螺旋曲面状超材料：拓扑优化与深度学习

Asha Viswanath[1,2], Diab W Abueidda[4,5], Mohamad Modrek[1,3], Kamran A Khan[1,2*], Seid Koric[4,5], Rashid K. Abu Al-Rub[1,3]

[1]先进数字与增材制造中心，哈利法科技大学，阿布扎比，邮政信箱127788，阿联酋，[2]航空航天工程系，哈利法科技大学，阿布扎比，邮政信箱127788，阿联酋，[3]机械工程系，哈利法科技大学，阿布扎比，邮政信箱127788，阿联酋，[4]机械科学与工程系，伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，美利坚合众国，[5]美国国家超级计算应用中心，伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，伊利诺伊州61801，美国

*通讯作者：kamran.khan@ku.ac.ae

摘要

具有数学可控拓扑结构的三周期极小曲面（TPMS）超材料，与均匀结构相比，表现出更优异的力学性能。此类超材料的晶胞拓扑结构还可进一步优化，以提升特定应用所需的力学性能。然而，这种逆向设计涉及拓扑优化中的多次高成本三维有限元分析，因此尚未有人尝试。近年来，数据驱动模型作为超材料几何设计中的代理模型日益受到关注。本文构建了一种基于深度学习的代理模型，用于优化 Schoen 螺旋面三周期极小曲面单胞的拓扑结构，从而无需大量计算即可获得满足所需性能的最优三维 TPMS 单胞拓扑结构。我们采用一种新颖的体素算法、基于均匀化的拓扑优化方法以及 Heaviside滤波器，设计类螺旋曲面单胞，以获得 0-1 配置的优化后密度。我们使用少量优化数据作为输入—输出样本，通过三维卷积神经网络模型监督学习拓扑优化过程。随后，这些模型可用于即时预测任意拓扑参数对应的优化后单胞几何形状，

从而免去未来设计中执行拓扑优化的需要。模型的高精度由较低的均方误差指标和较高的 Dice系数指标得以验证。这种加速三维超材料设计的方法，使得设计具有多目标属性或适用于多尺度应用、且涉及超材料复杂几何结构的高计算成本问题成为可能。

关键词：超材料、三周期极小曲面、螺旋曲面、均匀化、拓扑优化、深度学习、代理模型。

1. 引言

近年来，超材料已成为材料科学家眼中的“圣杯”，因为它们在物理性质方面展现出丰富的可能性，并可广泛应用于机械、热学、声学、光学、电磁学、生物医学等领域 [1],[2],[3],[4],[5]。工程师对其力学性能的研究显示出巨大的应用潜力：其独特的结构构型可根据所需几何形状进行定制，从而使结构的性能超越材料本身的能力 [6],[7],[8]。其引人注目的特点在于，极端性能可以通过拓扑加以控制。

这些材料基元的微结构称为代表性单胞（RUC），它决定了材料的力学性质和物理性质 [9]。满足某些期望性质的超材料 RUC 设计问题称为“逆向设计”问题，通常通过实验和/或拓扑优化（TO）来解决 [10],[11]。拓扑优化旨在针对超材料的特定目标函数，获得微结构的最优布局，例如最大化体积模量/剪切模量或最小化泊松比，同时满足体积约束等条件[12]。这一研究领域已在二维 [13],[14] 和三维

微结构方面得到广泛研究，并且也有相应的 MATLAB 代码可供使用 [15]。微结构可以采用初始设计，也可以不采用。文献中使用的一些初始设计较为简单，例如在中心开孔或分布少量空洞；经过拓扑优化后，这些设计会形成满足预期目标函数的新拓扑结构 [14]。

三周期极小曲面（TPMS）是一种源自微分几何的概念，

这是微结构材料代表性单元所采用的拓扑结构之一。这些曲面在给定边界条件下使局部表面积最小化，并具有曲面上每一点的平均曲率均为零的性质 [16]。它们将单胞区域划分为两个或多个互不相交的区域。当在三维空间中周期性重复时，其引人入胜的拓扑结构使其极具吸引力。三周期极小曲面可以进行数学控制，并表现出一些独特的性质，例如较大的表面积体积比 [17]。制造业的发展，例如增材制造的应用 [18], 也促进了其制造，而在此之前，传统方法制造困难一直是限制其应用的主要因素。由于其几何形状，许多研究通过对三周期极小曲面结构的性能进行实验研究，探讨了其设计方法 [19],[20],[21],[22],[23],[24]。本文研究螺旋面结构这一特定的三周期极小曲面。螺旋曲面三周期极小曲面结构被应用于多种领域，包括骨科植入物，因为其能够高效传递载荷并连续填充空隙空间 [25] ；还应用于催化转化器，因为热量能够通过空隙空间高效传递 [26]。螺旋面结构也存在于自然界的皂膜 [27] 和蝴蝶翅膀 [28]中。在本文中，我们提出了一种新颖的方法：在边界条件和体积约束下，利用拓扑优化针对期望的力学性能设计“类螺旋曲面”单胞。这里，我们以螺旋面结构作为初始设计，然后对其进行优化

以特定的目标函数为优化目标，从而得到具有优化性能的类螺旋曲面结构。本文讨论的新方法以体素形式捕获三周期极小曲面的表面几何形状，并对其进行拓扑优化，生成与螺旋曲面相似、但不一定具有所有点平均曲率均为零这一性质的设计。换言之，对体素化螺旋曲面等值面的初始设计进行拓扑优化，以获得材料分布得到改善、满足所需目标函数和体积约束的类螺旋曲面最终结构。

采用上述方法进行三维单胞设计时面临的主要挑战，是拓扑优化所需的计算时间；该时间会随着单胞中有限元数量或网格尺寸（本研究中的体素数量）的增加而呈指数增长。例如，在工作站上，对三维方向均包含 32 个单元的网格进行一次优化过程迭代，约需 67 秒，而收敛可能需要约 200–800 次迭代！为降低计算成本，我们寻求一种可替代优化过程的模型，该模型能够利用少数几次优化运行所获得的信息，从而作为一种计算成本低廉的单胞设计替代方案。近年来，机器学习模型已成为代理模型，可减轻计算密集型设计的负担，并使得在笔记本电脑上进行设计成为可能。其中，文献中大量关于深度学习模型的研究（[29],[30],[31] [32],[33],[34],[35],[36],[37] ,[38],[39]）启发作者将其用于基于三周期极小曲面的超材料设计这一拓扑优化场景。文献中已使用基于二维卷积神经网络（CNN）的深度学习模型进行二维单胞生成[40], [41],[42]。研究发现，卷积神经网络在图像识别任务中具有较强的鲁棒性；研究者利用这一优势，通过将棋盘格复合材料作为图像输入卷积神经网络，实现在整个体积分数范围内对复合结构力学性能的定量预测，

受这些研究启发，我们将这些基于卷积神经网络的模型扩展到三维单胞拓扑优化设计预测。除作者本人外，文献中尚无人尝试通过拓扑优化来优化三周期极小曲面几何形状，以设计超材料单胞并实现预期目标函数 [43]。本研究在作者此前的工作基础上作了两方面改进：1）此前的工作仅涉及一个拓扑优化参数（体积分数）和一个目标函数（体积模量）；2）最优密度未遵循 0-1 配置，因此卷积神经网络算法未能很好地学习这些密度，导致卷积神经网络模型的均方误差较高。本研究针对此前工作的这一不足，探讨采用此类加速三维拓扑优化进行陀螺三周期极小曲面单胞设计的潜在应用。

本文结构如下：第2节介绍一种基于三维均匀化的拓扑优化方法，用于生成类陀螺结构的晶胞几何形状并进行设计。第3节详细介绍代理深度学习模型，包括数据生成过程和所用三维卷积神经网络的架构。第4节列出本研究中各种近似所产生的不同误差，并说明如何对其进行处理。第5节讨论所提出模型的结果。最后一节总结从该模型中获得的见解以及本研究的未来方向。

2. 方法

2.1 陀螺三周期极小曲面的基于体素的架构

首先讨论螺旋曲面微结构的生成。图1a展示了螺旋面结构的等值面，以及其单胞和周期结构（图1b）。该曲面由以下水平集近似方程生成

$$\sin\frac{2\pi x}{L_x}\cos\frac{2\pi y}{L_y}+\sin\frac{2\pi y}{L_y}\cos\frac{2\pi z}{L_z}+\sin\frac{2\pi z}{L_z}\cos\frac{2\pi x}{L_x}=c \quad (1)$$

其中，c 表示水平集值，可以是常数，也可以是 x、y 和 z 的函数。L_x、L_y 和 L_z 分别表示三个方向上的晶胞长度。

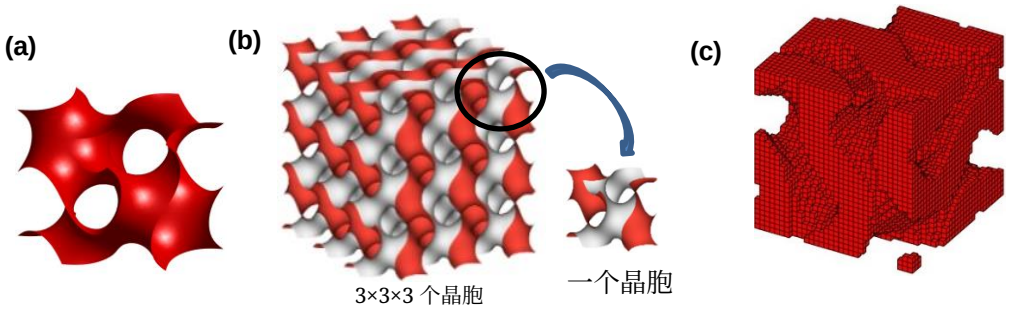


图 1. a) 螺旋曲面的 c = 0等值面，b) 螺旋曲面的代表性单元及其周期结构

[4], c) 体素化 Gyroid RUC

由方程 (1) 生成的等值面（其中 c = 0 ）通过传递等值面的顶点和边的信息，输入体素生成算法 [44] 。生成的体素化代表性单元（如图 1c 所示）在每个方向上的网格尺寸均为 32 个体素。如果等值面的边（由等值面信息获取）有任何部分穿过某个体素，则将该体素赋值为 1（黑色）；否则赋值为 0（白色），表示螺旋曲面内部的空隙空间。由于定义等值面的边与顶点交错连接，体素算法使原本较薄的等值面变厚。图 2 所示的主要二维切片有助于直观呈现体素如何捕捉螺旋曲面的弯曲内表面。体素化代表性单元的相对密度为 58.7%，该数值通过黑色体素数量除以体素总数（32 x 32 x 32）计算得出。以这种螺旋曲面微结构作为初始设计，我们可以通过三维

