEL B.、RYS J.、MARSCHNER S.、DARAIO C.、GROSS M.：用于控制三维打印弹性的微结构。ACM图形学汇刊34，4（2015年），136:1–136:13。1，2

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》 © 2022年欧洲计算机图形学协会与约翰·威立国际出版公司。

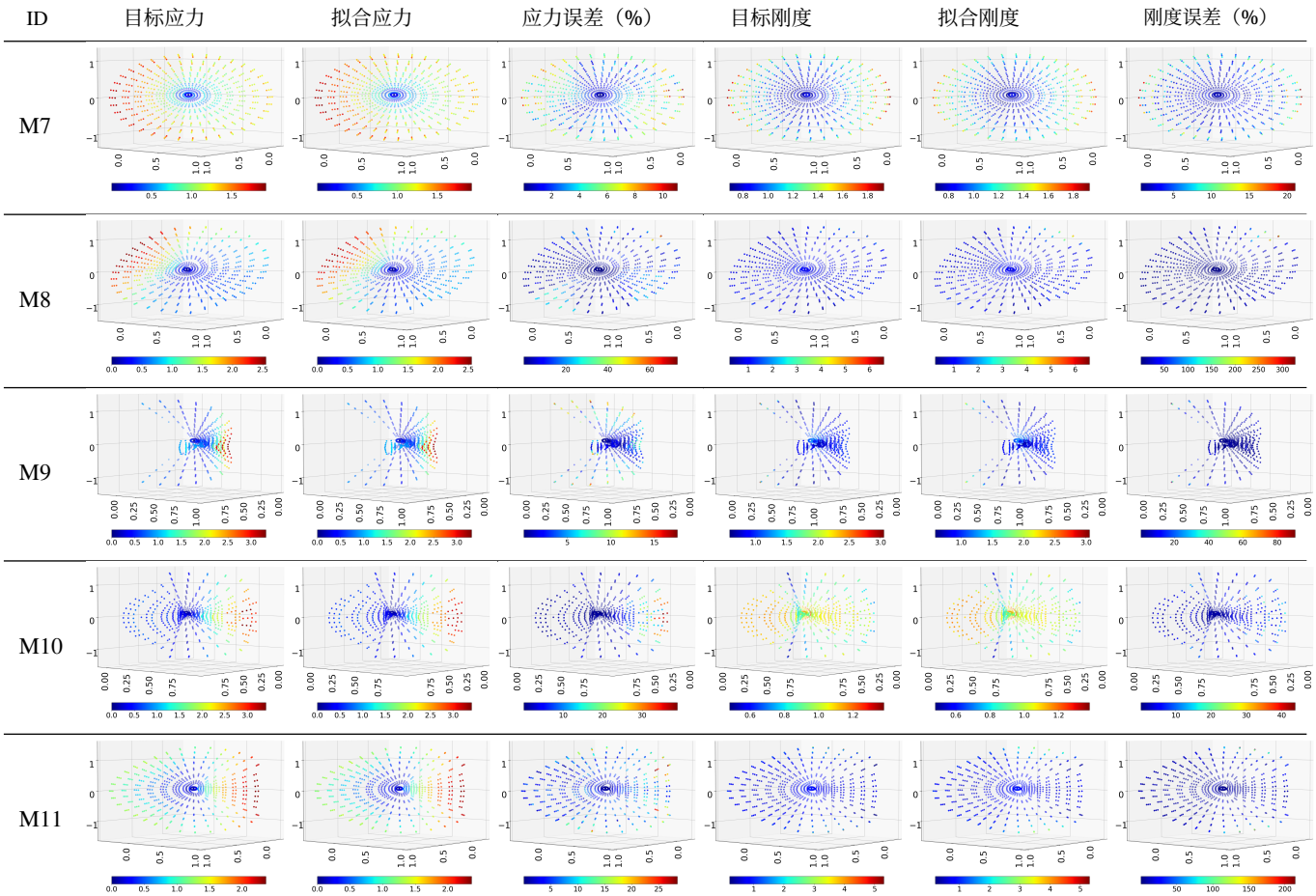

表 6： 材料 *7* 至 *11* 的目标应力和拟合应力及刚度的比较。颜色表示应力、刚度或误差的范数。

[SGK18] SMITH B., GOES F. D., KIM T.: 稳定的新胡克肉体模拟。 *ACM*图形学汇刊*37*，2（2018年3月）。 2

[SMGT18] SCHUMACHER C.、MARSCHNER S.、GROSS M.、THOMASZEWSKI B.：《结构化片材的力学表征》。ACM图形学汇刊 37，4（2018年）。2、5、6、9[SNW20] SPERL G.、NARAIN R.、WOJTAN C.：《均质化纱线级布料》。ACM图形学汇刊（TOG）39，4（2020）。1、2、5[SSBL*22] SPERL G.、SÁNCHEZ-BANDERAS R. M.、LI M.、WOJTAN C.、OTADUY M. A.：《生产织物的纱线级模拟模型估计》。ACM图形学汇刊（TOG）41，4（2022年）。1、6[TREO16] TORRES R.、RODRÍGUEZ A.、ESPADERO J. M.、OTADUY M. A.：《与协转粗化模型的高分辨率交互》。ACM图形学汇刊 35，6（2016年），211:1–211:11。2[WDK*20] WANG B.、DENG Y.、KRY P.、ASCHER U.、HUANG H.、CHEN B.：《学习弹性本构材料和阻尼模型》。Computer Graphics Forum 39，7（2020），81–91。1、2、9[WOR11] WANG H.、O'BRIEN J. F.、RAMAMOORTHI R.：《布料的数据驱动弹性模型：建模与测量》。载于《ACM SIGGRAPH 2011 论文集》（美国纽约州纽约市，2011年），SIGGRAPH '11，美国计算机协会。1、2、6[XSZB15] XU H.、SIN F.、ZHU Y.、BARBI ˇC J.：《使用主伸长进行非线性材料设计》。ACM图形学汇刊 34，4（2015年）。1、2

附录 A： RBF 导数

我们将径向基函数 ϕ_i 关于其半径 r_i 的导数记为：

$$\phi_i' \equiv \frac{\partial \phi_i}{\partial r_i}, \quad \phi_i'' \equiv \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial {r_i}^2}. \tag{15}$$

