arXiv:2603.10934v1 [cs.CE] 11 Mar 2026

原始论文期刊栏目

# 立方对称超材料极端性能图谱

**Sahar Choukir[1] | Nirosh Manohara[1] |Chandra Veer Singh[1,2]**

[1]机械与工业工程，多伦多大学，加拿大安大略省多伦多，M5S 3G8

[2]材料科学与工程，多伦多大学，加拿大安大略省多伦多，M5S 3E4

**通信作者**Chandra Veer Singh，多伦多大学，加拿大安大略省多伦多，M5S 3E4 电子邮箱：chandraveer.singh@utoronto.ca

**资助信息**

目前，关于三维超材料的研究主要集中于传统的杆系、板式和壳式晶格设计。尽管这些设计具有若干优势，但其固有局限性可能会限制它们在某些应用中的性能，因此有必要探索其他结构拓扑。在此，我们提出一个大规模、由对称性引导的框架，用于生成和分析基于全部36个立方空间群的架构超材料。我们采用基于体素的表示方法，构建了一个包含约195万个周期性晶胞的数据库，涵盖广泛的相对密度和拓扑复杂度。该数据集揭示了由晶体学对称性塑造的丰富弹性性能景观，其中包括高块体模量与剪切模量比的罕见五模设计，如$K/G \approx 166$；泊松比低至$\nu = -0.76$的各向同性负泊松比架构；以及刚度达到Hashin–Shtrikman上界93%的结构。作为对该数据集的补充，我们开发了一种三维卷积神经网络代理模型，并使用完整数据库对其进行训练和评估，

**缩写：** 卷积神经网络，卷积神经网络*共同贡献的作者。

用于预测单轴、剪切和静水加载下的应变能密度值。总而言之，本研究建立了一个全面的立方对称超材料图谱，并提供了一个预训练模型，以加速发现和设计具有极端力学性能的三维架构材料。

**关 键 词**

超材料、机器学习、卷积神经网络、增材制造

## 1 引言

力学超材料是经过架构设计的材料，其有效性能主要源自其底层几何结构，而非化学成分，因此能够实现远超传统块体材料的功能 [1, 2]。通过有意的微观结构设计，研究表明，超材料能够呈现负泊松比 [3] 以及极高的刚度重量比 [4]等非常规响应。这些能力为众多工程应用领域带来了变革性机遇，包括生物医学系统 [5] 和航空航天结构 [6], , 在这些领域，性能往往受到重量和刚度的严格制约。

迄今为止，超材料研究主要集中于相对有限的几类架构，尤其是杆系 [7], 、板系 [8], 和壳系 [9] 网络。尽管这些设计实现了多种非常规且理想的力学响应，但也存在固有局限，包括节点处的应力集中，以及对制造缺陷和瑕疵的敏感性 [10, 11, 12]。为拓展可探索的设计空间，近期研究考察了其他晶格类别，例如旋节线状超材料 [13] , 以及融合杆系、板系和壳系晶格特征的混合结构 [11]。晶体学对称性已成为系统拓展这一设计空间的强大框架。通过施加全局几何约束，对称操作直接决定载荷传递路径和变形机制，进而塑造有效力学响应。既有研究已展示出对称性引导的生成策略的潜力。然而，这些研究的范围仍然有限，主要聚焦于二维晶格 [14]或三维桁架网络 [15]。因此，对于具有连续曲面、复杂孔隙形态和混合板状几何结构的更广泛三维架构，目前仍缺乏充分探索。

传统上，评估和筛选此类架构主要依赖有限元法（FEM）模拟 [16, 17, 18, 19], , 而这类模拟计算量大且耗时。为克服这一局限，人们开始转向机器学习（ML）方法，以加速表征和设计 [20, 21]。具体而言，深度学习技术在预测有效材料性能 [22, 23]以及指导逆向设计策略、实现特定应用目标 [24, 25, 26]方面展现出良好前景。