基于均匀化的拓扑优化方法来最大化体积模量或剪切模量 [15]。当介绍卷积神经网络如何学习具有此类几何形状的代表性单元后，采用这种光滑表面的体素化离散所具有的广泛优势将更加明了。

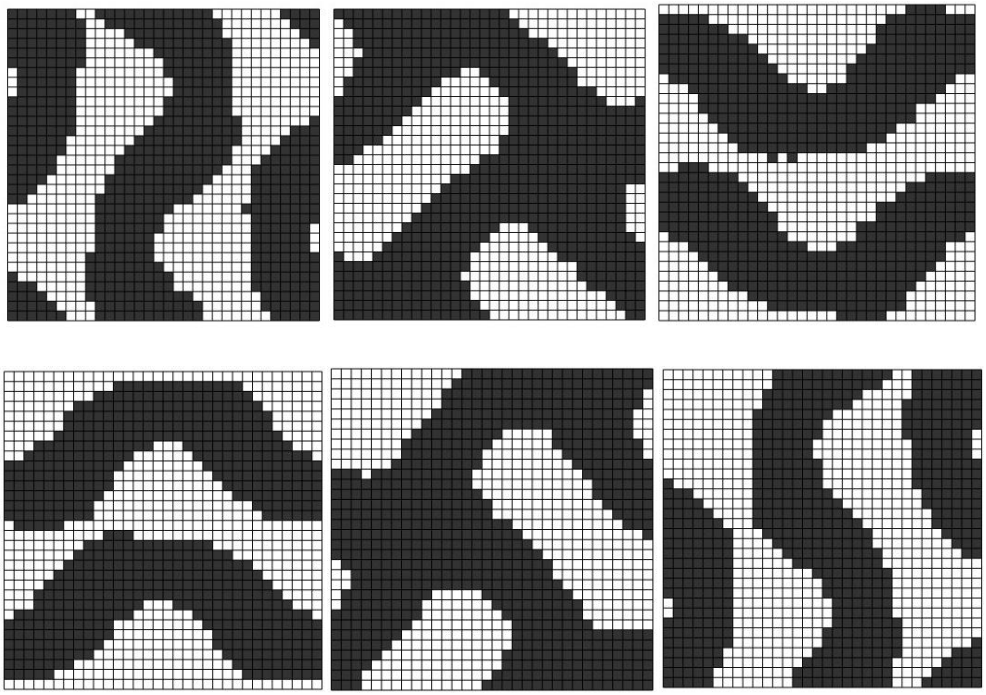


图 2：体素化 Gyroid RUC 的 1st、 4th、 8th、 16th、 24th 和 32nd 2D 切片

2.2 基于三维均匀化的拓扑优化

本研究采用基于均匀化的微结构设计拓扑优化方法，设计针对最大体积模量或剪切模量进行优化的三周期极小曲面超材料 [15]。周期性胞元材料或复合材料的均匀化方法通过对其代表性单元施加周期性边界条件，计算其有效性能 [45] 。随后将代表性单元的这一有效性能用于拓扑优化算法，以最大化或最小化所需的目标函数。针对均质化代表性单胞所采用的拓扑优化算法是基于密度的固体各向同性材料惩罚（SIMP）方法 [46], [47] ，因为所提出的单胞体素化几何有助于计算密度，其中每个体素在 SIMP 方法中均作为一个有限元

单元。此处简要讨论基于能量的均匀化方法。

给定单胞的体积 $|Y|$，均匀化刚度张量 E_{ijkl}^{H} 由体积被积函数给出

$$E_{ijkl}^{H}=\frac{1}{|Y|}\int_{Y}E_{pqrs}\,\varepsilon_{rs}^{A(kl)}\varepsilon_{pq}^{A(ij)}dY \tag{2}$$

$\varepsilon_{pq}^{A(ij)}=\varepsilon_{pq}^{o(ij)}-\varepsilon_{pq}^{*(ij)}$、$E_{pqrs}$ 表示局部刚度张量，$\varepsilon_{pq}^{o(ij)}$ 是初始宏观应变场，$\varepsilon_{pq}^{*(ij)}$表示局部变化应变场。在三维情况下，给定六个单位测试应变 $\varepsilon_{pq}^{o(ij)}$，对应的独立测试应变为：$(1,0,0,0,0,0)^{\mathrm{T}}$、$(0,1,0,0,0,0)^{\mathrm{T}}$、$(0,0,1,0,0,0)^{\mathrm{T}}$、$(0,0,0,1,0,0)^{\mathrm{T}}$、$(0,0,0,0,1,0)^{\mathrm{T}}$ 和 $(0,0,0,0,0,1)^{\mathrm{T}}$。当这些单位测试应变作用于单胞时，通过求解带周期性边界条件的平衡方程，获得单胞的未知应变场 $\varepsilon_{pq}^{*(ij)}$ [15]。代表性单元被划分为 N 个有限元，其 6×6 单元刚度矩阵 $\boldsymbol{k}_e$ 和 $\boldsymbol{u}_e^{A(ij)}$ 为对应于 $\varepsilon^{o(ij)}$的单元位移。因此，方程 (2) 中被积函数的有限元求和可表示为 $\boldsymbol{k}_e$ 和 $\boldsymbol{u}_e$，而后者又可用单元互能 Q_{ijkl}^{e}[10] 表示如下：

$$E_{ijkl}^{H}=\frac{1}{|Y|}\sum_{e=1}^{N}\left(\boldsymbol{u}_e^{A(ij)}\right)^{T}\boldsymbol{k}_e\boldsymbol{u}_e^{A(kl)}=\frac{1}{|Y|}\sum_{e=1}^{N}Q_{ijkl}^{e} \tag{3}$$

该均匀化刚度张量 [15] 的展开形式为

$$\begin{bmatrix}E_{1111}^{H} & E_{1122}^{H} & E_{1133}^{H} & E_{1112}^{H} & E_{1123}^{H} & E_{1131}^{H}\\ E_{2211}^{H} & E_{2222}^{H} & E_{2233}^{H} & E_{2212}^{H} & E_{2223}^{H} & E_{2231}^{H}\\ E_{3311}^{H} & E_{3322}^{H} & E_{3333}^{H} & E_{3312}^{H} & E_{3323}^{H} & E_{3331}^{H}\\ E_{1211}^{H} & E_{1222}^{H} & E_{1233}^{H} & E_{1212}^{H} & E_{1223}^{H} & E_{1231}^{H}\\ E_{2311}^{H} & E_{2322}^{H} & E_{2333}^{H} & E_{2312}^{H} & E_{2323}^{H} & E_{2331}^{H}\\ E_{3111}^{H} & E_{3122}^{H} & E_{3133}^{H} & E_{3112}^{H} & E_{3123}^{H} & E_{3131}^{H}\end{bmatrix} \tag{4}$$

随后，对均质化代表性单胞进行拓扑优化中的SIMP算法。每个有限元的单元密度 $\rho_e \in [0,1]$ 是设计变量，而由密度表示的单元杨氏模量 $\boldsymbol{k}_e$ 为

$$E_e(\rho_e) = E_{min} + (E_o - E_{min})\rho_e^p \tag{5}$$

其中，E_o = 1GPa 为实体单元的杨氏模量，$E_{min} = 1e-9$ GPa 为引入以避免刚度矩阵出现奇异性的空单元杨氏模量。此处惩罚因子 p 取 5.0。为避免网格依赖性和棋盘格现象导致的数值不稳定性，采用密度滤波方法 [48], ，根据伪密度 $\boldsymbol{\eta}$ 计算滤波密度 $\boldsymbol{\rho}$ ，用于优化。密度之间的关系如下 [49]:

$$\boldsymbol{\rho} = \overline{\boldsymbol{W}}\boldsymbol{\eta}$$

$$w_{ij} = \max\left(0, r_{min} - \left\|\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{X}_j\right\|^2\right) \tag{6}$$

$$\bar{w}_{ij} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_{r_{min}}} w_k} w_{ij}$$

其中，r_{min} 为滤波半径，$\bar{w}_{ij}$ 为构成归一化矩阵$\overline{\boldsymbol{W}}$的归一化权重系数。$\boldsymbol{X}_i$为单元 i 形心的坐标。现在，优化问题可表述为

$$\begin{aligned} \max_{\rho}: \quad & f\left(E_{ijkl}^H(\boldsymbol{\rho})\right) \\ \text{such that}: \quad & \boldsymbol{K}\boldsymbol{U}^{A(ij)} = \boldsymbol{F}^{A(ij)} \\ & V(\boldsymbol{\eta}) - V_f \le 0 \\ & 0 \le \rho_e \le 1 \end{aligned} \tag{7}$$

K——全局刚度矩阵，$\boldsymbol{U}^{A(ij)}$——对应于应变工况 (ij) 的全局位移，$\boldsymbol{F}^{A(ij)}$——外力向量，$V(\boldsymbol{\eta})$——单元体积与区域总体积之比所得的体积分数，该值不得超过预设的限制值 V_f。本研究采用的目标函数是最大化体积模量和剪切模量，其表达式为[15]

$$f_b\left(E_{ijkl}^H(\boldsymbol{\rho})\right) = \sum_{i,j=1}^{3} E_{iijj}^H \tag{8}$$

$$f_s\left(E_{ijkl}^H(\boldsymbol{\rho})\right) = \sum_{i,k=1}^{3} E_{ijkl}^H (i \neq j \,\&\, k \neq l) \tag{9}$$

灵敏度通过伴随法计算，表达式如下：

$$\frac{\partial E_{ijkl}^H}{\partial \rho_e} = \frac{1}{|Y|} p\rho_e^{p-1}(E_o - E_{min})\left(\boldsymbol{u}_e^{A(ij)}\right)^T \boldsymbol{k}_o \boldsymbol{u}_e^{A(kl)} \tag{10}$$

其中，$\boldsymbol{k}_o$ 为单元刚度矩阵。

使用 Heaviside滤波器 [50]，可以使密度取 0 或 1。这在本文后续处理机器学习方法时尤为有用，因为相比具有中间密度的形态，0-1 形态更容易学习。该滤波在密度滤波器中引入 Heaviside阶跃函数，使用以下平滑函数，使物理密度 ρ_e=1 （当 $\rho_e > 0$ 时），而在 $\rho_e = 0$ 时为零：

$$\boldsymbol{\rho^H} = 1 - e^{-\beta\boldsymbol{\rho}} + \boldsymbol{\rho} e^{-\beta} \tag{11}$$

这里，参数 β 控制近似的平滑度。当 β =0 时，公式（11）与公式（6）相似；随着 β 趋于无穷大，近似将趋近于真正的 Heaviside阶跃函数。为避免局部极小值并确保优化过程中的可微性，我们采用延续方案来增大 β