对于更高阶导数，定义径向单位向量 $u_i = {}^1_{r_i}\Delta x_i$会更方便。于是，半径 r_i 关于定义域x 的导数为：

$$\frac{\partial r_i}{\partial x} = u_i^T, \quad \frac{\partial^2 r_i}{\partial x^2} = \frac{\partial u_i}{\partial x} = \frac{1}{r_i}\left(I - u_i u_i^T\right). \tag{16}$$

根据链式法则，(15) 和 (16，径向基函数 ϕ_i 关于定义域x 的导数为：

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial x} = \phi_i' \frac{\partial r_i}{\partial x} = \phi_i' u_i^T. \tag{17}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} &= \phi_i'' \frac{\partial r_i}{\partial x}^T \frac{\partial r_i}{\partial x} + \phi_i' \frac{\partial^2 r_i}{\partial x^2} \\ &= \phi_i'' u_i u_i^T + \frac{\phi_i'}{r_i}\left(I - u_i u_i^T\right).\end{aligned} \tag{18}$$

© 2022年 作者 ComputerGraphics Forum © 2022年 TheEurographicsAssociation 和 约翰·威立国际出版公司

附录 B： 径向基函数梯度的等价性

给定一个径向基函数 ϕ_i，它由函数 ϕ 和中心x_i的某种选择定义，存在另一个径向基函数 ψ_i，其函数选择为 ψ，使得：

$$\nabla\phi_i = \psi_i \Delta x_i. \tag{19}$$

作为推论，任何基于径向基函数梯度的径向基函数插值，也可以表示为直接基于径向基函数与径向向量乘积的径向基函数插值。这一定义在很大程度上简化了 RBF 导数的计算。

为证明其等价性，根据（17）可得：

$$\nabla\phi_i = \frac{\partial \phi_i}{\partial x}^T = \phi_i' u_i = \frac{\phi_i'}{r_i}\Delta x_i. \tag{20}$$

由此可得

$$\psi_i = \frac{\phi_i'}{r_i}. \tag{21}$$

© 2022年 作者 《计算机图形论坛》 © 2022年欧洲计算机图形学协会与约翰·威立国际出版公司。