因此，本研究引入 构建一个系统性框架，用于生成由立方晶体对称性衍生的大量且多样化的三维

超材料晶格数据集。为补充这一新颖数据集，我们开发了一种三维卷积神经网络（CNN）模型，能够根据这些独特晶格结构的体素化表示，准确预测其刚度。本研究的独特之处在于明确整合了晶体学对称性，从而能够严格探究特定对称操作和布拉维晶格如何影响极端力学响应的产生。此外，所提出的预测型三维卷积神经网络模型还可作为有限元法（FEM）的初步工具，用于筛选具有所需特性的独特拓扑结构。这一不同于传统方法的研究路径旨在加深对超材料研究领域中模型的理解，并提升其预测能力，最终促进面向特定应用的高性能架构的优化与发现。

## 2 结果

### 2.1 | 弹性性能景观

该数据集包含 195 万个通过立方晶体对称操作系统生成的体素化单胞，涵盖空间群 195–230；相对密度均匀覆盖 0.05 至 0.50，平均每种对称性约有 5 万种结构。广泛的覆盖范围确保数据集不会偏重于少数几种知名晶格；相反，它探索了源自不同对称操作（旋转、镜面、反演）的设计，而这些操作在晶格文献中鲜少受到关注。值得注意的是，此前已有一些研究认识到对称引导设计对于获得优异力学性能的价值，但这些研究仅限于杆系图[15] 或二维晶格 [14]。相比之下，本研究采用的基于体素的方法能够生成连续曲面和复杂孔隙形状，而不仅仅是桁架网络。这使得我们能够发现仅采用杆件的方法可能遗漏的板状或壳状特征。据我们所知，这一庞大的库迄今为止对晶体学对称性如何支配三维架构材料的力学响应进行了最全面的探索。

对于每个单胞，我们计算结构在所有方向上的杨氏模量，并将最大值和最小值分别记为$E_{\max}$和$E_{\min}$。平均刚度定义为这两个值的平均值，即$\bar{E}_{\text{mean}} = E_{\max} + E_{\min 2}$；刚度变化则表示为 $\Delta E = E_{\max} - E_{\min 2}$。各向异性通过$\Omega = \frac{\Delta E}{\bar{E}_{\text{mean}}}$进行量化，其中满足$\Omega \leq 0.05$的结构被分类为各向同性。力学最优性是相对于Hashin-Shtrikman上界定义的，达到$\frac{E_{\text{mean}}}{E_{\text{HSU}}} \geq 0.9$的结构被视为最优。我们进一步根据泊松比 $\nu \leq 0$识别拉胀架构，从而涵盖非拉胀行为与拉胀行为之间的过渡。该定义降低了均匀化有限元预测中数值不确定性的敏感性，但需要指出的是，严格的拉胀响应对应于 $\nu < 0$。此处采用的分类阈值与超材料设计领域以往的基准一致 [14, 27], , 从而建立了一个用于在立方对称性景观中绘制和发现架构超材料的统一框架。

图1b突出显示了本研究探索的广阔设计空间中的各向同性、负泊松比和近最优子集。图1c展示了所有空间群及随机选取的代表性拓扑结构的弹性常数$C_{11}$, $C_{12}$, 和$C_{44}$ 分布，其中大多数结构的刚度适中。数据集中的单胞只有15.27%具有各向同性，共计296,981个；而在这些结构中，仅有66个在实现各向同性的同时接近Hashin-Shtrikman 上界。此外，数据集包含26,735个负泊松比结构，其中442个具有各向同性。数据集中各向同性最优和各向同性负泊松比构型所占比例相对较小，凸显了此类设计本身的稀有性；这一趋势也与现有超材料文献中对此类设计的有限报道相符。