，使其逐渐从 1 增至 512，每经过 50 次迭代或连续两次设计中变量的变化小于 0.01 时，就将其加倍。

与优化后的几何结构对应的体素二维切片如图3所示。使用 top3d 应用软件 [51] 对体素化 Gyroid RUC 进行平滑处理，并展示了不同相对密度下的结果，如图4所示。

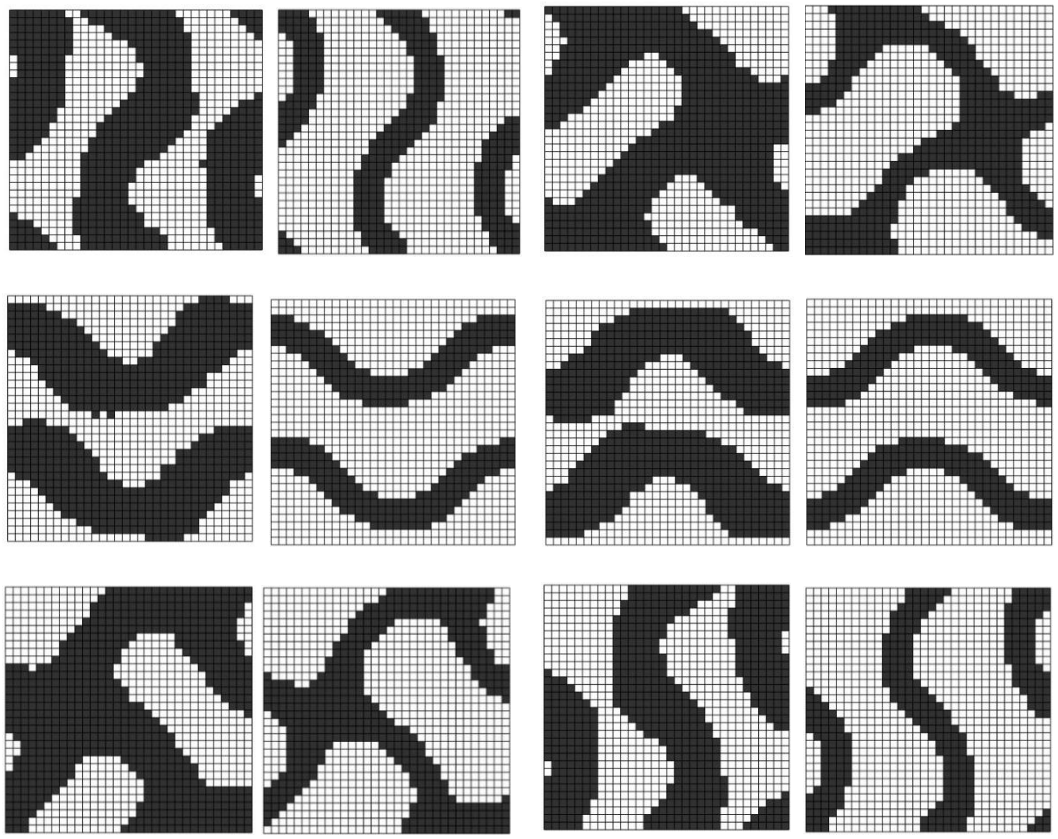


图3：初始和优化后（34%）的体素化1st、 4th、 8th、 16th、 24th 及32nd 2D切片

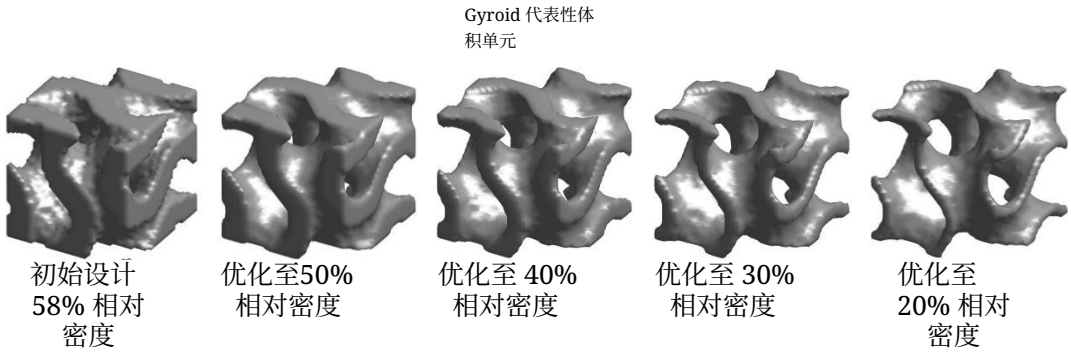


图4：不同相对密度下优化并平滑处理的体素化 Gyroid RUC

3. 代理深度学习模型

上一节所述的体素化 Gyroid RUC 的基于均匀化的拓扑优化存在一个缺陷：计算耗时。这确实是任何三维单胞设计面临的主要挑战之一；随着单胞网格尺寸（本研究中为体素数量）的增大，计算耗时会呈指数增长。当目标函数的计算变得耗时，“维数灾难”便会出现 [52], ，因此有必要寻求确定目标函数的替代方法。在可以采用成本较低的替代方案来评估目标函数时，代理建模方法 [53] 便显得尤为适用。这些模型能够从少量优化运行所提供的信息中学习，以复现这一过程，从而可作为一种计算成本较低的替代方案，用于优化单胞设计。近年来，数据驱动模型已被证明是有效的代理模型，可通过训练学习算法，减轻此类计算密集型设计的负担。在关于此类数据驱动模型的大量文献中，本研究选择了基于卷积神经网络的模型，因为这类深度神经网络在图像识别方面已取得显著成功；图像在二维中以像素表示，在三维中则以体素表示。因此，通过体素算法生成 Gyroid RUC 的总体目的也就更有意义了。

本节详细介绍如何构建一个基于深度学习的模型，作为代理模型，用于针对任意体积分数和滤波半径对螺旋曲面微结构进行拓扑优化。该模型将预测指定体积分数和滤波半径下具有最大体积模量/剪切模量的最优三维螺旋曲面单胞，无需进行任何传统拓扑优化。这是通过训练

基于深度学习的卷积神经网络模型实现的，训练数据为若干针对不同随机体积分数和滤波半径优化得到的拓扑结构。然而，这种训练需要通过多次拓扑优化运行生成数据，这是为了在后续设计中减少拓扑优化运行次数所付出的代价。

3.1 数据生成实验设计（DoE）

工作流程的流程图如图 5 所示。所需数据通过运行 MATLAB 代码计算生成，该代码包含上一节所述的均匀化性能三维拓扑优化。根据流程图，首先由公式 (1) 生成螺旋曲面的等值面。此处，我们使用了 c=0 的值。随后，通过将单胞离散为三维有限元（每个单元称为一个体素），将等值面体素化；如果等值面穿过某个体素，则将该体素的密度设为 1，否则设为 0。这些体素密度用作拓扑优化问题的初始设计，优化目标是最大化体积模量或剪切模量。本文研究了两个优化参数：体积分数（V_f），范围为 25%–45%；以及优化的滤波半径（r_{min}），范围为 1.2–2.5 cm。这些参数根据先前的二维超材料拓扑优化研究[40]选取。为生成数据，将这两个因素纳入析因设计，并针对每组取值生成数据点，如表 1 所示。表格中央为数据点编号，其左侧为对应的体积分数，上方为对应的滤波半径。例如，数据点 1 的体积分数为 25%，滤波半径为 1.2 cm，其余依此类推。针对最大化体积模量和最大化剪切模量这两个目标，分别建立了这样的表格。

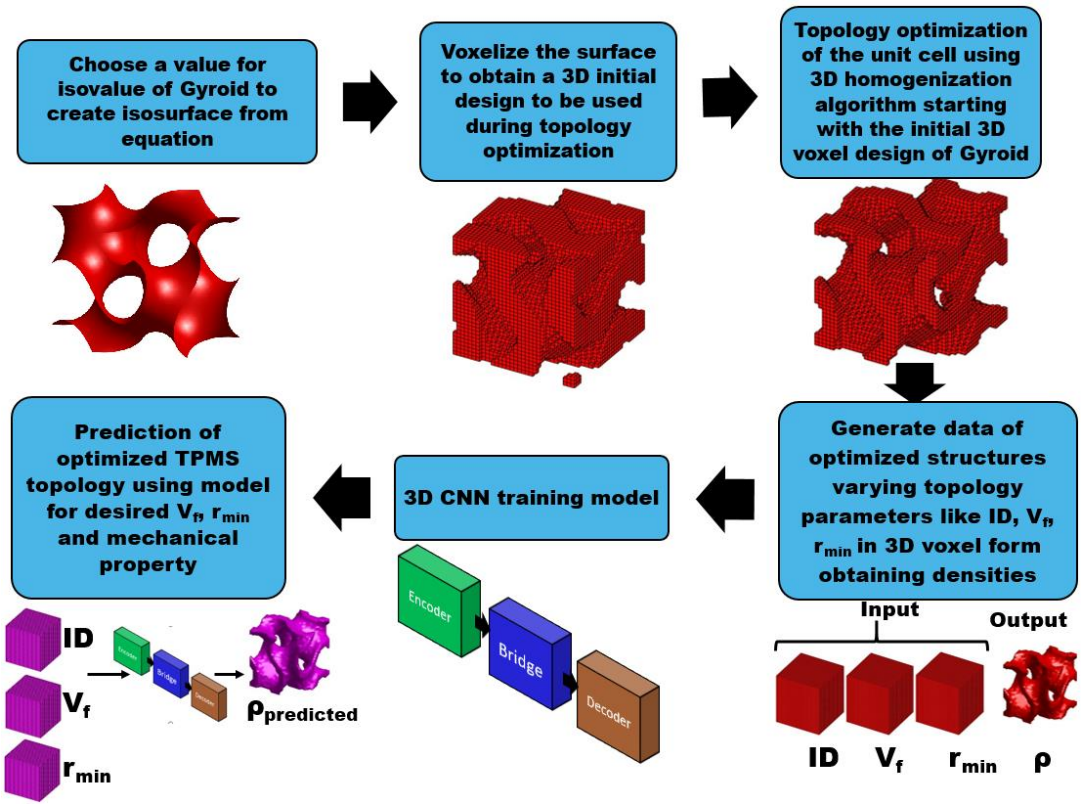


图 5. 数据生成和预测过程流程图

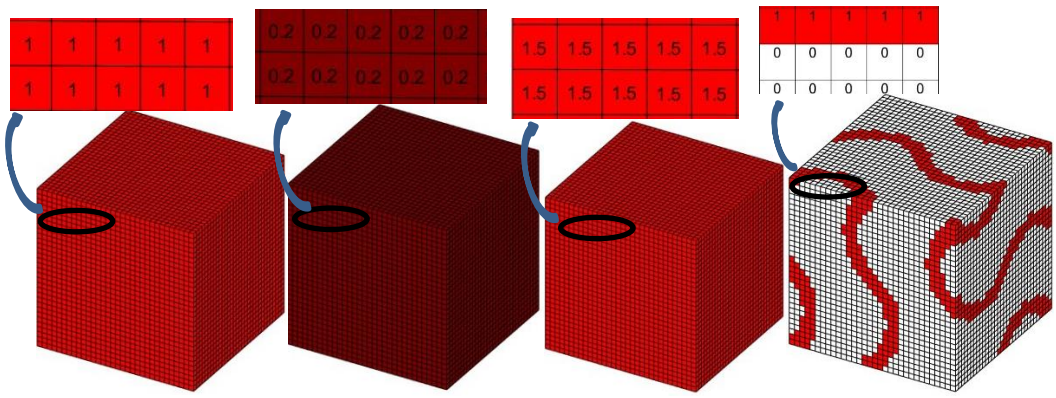


图6. 用于体积模量最大化 ID 的一个样本数据点——体素

以 20% 的体积分数和 1.5 的滤波半径作为输入，并得到相应的优化后密度作为输出

表1. 数据点表，列出了每个数据点的体积分数 V_f 和滤波半径 r_{min} 的取值

		滤波半径（cm）					
		1.20	1.21	1.22	1.23	…	2.50
体积分数（%）	25	1	2	3	4	…	131
	26	132	133	134	135	…	262
	.	.	.	.	.	....	.
	.	.	.	.	.	…	.
	45	2621	2622	2623	2624	…	2751

对于尺寸为 1 cm × 1 cm × 1 cm 的单胞，选用 32 × 32 × 32 的有限元网格。网格的选择将在第4节中详细讨论。图6展示了一个样本数据点，用于说明在一组参数值下输入和输出体素的样子。优化参数范围的选择基于以下考虑：胞状固体中关注的体积分数范围为 25% 至 45%，滤波半径则通过研究 1 至 10 的不同取值来确定。图7展示了体积分数为 40% 时，随着 r_{min}变化得到的一些拓扑优化结果形状。我们发现，较大的滤波半径会导致有效性能降低，因此本研究考虑的最大滤波半径为 2.5 cm。此外，r_{min} =1 的取值会产生棋盘格模式[48]，因此将其范围设定为 1.2 cm 至 2.5 cm。

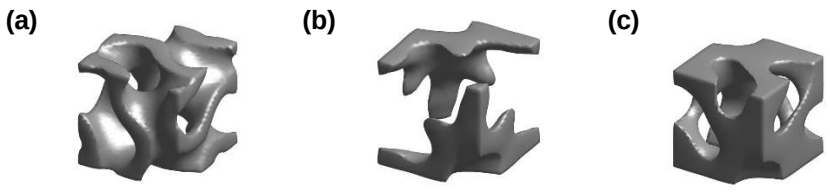


图7. 体积分数为40%时，不同滤波半径下的优化拓扑结构：(a) 3cm、(b) 5cm 和 (c) 8cm

3.2 网络架构

我们将先前工作[40] 中用于预测优化二维超材料的卷积神经网络模型扩展至三维超材料。该模型采用 ResUnet[54] 提出的编码器-解码器网络，这是一种语义分割神经网络，兼具残差学习和 U-net[55]的优势，因此融合了二者的优点。这促使我们使用基于像素的几何结构来学习性能以及相关的 Gyroid RUC 几何结构（密度），从而使模型能够针对任何目标性能预测相应的几何结构。该架构（见图8(a)）与 U-Net 类似（因其构建块呈 U 形而得名），但以残差块而非神经元作为构建块，因此称为 ResUNet。该架构可分为编码器部分、解码器部分，以及连接编码器和解码器的第三个桥接部分。编码器通过一系列卷积层将输入图像编码为低维表示；解码器接收经过编码的图像，并重建 RUC。图8中以虚线表示的拼接特征可提高分割准确率。ResUNet 使用批归一化（BN）、修正线性单元（ReLU）和卷积层（Conv），而 U-Net 在构建块中仅使用 ReLU 和 Conv。编码器和解码器各使用四个块，每个构建块如图8(b)所示。与 U-Net 相比，ResUNet 的优势在于编码器和解码器之间的拼接连接有助于保留特征[27]。

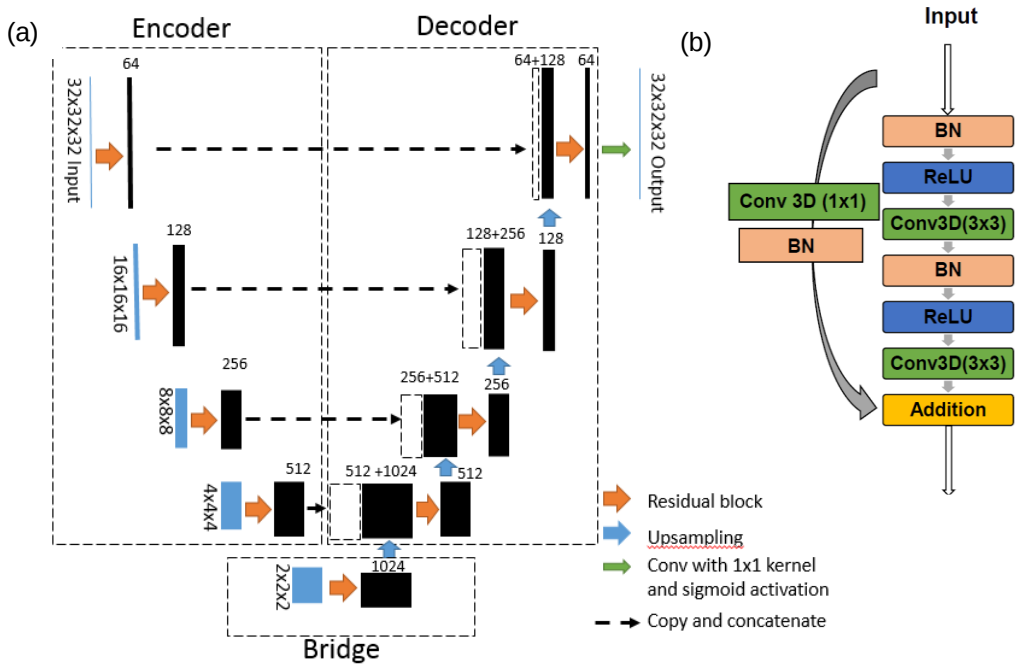


图8。a）ResUNet 架构。每个滤波器（黑色）上方标注了滤波器尺寸，而三维输入（蓝色）的变化标注在侧边。b）残差块

拓扑优化参数 V_f 和 r_{min} 的取值，以及所需力学性能的标识符（ID；此处，1 表示体积模量最大，2 表示剪切模量最大），会被转换为三维矩阵（图像），并将相同的值赋给所有体素，如图 6 所示。卷积神经网络模型接收这些作为输入的 V_f、r_{min}和 ID 三维图像，以及相应拓扑优化后的密度所构成的输出三维图像，并利用这些信息训练其权重。训练阶段完成后，卷积神经网络模型即可预测与输入的任意性能要求相对应的微观结构拓扑，如图 9 所示。

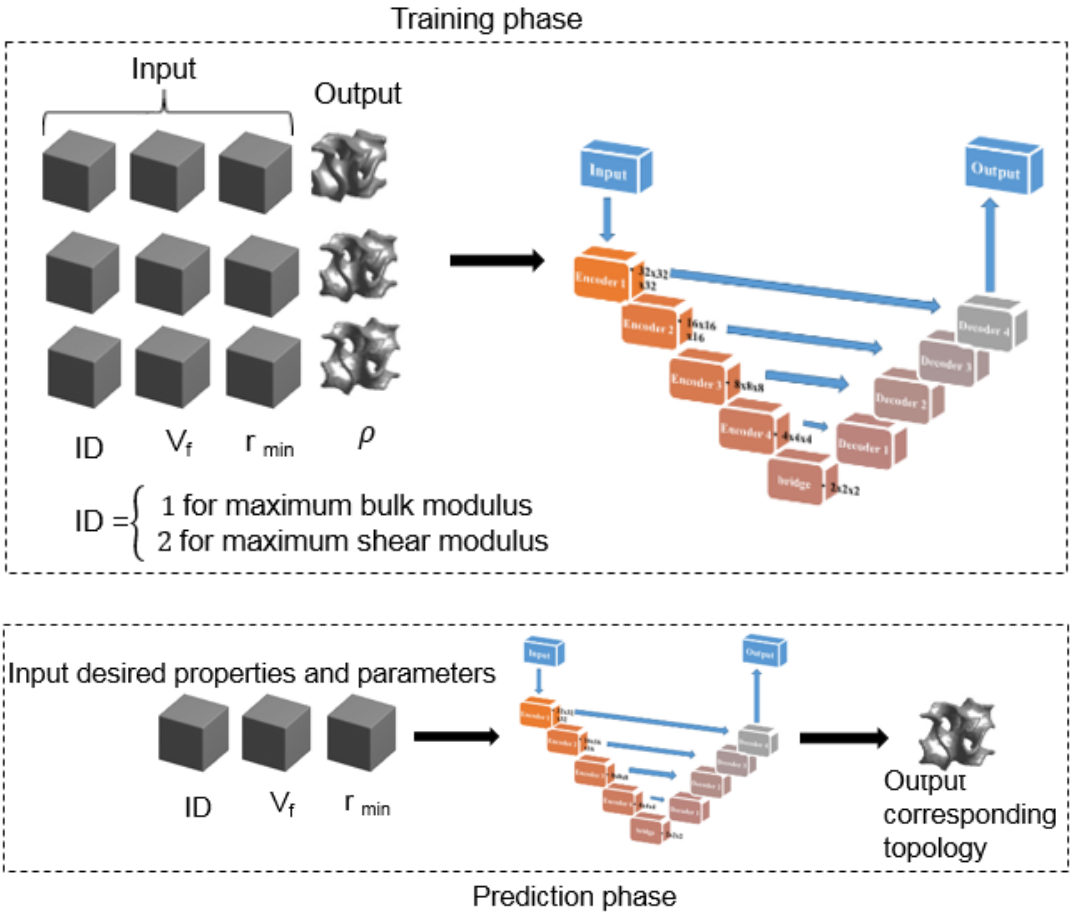


图 9. 所提出的三维卷积神经网络的训练与预测阶段

生成的数据集包含 2751 个数据点，每个数据点都包含目标函数的标识符、体积分数、滤波半径和优化拓扑（见图 5）。计算耗时较长，分别在 IBM 高性能计算系统和 iForge 高性能计算集群上执行。IBM 高性能计算系统的硬件配置为：两颗 12 核 Intel Xeon E5-2695 v2（Ivy Bridge）中央处理器、两块 NVIDIA K20M GPU、264 GB 主存。iForge 高性能计算集群由美国国家超级计算应用中心（NCSA）托管，包含 Intel/Skylake 节点，每个节点配备 40 个核心和 192 GB 随机存取存储器，此外还有若干配备 NVIDIA V100 GPU 卡的节点。卷积神经网络模型使用 Keras 和 Tensorflow 后端 [19]开发。所用超参数为：批次大小为 128，学习率为 0.001，采用 Adam 优化器，训练 150 轮。通常，大型数据集