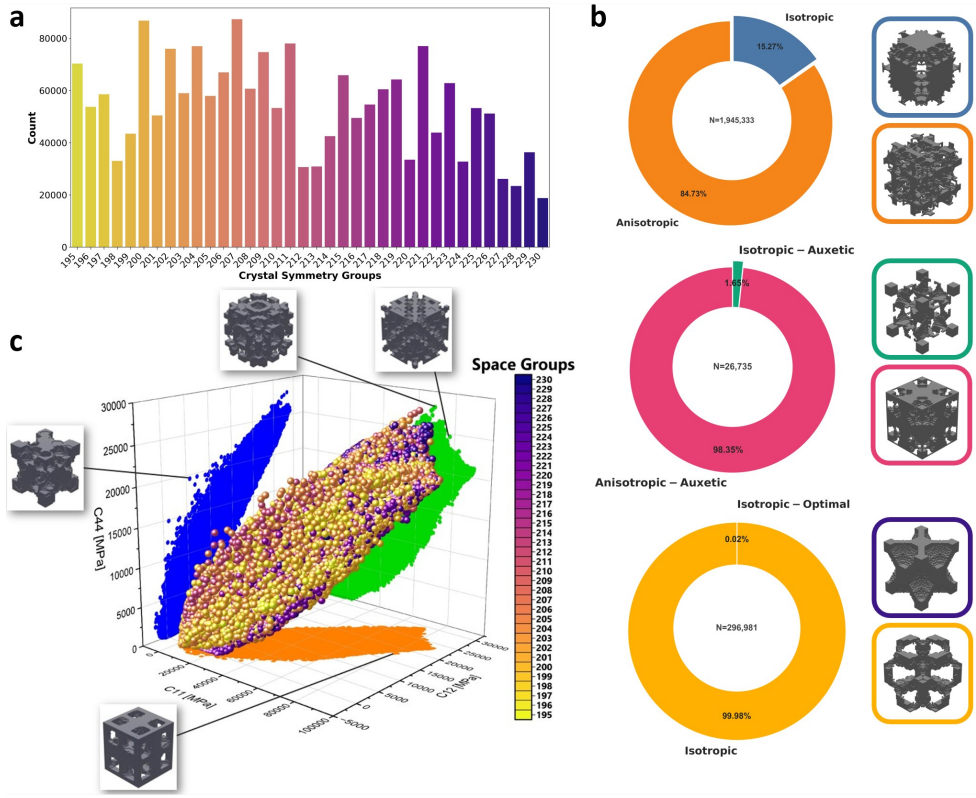



图 1 数据集组成与弹性性质分布。(a) 整个数据集中各晶体对称群对应的样品数量频率（N = 5,945,333）。(b) 结构统计，展示数据集中各向异性、各向同性、负泊松比和最优样品的比例，并列出属于这些类别的样品晶胞。(c) 刚度在 ($C_{11}C_{22}C_{33}$) 空间中的分布，按空间群着色，并在性质流形中标出具有代表性的晶胞拓扑。

## 2.2 | 力学超材料极值图谱

如图2所示，我们在此识别出若干具有极端且理想力学响应的不同结构族，包括各向同性负泊松比、各向同性最优、五模以及高度各向异性构型。$E^{norm} = E_{EsP}$、$G^{norm} = G_{GsP}$和$K^{norm} = K_{KsP}$分别表示沿100方向的杨氏模量、剪切模量和体积模量；这些模量均按母体材料相应模量及构型的相对密度进行归一化。在我们的分析中，对于几何构型数量充足的子集，我们选取总体刚度最高的200个结构进行绘图。总体刚度以这些归一化模量的平均值$Max(E_{norm}+G_{norm}+K_{norm})/3$量化，如图2图例所示。