为实现快速收敛所必需，但由于拓扑优化的计算成本较高，我们从较小的数据规模开始分析结果。整个流程所需的计算时间如表2所示。在高性能计算集群的一个节点上，使用一个核心生成每个数据点需要 2.4 小时；若乘以 2751 个数据点，任务将十分艰巨。不过，我们修改了 MATLAB 代码，利用作业数组拆分任务并并行生成所有数据点。由于每次拓扑优化运行彼此独立，因此每次 MATLAB 模拟生成 10 个数据点，整个数据生成过程只需运行 275 次。具体而言，我们在 iForge 的 5 个节点（每个节点 40 个核心）上运行 200 次，在 IBM 的 1 个节点（26 个核心）上运行 75 次，总计仅用 24 小时便完成了数据生成。图6还比较了在个人计算机和高性能计算集群上生成数据集所需的时间。如表中所示，计算权重和偏置的深度学习训练仅需 5.5 GPU小时。只要对深度学习模型进行适当的训练和验证，即使使用笔记本电脑且不借助任何建模软件，也能准确、近乎即时地预测新输入参数对应的拓扑结构。这是采用代理深度学习模型的最大优势。

表2. 高性能计算所需的计算时间

活动	CPU小时	GPU小时
数据生成（在 iForge 上使用 5 个节点，每个节点 40 个核心，以及在 IBM 上使用 1 个节点，包含 26 个核心）	24	-
深度学习训练	-	5.5
深度学习预测	0.001	-

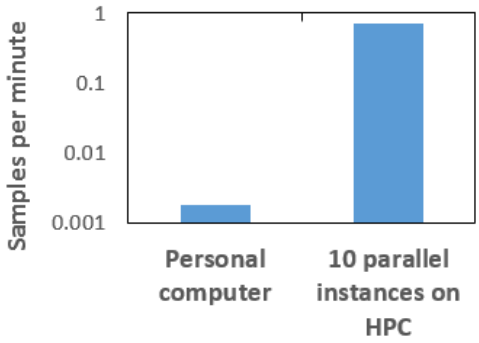


图10. 工作站与高性能计算的数据生成速率

3.3 模型评估

我们使用均方误差（MSE）作为模型的损失函数，并使用展平三维体素 [28] 的平均 Dice 相似系数（DSC）[19]，评估卷积神经网络模型相对于真实值的预测表现。MSE 用于衡量预测拓扑与真实值之间的偏差，MSE 值越小越好。DSC 将预测拓扑图像与真实拓扑图像进行比较，用以衡量两者中匹配的体素数量。因此，DSC 值越高越好，这表明预测结果与真实值的匹配程度更高。

对于 M 个数据点，T 表示输入通道 I 的真实值分割，O 表示卷积神经网络模型的分割，使用以下表达式对其进行评估：

$$MSE = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\|T(I_i) - O(I_i)\|^2 \tag{12}$$

$$DSC = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\frac{2|O(I_i) \cap T(I_i)|}{|O(I_i)| + |T(I_i)|} \tag{13}$$

4. 误差分析

在单胞建模及其仿真过程中采用的各种近似会给所开发的 Gyroid 代表性体积单元模型引入误差，这也会

影响单胞的卷积神经网络建模。因此，我们进行了详细的误差分析，以研究这些误差并提出减小其对代理建模影响的方法。

4.1 等值面几何形状建模误差

等值面由不同数量的网格点生成，网格点数量可能引入第一种离散误差。图 11 展示了使用不同数量网格点生成的等值面，其中至少使用 15 个网格点时，表面在视觉上捕捉得最佳。使用 5、10、15、20 和 32 的网格尺寸生成表面，再以每个方向 32 个体素（选择标准将在下一节讨论）生成体素化立方体，并比较这些 32 x32 x 32 立方体各自的相对密度。相对密度的差异在网格点达到 15 个后趋于收敛，表明加厚等值面的实际相对密度已被捕捉。因此，选择 15 作为网格尺寸，以生成 c=0 的等值面，随后将其体素化以进行分析。

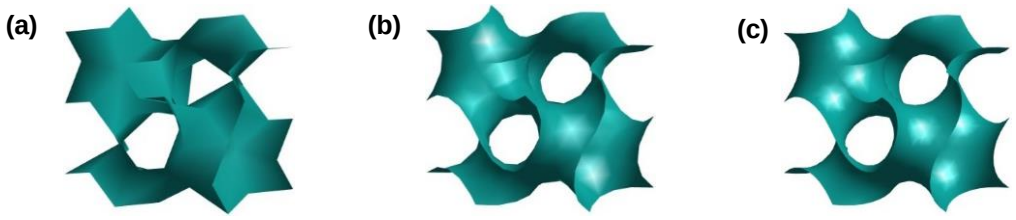


图 11. 使用 a) 5、b) 10 和 c) 15 个网格点生成的等值面。

4.2 表面几何体素化错误

卷积神经网络建模要求三维输入图像的体素数为 2 的幂，即 8、16、32、64 等。因此，通过执行基于均匀化的拓扑优化，并选择一个超过该值后均匀化矩阵和结构柔度趋于收敛的网格尺寸，确定了代表性单元（或有限元）的体素尺寸。

由于 8 的单元尺寸小于等值面的网格点数（上一节中选用 15），因此将其舍弃。在 16 和 32 中，鉴于我们的分析旨在获得最佳力学性能，可以针对这两种体素尺寸研究体积模量和剪切模量。尽管计算成本较高，有限元尺寸为 32 时的柔度更低，体积模量和剪切模量更高；与有限元尺寸为 16 时的结果相比，相对误差为 60%。进一步考察网格尺寸为 64 的情况后发现，其目标函数并未较尺寸为 32 时有所改善。因此，最终选择 32 作为体素尺寸，因为与较小的有限元尺寸相比，它显著改善了力学性能，且是用于生成等值面的网格点数（15）的两倍。

4.3 采样误差

2751 个数据点构成的小样本量必然会在卷积神经网络模型中产生建模误差，而该模型需要大型数据集进行训练。在选择数据驱动建模时，就应预见到这一问题；因此，采用自助法和交叉验证等补救措施可以解决此类问题。均方误差指标能够反映这类缺陷，并可在需要时加以修正。对于这种样本量较小的情况，全因子试验设计比随机数据集更为合适，因为这样可以确保输入参数的所有取值范围都在数据集中得到体现。

4.4 卷积神经网络模型拟合误差

为避免过拟合或欠拟合问题，我们针对训练集和验证集研究了损失函数（此处为均方误差指标）和 Dice系数指标。为此，数据被划分为训练集、测试集和验证集。较低的训练集误差表明没有欠拟合，但还需要较低的验证集误差

才能表明没有发生过拟合。因此，我们会监控这两种误差。此外，较低的测试集误差意味着泛化误差较低。

5. 结果与讨论

体积模量和剪切模量目标函数对应的优化拓扑数据集如图12所示。随着滤波半径增大，目标函数值降低；滤波半径非常小时，低体积分数下的优化无法收敛。图12中展示了不同体积分数和滤波半径取值下，数据样本中对应于体积模量最大目标值的部分拓扑结构（图12中的2–6）。滤波半径非常小时，对应的拓扑结构在螺旋曲面中会出现中空部分（图12中的1）。例如，对于25%的体积分数，体积模量目标函数对应的滤波半径为1.4 cm、剪切模量目标函数对应的滤波半径为1.2时，拓扑结构中存在中空部分；滤波半径增至1.5 cm后，这些部分便变得平滑。

对于最大化目标函数，低体积分数下约 1.5 厘米的滤波半径最为理想，而较高体积分数下则为 1.3 厘米。正如预期，较高的体积分数会带来较高的目标函数值。少数组合的体积分数和滤波半径甚至未能收敛。曲面上的空缺表示拓扑优化在经过 1000 次迭代后仍未收敛的数值，因此这些数据点被从数据集中剔除。图中以曲面上的空缺标示这些数据点。因此，在 2751 个数据点中，最终训练数据集包含 2597 个以最大化体积模量为目标的数据点，以及 2741 个以最大化剪切模量为目标的数据点。每个数据点都包含一个标识符，用于指明目标函数（最大化剪切模量或体积模量），以及体积分数值、滤波半径值和 32x32x32 个密度值。两种目标函数的数据点混合并打乱后，用于

训练数据集。数据被划分为 90% 的训练数据、5% 的验证数据和 5% 的测试数据。

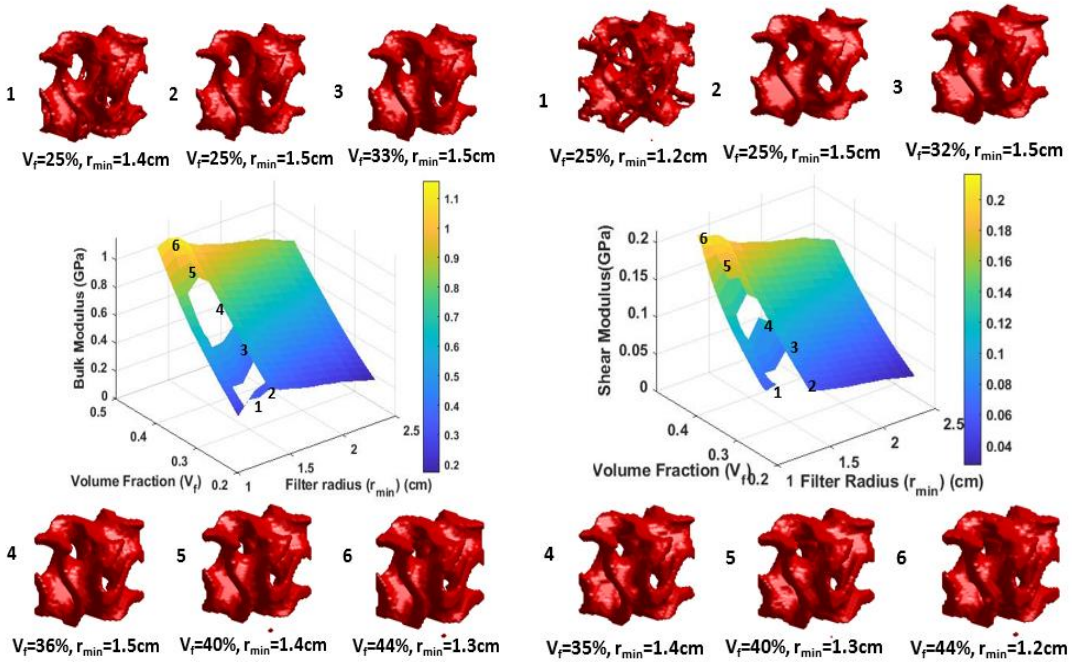


图12. 不同体积分数和滤波半径组合下拓扑优化的目标函数曲面。

对用于学习针对最大体积模量和最大剪切模量进行优化的三维螺旋面拓扑结构的深度学习方法进行了有效性测试。模型有效性的衡量指标由图13(a)所示模型采用的损失函数表示。即使数据集较小，均方误差也在约100个训练轮次时收敛。平均DSC历史记录（图13(b)）也表明，在约100个训练轮次时，预测拓扑与真实拓扑结构的匹配度达到95%。这在一定程度上也得益于拓扑优化中使用了 Heaviside滤波器 [50] ，它将密度值推向0或1，使卷积神经网络模型能够更快地学习密度图像，将其识别为黑色或白色，而不是中间密度。这提高了数据集的平均DSC。图13还表明，验证误差与训练误差之间的差异非常小，说明不存在

过拟合或欠拟合。图15和图16展示了测试集中真实拓扑与卷积神经网络预测拓扑的若干对比，这些拓扑对应的滤波半径为1.2、1.5、1.8、2.2和2.5，体积分数为25%、35%和45%。从视觉上看，低体积分数下较小的滤波半径会导致拓扑结构出现不连续，而卷积神经网络模型无法有效学习这些结构；但对于所有体积分数，该模型在较大的滤波半径下表现出色。测试集的均方误差为0.0079，表明泛化误差较低。对该测试集中预测结构与真实结构之间的体积平均偏差进行评估，结果为0.24%。其中，体积偏差最大的是一个体积分数为29%、滤波半径为1.35 cm、针对剪切模量进行优化的结构，其体积绝对误差为1.73%。体积偏差最小的是一个结构体积分数为40%、滤波半径为1.41 cm、针对体积模量进行优化的结构，其误差为7.6e-4%。

为更好地理解匹配图像，图16分别展示了三维图像的32个切片中第1st、 8th、 16th、 23rd 和第32nd 2个切片；两种目标函数对应的体积分数为35%，滤波半径为2 cm。

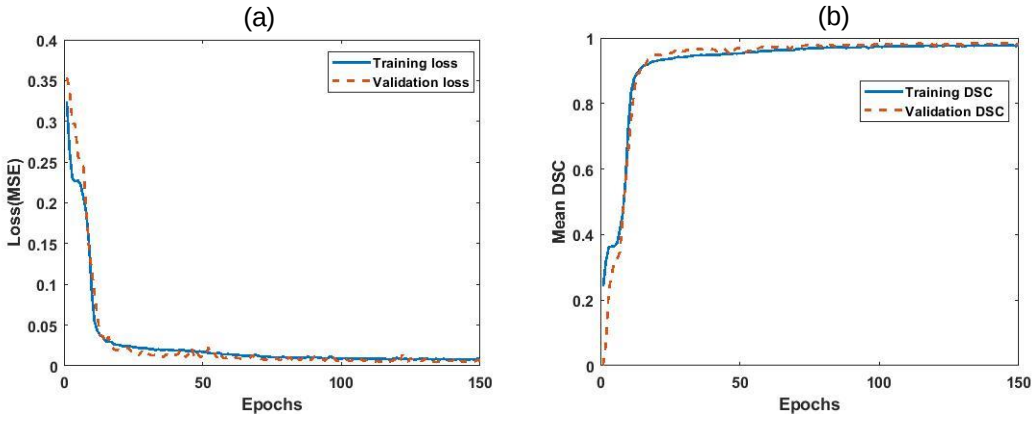


图13. a) 均方误差收敛情况；b) 平均 Dice 相似系数随训练轮次的变化。

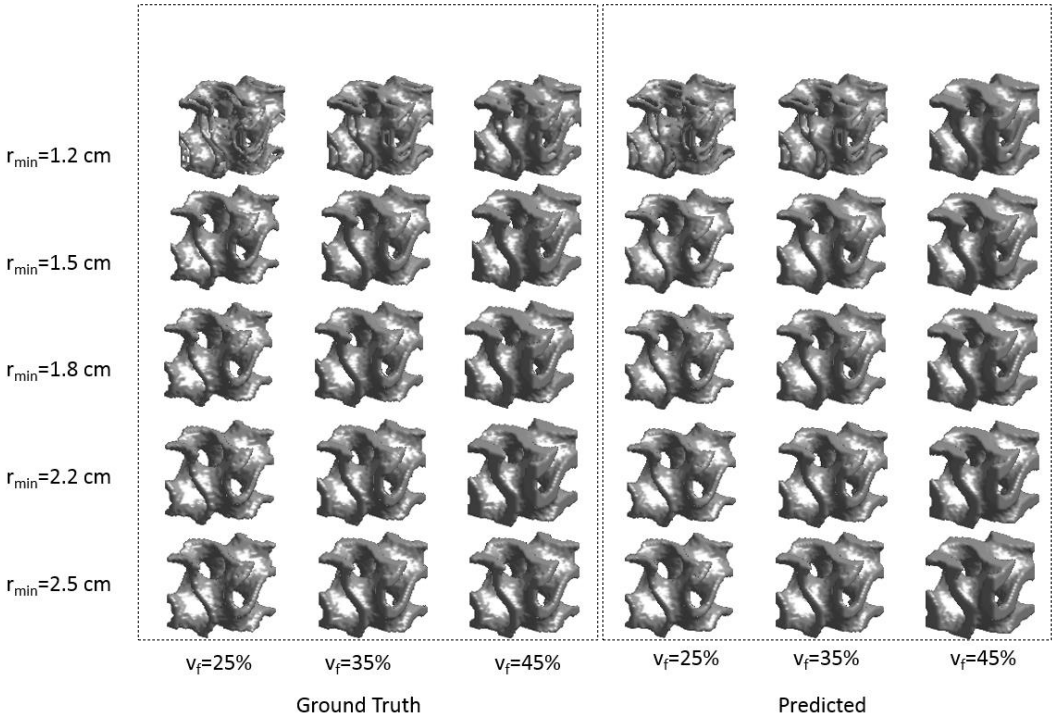


图14. 最大体积模量下不同体积分数与滤波半径组合对应的真实值（左）和预测拓扑结构（右）

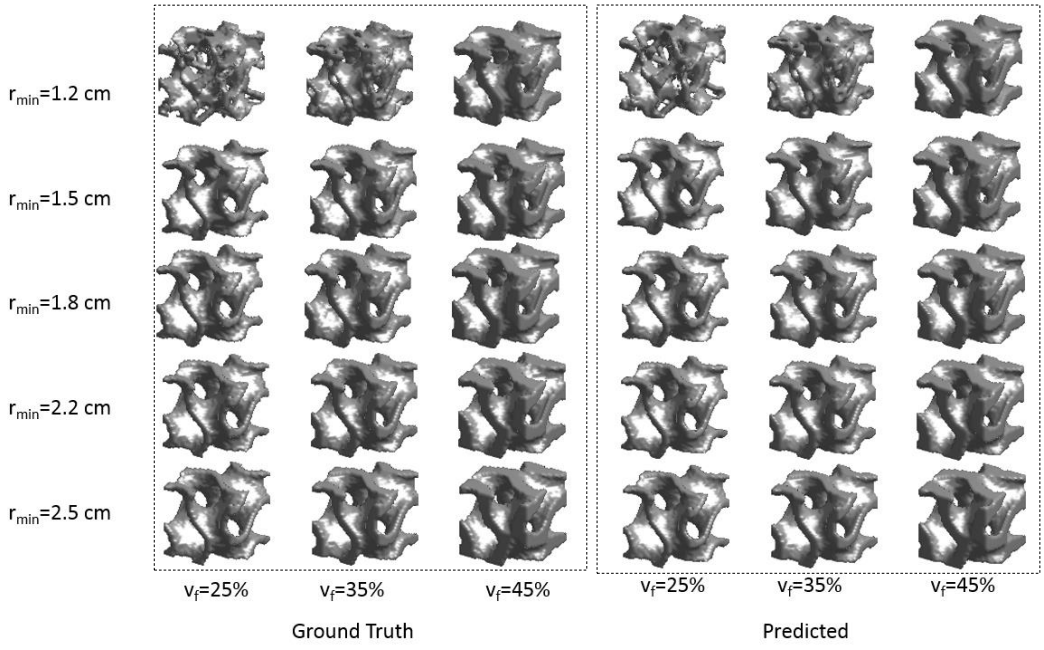


图15. 最大剪切模量下不同体积分数与滤波半径组合对应的真实值（左）和预测拓扑结构（右）

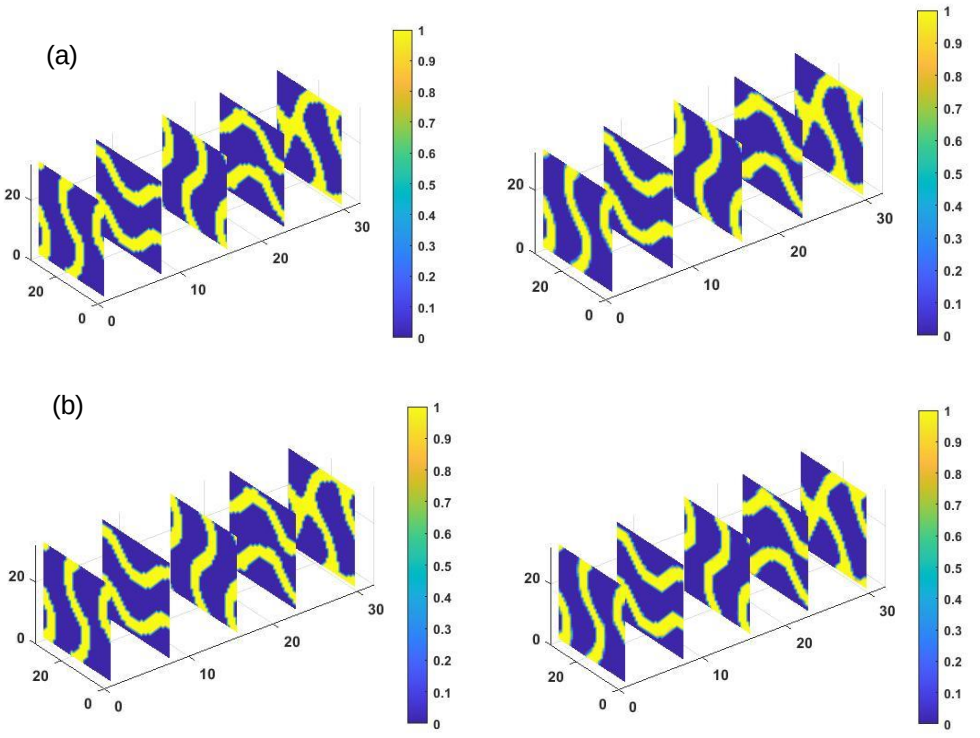


图16. 1st, 8th, 16th, 23rd 和 30th 2D 切片中真实值（左）与预测（右）拓扑结构的密度等值线；体积分数为 35%，滤波半径为 2cm：a）最大体积模量；b）最大剪切模量