### 2.2.1 | 各向异性设计

数据集中的绝大多数架构都表现出弹性各向异性（图1b）。值得注意的是，其中一部分各向异性结构的刚度水平可与成熟的晶格基准结构相媲美，例如立方

泡沫。例如，图 2b 所示的各向异性构型在相对密度为 $\rho$ =0.49时，达到 $E_{norm}$ = 0.80，与 Berger 等人 [28], 报告的立方泡沫在相同相对密度下的性能十分接近，后者的刚度为 $E_{norm}$ = 0.78。

在更广泛的各向异性结构中，涌现出一类独特的高度各向异性结构，其特点是在100平面内具有较高的剪切刚度（$Z \geq 20$），或在110平面内具有占主导地位的剪切刚度（$Z \leq 0.05$）。对于这些极端情况，观察到一种违反直觉的趋势：随着相对密度降低，$E_{norm}$ 反而增加（图2a），这表明材料利用率不断提高。尽管这些高度各向异性结构的刚度未达到中等各向异性几何结构所展现的峰值水平，但它们还具有其他功能优势。尤其是，许多结构的泊松比接近零，少数则进入负泊松比区间（图 2b），因此适用于组织工程等应用 [29]。

### 2.2.2 | 各向同性—负泊松比设计

当载荷状态明确且主要沿单一方向作用时，各向异性可能具有优势。然而，许多承载应用涉及不确定的、多轴的或快速变化的载荷条件；在这些情况下，各向同性力学响应至关重要，可确保性能不受方向影响而保持一致。尽管负泊松比超材料因能够增强能量吸收并提高抗剪切能力而受到广泛研究，这些特性使其在生物医学应用中尤具吸引力 [5],，但实现各向同性负泊松比结构仍是一项重大挑战。文献中鲜有各向同性负泊松比结构的报道 [30], ，而且通常需要采用拓扑优化技术才能实现 [27]。相比之下，我们的数据集筛选出442种各向同性负泊松比结构，其泊松比低至 $\nu = -0.76$，且为$0.05 \leq \rho < 0.40$。这一性能与Chen等人报道的拓扑结构相当 [31], ，但仍不及Li等人展示的接近 $\nu \approx -1$ 的极端数值 [30]。

### 2.2.3 | 接近理论界限的超高刚度各向同性设计

除负泊松比族之外，我们的数据集还包含66种各向同性最优架构，其有效刚度极高，且为$0.44 \leq \rho \leq 0.50$。如图2a、c、d所示，这些结构具有最高水平的弹性模量，其杨氏模量最高可达到Hashin–Shtrikman上界的93%，即$E_{mean}/E_{HSU}$。平均各向加载方向杨氏模量最高可达到Hashin-Shtrikman上界93%的结构,在图2a中以橙色菱形标出。该性能与文献报道的数值相当，例如Zhao等人 [32], 在相对密度为0.2–1的结构中，在最不利的加载方向上实现了超过Hashin–Shtrikman界限98%的性能。此类高刚度轻质结构可作为航空航天承载应用的有力候选者 [33]。

此外，尽管对称性引导设计框架生成了大量此前未曾探索过的结构，它也重新发现了一些众所周知的晶格拓扑。具体而言，图2a、c中橙色菱形标记所指的各向同性最优结构，分别与施瓦茨菱形晶格和八面体泡沫具有显著的几何相似性。

此处识别出的类施瓦茨菱形结构属于空间群 $Fm\bar{3}c$，相对密度为 $\rho = 0.49$，归一化杨氏模量为 $E_{norm} = 0.65$。这一数值高于 Alagha 等人 [34], 针对施瓦茨菱形晶格报告的归一化刚度；他们在相近的相对密度下测得 $E_{norm} \approx 0.54$,

$\bar{\rho}$ = 0.5。同样，我们的框架恢复出的八面体泡沫状结构属于空间群 $Fm\bar{3}m$，在 $\rho$ = 0.49 时达到 $E_{norm}$ = 0.58，与 Berger 等人 [28], 分析的八面体泡沫相当；他们报告$E_{norm}$ = 0.53，密度为 $\rho$ = 0.53。值得注意的是，Berger 等人研究中的八面体泡沫表现出各向异性行为，而我们在数据集中识别出的结构则接近各向同性性能。

### 2.2.4 | 五模态“超流体”设计

我们的数据集中还报告了五模超材料。这类结构经过专门设计，具有极高的体积模量，但抗剪切能力可以忽略不计，因此在体积载荷作用下保持刚性，同时几乎不抵抗形状变化；因此也称为“超流体” [35]。当 K 远大于剪切模量时，泊松比 $\nu = {}^{3-2}(\mathrm{G/K})\,2(\mathrm{G/K})_{+6} \approx {}^{0}.5$。五模超材料可用于弹性力学隐身，通过调控受保护区域周围的弹性响应，使被包围物体在力学上“不可感知” [36][37]。图 2c、d 展示了这种典型的“类流体”行为：五模态结构的体积模量相对较高，而抗剪切能力几乎为零。在此数据集中，我们构建了 72 种五模态结构，其 $0.05 \le \rho \le 0.16$。图 2b 黑色方框所指处展示了一种 K/G 比值较高的特殊五模结构。该结构的刚度矩阵特征值为 [0.09、0.09、0.09、0.22、0.22、27.28], , 其中最后一个值至少比其他值高两个数量级。与最大特征值对应的特征向量 e ≈ [0.58、0.58、0.58, 0, 0, 0] 呈现出三个相等的正应变和三个为零的剪应变，证实其主导变形模式为静水模式。该结构的剪切模量 G = 0.08 和体积模量 K = 13.30 得出 K/G ≈ 166。这一比值与文献报道的其他数值相当。例如，Lumpe 和 Stankovic [15] 确定了一个 K/G ≈ 113 的基准单胞；Wu 等人 [35] 实现了最高达 K/G ≈ 212 的比值。不过，也有研究展示了显著更高的数值，例如 Schittny 等人 [38] 报告的比值接近 K/G ≈ 1000；Lumpe 和 Stankovic[15] 则通过将基准单胞中的圆柱构件替换为双锥构件，进一步将其单胞性能提升至 K/G ≈ 670 。

尽管我们的结构并非总能达到先前研究所报告的最极端数值，但其中许多研究要么采用针对性的拓扑优化，要么系统地调整特定几何基元，以增强特定的力学响应。相比之下，我们的数据集完全通过立方晶体对称性操作生成，未针对任何具体任务进行调优。现有研究虽报告了特定类别的高性能架构，但由单一生成程序在一个大规模数据集中生成如此多样的极端材料族，仍相对少见。这些发现表明，受对称性约束的生成方法能够产生罕见的高性能几何结构，彰显了立方对称性设计空间的丰富性。我们有效地展示了，对称引导设计能够同时在多个性能维度上发掘大量高性能结构。