6. 应用

所开展研究的未来应用可以进一步凸显本研究的重要性。大网格尺寸的三维拓扑优化耗时较长，生成包含大量此类拓扑优化运行的数据集成本高昂。因此，开展这类研究时应着眼于更广泛的目标和应用。研究人员通过研究代表性单胞设计，再利用最优单胞生成周期性宏观结构，探索了基于TPMS的多孔结构在轻质机械结构、热交换器和生物材料中的设计。然而，仅凭最优微结构，未必能够实现宏观结构的结构与材料优化。为此，研究人员广泛研究了一种称为并发拓扑优化的集成拓扑优化方法，该方法在优化宏观结构性能的同时优化微观结构材料分布 [56],[57] 。研究发现，这种多尺度拓扑优化方法

计算量更大，其计算量级相当于微观尺度的有限元网格尺寸乘以宏观尺度的有限元尺寸。当我们开发出一个模型，能够即时确定与任意期望力学性能和拓扑优化参数相对应的最优微结构时，就可以将该模型纳入此类结构的宏观分析中，从而避免在微观—宏观尺度上对结构进行并发拓扑优化。并发拓扑优化涉及以下过程 [56]：

求解 ρ_M^i, ρ_m^i(i= 1,2, ..., N_M; j=1,2, ..., N_m)

最小化：C (ρ_M, ρ_m)

$$\text{such that: } \boldsymbol{K}(\boldsymbol{D_M})\boldsymbol{U_M^{A(ij)}} = \boldsymbol{F_M^{A(ij)}}, \boldsymbol{K}(\boldsymbol{D_m})\boldsymbol{U_M^{A(ij)}} = \boldsymbol{F_m^{A(ij)}} \tag{14}$$

$$V_M(\rho_M) - V_{fM} \le 0, V_m(\rho_m) - V_{fm} \le 0$$

$$0 \le \rho_M^i \le 1, 0 \le \rho_m^i \le 1$$

其中，C 为结构柔度，M 索引指宏观结构，m 指微结构。ρ_M, ρ_m 为相对密度，$\boldsymbol{D_m}$ 和 $\boldsymbol{D_M}$ 分别为微结构和宏观结构的刚度张量，其计算方式类似于式 (5)：

$$\begin{aligned} D_M &= [E_{min} + (E_o - E_{min})\rho_M^p]D^H \\ D_m &= [E_{min} + (E_o - E_{min})\rho_m^p]D^0 \end{aligned} \tag{15}$$

其中，$\boldsymbol{D^0}$ 是材料的本构矩阵，$\boldsymbol{D^H}$ 是通过拓扑优化得到的微结构均匀化刚度张量。本研究利用卷积神经网络模型对该拓扑优化过程进行建模，因此可在并发拓扑优化中用作替代方案，以降低整个宏观结构拓扑优化的总体计算成本。本研究根据$\boldsymbol{D^H}$ 计算体积模量和剪切模量，$\boldsymbol{D^H}$ 是输入参数之一。而在并发拓扑优化中，$\boldsymbol{D^H}$ 可以是需要达到的目标属性，模型

按照本研究详述的相同流程构建。因此，宏观结构设计的计算时间大幅缩短，因为每次迭代中，卷积神经网络模型都能根据拓扑优化参数即时预测微结构设计。对于类似应用，如果采用计算成本高昂的有限元或计算流体力学模型对宏观结构进行静态[58] 或动态分析，并涉及微结构属性优化，也可以利用该模型的优势。作者正将这一方法拓展到此类应用，这也是本研究未来的研究方向。

7. 结论

本文介绍了一种基于三维卷积神经网络的模型，用于陀螺三周期极小曲面单胞的拓扑优化。本文提出了三项新颖思路：1）用于三维陀螺曲面单胞设计的体素化算法；2）基于均匀化的三维拓扑优化，以实现给定体积分数和该微结构滤波半径下的最大体积模量或剪切模量；3）将三维卷积神经网络用于三维拓扑优化。为减轻耗时的三维拓扑优化带来的计算负担，本文采用了一种具有编码器-解码器架构的三维代理卷积神经网络模型。该架构用于分割建模，可用于学习代表性单元的拓扑。研究发现，只需极少的数据点，该模型几乎能够即时模仿陀螺曲面拓扑中的相似图案。此外，该模型在预测准确度和预测时间方面均表现稳健。因此，即使在笔记本电脑上，也能有效地利用该卷积神经网络模型进行高质量拓扑优化；而若不采用该模型，即便使用强大的工作站或集群，也难以实现这一点。这项工作表明，采用代理深度学习模型有望实现

大幅加速涉及计算量庞大的拓扑优化的三维超材料单胞设计，包括多尺度超材料设计。

致谢

作者谨向美国国家超级计算应用中心（NCSA）产业计划、人工智能创新中心以及哈利法大学研究计算团队致谢。本出版物基于哈利法大学资助的研究工作，资助编号为 RCII-2019-003。

参考文献

[1] N. Engheta 和 R. W. Ziolkowski，《超材料：物理与工程探索》。约翰·威立父子出版公司，2006年。[2] A. M. Abou-Ali、O. Al-Ketan、R. Rowshan 和 R. Abu Al-Rub，《3D打印弯曲主导的韧带基三周期胞状聚合物固体的力学响应》，《材料工程与性能杂志》，第28卷，第4期，第2316–2326页，2019年4月，doi: 10.1007/s11665-019-03982-8。[3] D. W. Abueidda、M. Elhebeary、C.-S. (Andrew) Shiang、R. K. Abu Al-Rub 和 I. M. Jasiuk，《微架构 Neovius 晶格的压缩与屈曲》，《极端力学快报》，第37卷，文章编号100688，2020年5月，doi: 10.1016/j.eml.2020.100688。[4] D. W. Abueidda、P. Karimi、J.-M. Jin、N. A. Sobh、I. M. Jasiuk 和 M. Ostoja-Starzewski，《基于 Schwarz 原始曲面的互穿相复合材料的屏蔽效能与带隙》，《应用物理杂志》，第124卷，第17期，文章编号175102，2018年11月，doi: 10.1063/1.5046105。[5] A. S. Dalaq 和 F. Barthelat，《通过调控架构化梁的几何形状实现最大韧性与强度》，《材料设计》，第194卷，文章编号108889，2020年9月，doi: 10.1016/j.matdes.2020.108889。[6] X. Yu、J. Zhou、H. Liang、Z. Jiang 和 L. Wu，《与刚度、刚性和可压缩性相关的力学超材料：简要综述》，《材料科学进展》，第94卷，第114–173页，2018年5月，doi: 10.1016/j.pmatsci.2017.12.003。[7] U. G. K. Wegst、H. Bai、E. Saiz、A. P. Tomsia 和 R. O. Ritchie，《仿生结构材料》，《自然材料》，第14卷，第1期，文章编号1，2015年1月，doi: 10.1038/nmat4089。[8] A. S. Dalaq 和 F. Barthelat，《三维激光雕刻：用于制造坚韧的仿生玻璃基材料》，JOM，第72卷，第4期，第1487–1497页，2020年4月，doi: 10.1007/s11837-019-04001-w。[9] A. Jacob，《复合材料力学，第29卷——第1版》，第1版，第29卷，1991年，第1–328页。[10] O. Sigmund，《具有预设本构参数的材料：逆均匀化问题》，1994年，doi: 10.1016/0020-7683(94)90154-6。[11] M. Osanov 和 J. K. Guest，《架构化材料设计的拓扑优化》，《材料研究年度评论》，第46卷，第1期，第211–233页，2016年7月，doi: 10.1146/annurev-matsci-070115-031826。[12] M. M. Neves、H. Rodrigues 和 J. M. Guedes，《周期性线弹性微结构的优化设计》，《计算结构》，第76卷，第1期，第421–429页，2000年6月，doi: 10.1016/S0045- 7949(99)00172-8。[13] L. Xia 和 P. Breitkopf，《在 Matlab 中使用拓扑优化和基于能量的均匀化方法进行材料设计》，《结构与多学科优化》，第52卷，第6期，第1229–1241页，2015年12月，doi: 10.1007/s00158-015-1294-0。

[14] J. Gao、H. Li、Z. Luo、L. Gao 和 P. Li，《具有特定力学性能的微结构材料拓扑优化》，国际计算方法杂志，2019年11月，doi: 10.1142/S021987621850144X。[15] J. Gao、H. Li、L. Gao 和 M. Xiao，《使用基于能量的均匀化方法对三维微结构材料进行拓扑形状优化》，《先进工程软件》，第116卷，第89–102页，2018年2月，doi: 10.1016/j.advengsoft.2017.12.002。[16] S. Torquato 和 A. Donev，《极小曲面与多功能性》，《数学、物理与工程科学论文集》，第460卷，第2047期，第1849–1856页，2004年。[17] O. Al-Ketan 和 R. K. Abu Al-Rub，《基于三周期极小曲面晶格的多功能力学超材料》，《先进工程材料》，第21卷，第10期，文章编号1900524，2019年，doi: 10.1002/adem.201900524。[18] J. Gardan，《增材制造技术：技术现状与趋势》，《国际生产研究杂志》，第54卷，第10期，第3118–3132页，2016年5月，doi: 10.1080/00207543.2015.1115909。[19] I. Maskery、A. O. Aremu、L. Parry、R. D. Wildman、C. J. Tuck 和 I. A. Ashcroft，《具有体积分数和胞元类型梯度设计的基于曲面的晶格结构的有效设计与模拟》，《材料设计》，第155卷，第220–232页，2018年10月，doi: 10.1016/j.matdes.2018.05.058。 [20] D. W. Abueidda、R. K. Abu Al-Rub、A. S. Dalaq、D.-W. Lee、K. A. Khan 和 I. Jasiuk，《具有三周期极小曲面的新型泡沫材料的有效电导率和弹性模量》，《力学材料》，第95卷，第102–115页，2016年4月，doi: 10.1016/j.mechmat.2016.01.004。[21] A. Alhammadi、O. Al-Ketan、K. A. Khan、M. Ali、R. Rowshan 和 R. K. Abu Al-Rub，《增材制造 AlSi10Mg 片状胞元材料的微观结构表征与热力学行为》，《材料科学与工程：A辑》，第791卷，文章编号139714，2020年7月，doi: 10.1016/j.msea.2020.139714。[22] K. A. Khan 和 R. K. Abu Al-Rub，《架构化泡沫材料的时域和频域黏弹性行为建模》，《工程力学杂志》，第144卷，第6期，文章编号04018029，2018年6月，doi: 10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001448。[23] Z. Liu、H. Gong、J. Gao 和 L. Liu，《高强度—高渗透性基于TPMS的支架的拓扑设计、力学响应与传质特性》，《国际机械科学杂志》，第217卷，文章编号107023，2022年3月，doi: 10.1016/j.ijmecsci.2021.107023。[24] C. Zhang 等，《采用立体光刻制造的功能梯度三周期极小曲面结构的力学特性与变形机制》，《国际机械科学杂志》，第208卷，文章编号106679，2021年10月，doi: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106679。[25] E. Yang 等，《几何形状对通过SLM制造的Ti-6Al-4V螺旋面结构力学性能的影响：数值研究》，《材料设计》，第184卷，文章编号108165，2019年12月，doi: 10.1016/j.matdes.2019.108165。[26] O. Al-Ketan、M. Pelanconi、A. Ortona 和 R. K. Abu Al-Rub，《基于三周期极小曲面的架构化催化陶瓷基底的增材制造》，《美国陶瓷学会志》，第102卷，第10期，第6176–6193页，2019年，doi: 10.1111/jace.16474。[27] A. H. Schoen，《无自交的无限周期极小曲面》，C–98，1970年5月。访问日期：2021年12月22日。 [在线]。可访问：https://ntrs.nasa.gov/citations/19700020472[28] K. Michielsen 和 D. g Stavenga，《蝴蝶翅鳞中的螺旋面角质层结构：生物光子晶体》，《英国皇家学会界面杂志》，第5卷，第18期，第85–94页，2008年1月，doi: 10.1098/rsif.2007.1065。[29] C. Yang、Y. Kim、S. Ryu 和 G. X. Gu，《利用卷积神经网络预测超越弹性极限的复合材料性能》，《MRS通讯》，第9卷，第2期，第609–617页，2019年6月，doi: 10.1557/mrc.2019.49。[30] M. Mozaffar、R. Bostanabad、W. Chen、K. Ehmann、J. Cao 和 M. A. Bessa，《深度学习预测路径相关塑性》，《美国国家科学院院刊》，第116卷，第52期，第26414–26420页，2019年12月，doi: 10.1073/pnas.1911815116。[31] D. W. Abueidda、S. Koric、N. A. Sobh 和 H. Sehitoglu，《用于塑性和热黏塑性的深度学习》，《国际塑性杂志》，第136卷，文章编号102852，2021年1月，doi: 10.1016/j.ijplas.2020.102852。 [32] C. Settgast、M. Abendroth 和 M. Kuna，《使用神经网络对开孔泡沫结构的塑性变形行为进行本构建模》，《力学材料》，第131卷，第1–10页，2019年4月，doi: 10.1016/j.mechmat.2019.01.015。[33] Q. Rong、H. Wei、X. Huang 和 H. Bao，《利用深度学习方法从横截面图像预测复合材料的有效热导率》，《复合材料科学与技术》，第184卷，文章编号107861，2019年11月，doi: 10.1016/j.compscitech.2019.107861。

[34] K. M. Hamdia、H. Ghasemi、Y. Bazi、H. AlHichri、N. Alajlan 和 T. Rabczuk，“一种基于深度学习、结合拓扑优化的挠曲电纳米结构计算材料设计新方法”，《有限元分析与设计》，第 165 卷，页码 21–30，2019年11月，doi: 10.1016/j.finel.2019.07.001。[35] A. D. Spear、S. R. Kalidindi、B. Meredig、A. Kontsos 和 J.-B. le Graverend，“数据驱动材料研究：理解和预测疲劳行为的下一个前沿”，JOM，第 70 卷，第 7 期，页码 1143–1146，2018年7月，doi: 10.1007/s11837-018-2894-0。[36] C. Yang、Y. Kim、S. Ryu 和 G. X. Gu，“利用卷积神经网络预测复合材料微观结构的应力-应变曲线”，《材料设计》，第 189 卷，文章号 108509，2020年4月，doi: 10.1016/j.matdes.2020.108509。[37] E. Goli、S. Vyas、S. Koric、N. Sobh 和 P. H. Geubelle，“ChemNet：用于先进复合材料制造的深度神经网络”，《物理化学杂志B》，第 124 卷，第 42 期，页码 9428–9437，2020年10月，doi: 10.1021/acs.jpcb.0c03328。[38] D. W. Abueidda、Q. Lu 和 S. Koric，“用于三维固体力学的无网格物理信息深度学习方法”，《国际数值方法工程杂志》，第 122 卷，第 23 期，页码 7182–7201，2021年，doi: 10.1002/nme.6828。[39] E. Hu、I. P. Seetoh 和 C. Q. Lai，“利用机器学习辅助研究缺陷对增材制造架构材料力学性能的影响”，《国际机械科学杂志》，第 221 卷，文章号 107190，2022年5月，doi: 10.1016/j.ijmecsci.2022.107190。[40] H. T. Kollmann、D. W. Abueidda、S. Koric、E. Guleryuz 和 N. A. Sobh，“用于二维超材料拓扑优化的深度学习”，《材料设计》，第 196 卷，文章号 109098，2020年11月，doi: 10.1016/j.matdes.2020.109098。[41] D. W. Abueidda、S. Koric 和 N. A. Sobh，“利用深度学习对含非线性的二维结构进行拓扑优化”，《计算结构》，第 237 卷，文章号 106283，2020年9月，doi: 10.1016/j.compstruc.2020.106283。[42] D. W. Abueidda、M. Almasri、R. Ammourah、U. Ravaioli、I. M. Jasiuk 和 N. A. Sobh，“利用卷积神经网络预测和优化复合材料的力学性能”，《复合结构》，第 227 卷，文章号 111264，2019年11月，doi: 10.1016/j.compstruct.2019.111264。[43] A. Viswanath、M. Modrek、K. A. Khan 和 R. K. A. Al-Rub，“基于三周期极小曲面的类陀螺结构的拓扑优化深度学习方法”，美国复合材料学会第六届复合材料技术会议论文集，第 0 期，文章号 0，2021年，doi: 10.12783/asc36/35824。[44] G. Dong、Y. Tang 和 Y. F. Zhao，“一个用于三维蜂窝材料的 149 行均匀化代码，使用 matlab 编写”，《工程材料与技术杂志》，第 141 卷，第 1 期，2018年7月，doi: 10.1115/1.4040555。[45] J. Guedes 和 N. Kikuchi，“基于均匀化方法并采用自适应有限元方法的材料预处理与后处理”，《计算方法与应用力学工程》，第 83 卷，第 2 期，页码 143–198，1990年10月，doi: 10.1016/0045-7825(90)90148-F。[46] M. P. Bendsøe，“将最优形状设计视为材料分布问题”，《结构优化》，第 1 卷，第 4 期，页码 193–202，1989年12月，doi: 10.1007/BF01650949。[47] O. Sigmund，“用于拓扑优化的基于形态学的黑白滤波器”，《结构与多学科优化》，第 33 卷，第 4 期，页码 401–424，2007年4月，doi: 10.1007/s00158-006-0087-x。[48] O. Sigmund 和 J. Petersson，“拓扑优化中的数值不稳定性：处理棋盘格、网格依赖性和局部极小值的程序综述”，《结构优化》，第 16 卷，第 1 期，页码 68–75，1998年8月，doi: 10.1007/BF01214002。[49] T. E. Bruns 和 D. A. Tortorelli，“非线性弹性结构与柔顺机构的拓扑优化”，《计算方法与应用力学工程》，第 190 卷，第 26 期，页码 3443–3459，2001年3月，doi: 10.1016/S0045-7825(00)00278-4。[50] J. K. Guest、J. H. Prévost 和 T. Belytschko，“利用节点设计变量和投影函数在拓扑优化中实现最小长度尺度”，《国际数值方法工程杂志》，第 61 卷，第 2 期，页码 238–254，2004年，doi: 10.1002/nme.1064。[51] “top3d”，top3d。https://www.top3d.app/（访问日期：2022年6月14日）。[52] Richard E. Bellman，《自适应控制过程：导览》。新泽西州普林斯顿：普林斯顿大学出版社，1961年。访问日期：2022年6月14日。[在线]。可访问：https://press.princeton.edu/books/hardcover/9780691652214/adaptive-control-processes
[53] Raymond H. Myers、Douglas C. Montgomery、Christine M. Anderson-Cook，《响应面方法论：利用试验设计实现过程与产品优化》，第 4 版。威利概率与统计丛书。

[54] Z. Zhang、Q. Liu 和 Y. Wang，“利用深度残差 U-Net 进行道路提取”，IEEE Geosci. Remote Sens. Lett.，第 15 卷，第 5 期，页码 749–753，2018年5月，doi: 10.1109/LGRS.2018.2802944。[55] O. Ronneberger、P. Fischer 和 T. Brox，“U-Net：用于生物医学图像分割的卷积网络”，载于《医学图像计算与计算机辅助干预– MICCAI 2015》，沙姆，2015年，页码 234–241。doi: 10.1007/978-3-319-24574-4_28。[56] J. Gao、Z. Luo、L. Xia 和 L. Gao，“使用 Matlab 对多尺度复合结构进行并发拓扑优化”，《结构与多学科优化》，2019年。[57] Y. Wu、E. Li、Z. C. He、X. Y. Lin 和 H. X. Jiang，“考虑非精确概率不确定性的结构及其复合材料稳健并发拓扑优化”，《计算方法与应用力学工程》，第 364 卷，文章号 112927，2020年6月，doi: 10.1016/j.cma.2020.112927。[58] D. W. Abueidda、S. Koric、R. A. Al-Rub、C. M. Parrott、K. A. James 和 N. A. Sobh，“用于超弹性和黏弹性的深度学习能量法”，《欧洲固体力学杂志》，第 95 卷，文章号 104639，2022年9月，doi: 10.1016/j.euromechsol.2022.104639。