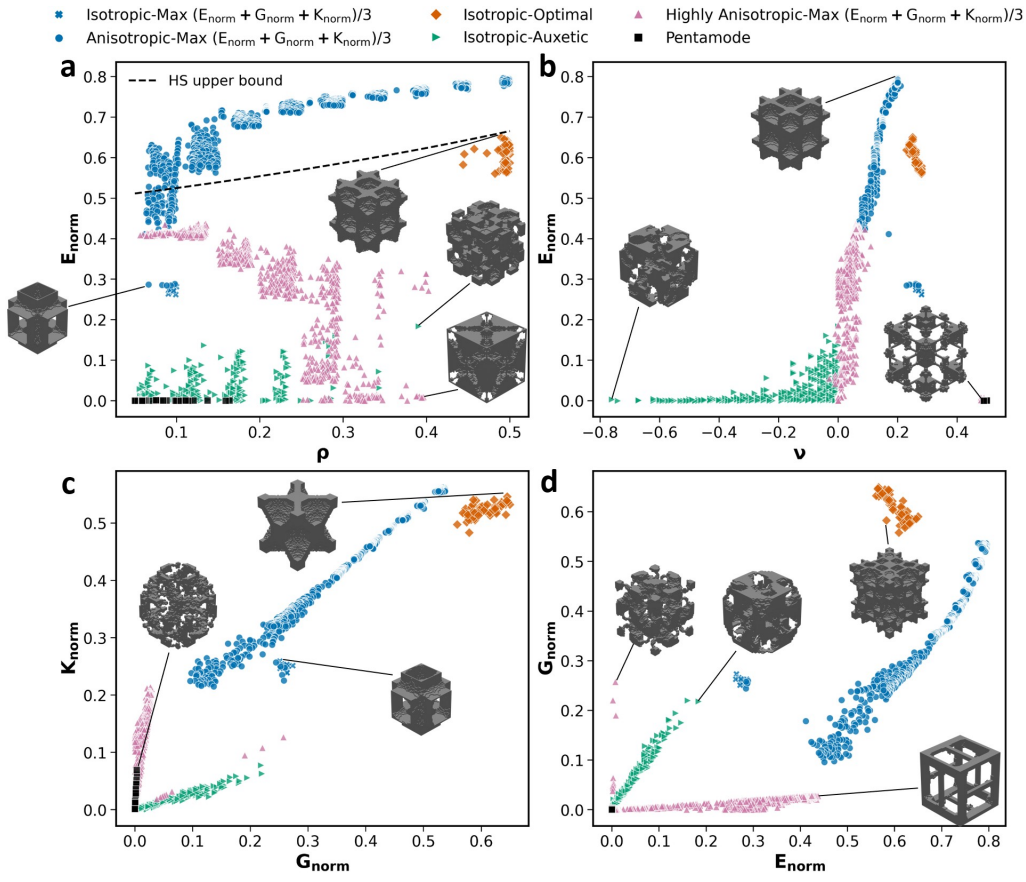



图2 各类极端结构的弹性性能。(a) 相对密度对归一化杨氏模量作图。(b) 泊松比对归一化杨氏模量作图。(c) 归一化杨氏模量对归一化体积模量作图。(d) 归一化杨氏模量对归一化剪切模量作图。

## 2.3 | 对称性对刚度特性的影响

为评估力学性能与立方晶体对称性描述符（即空间群、晶格类型和点群）之间关系的显著性，我们采用了非参数克鲁斯卡尔-沃利斯检验（$\alpha = 0.05$）。晶格类型对应三种立方布拉菲构型：简单立方（SC）、面心立方（FCC）和体心立方（BCC）。点群则属于立方晶系晶类：四面体型、双面体型、陀螺体型、六四面体型和六方八面体型系统。我们使用克鲁斯卡尔-沃利斯检验来评估连续型力学性能（$E_{norm}$、$G_{norm}$、$K_{norm}$、$\nu$和$Z$）的秩和及分布是否在不同对称性描述符之间存在显著差异。鉴于在力学性能空间中观察到的分布均呈右偏，因此选择了这一非参数方法。对于所有性能与对称性变量的比较，克鲁斯卡尔-沃利斯检验所得的 p 值均趋近于零。考虑到样本量极大，即使分布中的细微差异也会达到统计显著性，这一结果并不意外。因此，仅凭统计显著性不足以评估这些关系的强度。为更好地反映其实际重要性，我们计算了相应的效应量（$\epsilon^2$），以量化组间关联的大小，并结合对基础分布的可视化评估。$\epsilon^2$ 值的解读遵循 Mangiafico [39]提出的指南。

表1中的克鲁斯卡尔-沃利斯检验表明，空间群对泽纳各向异性和泊松比均有较大的效应，这一点可从相应的效应量看出。尽管单独考虑时，布拉菲晶格类型和点群对称性对力学性能的影响相对较小，但二者的不同组合会使性能分布的集中趋势和离散程度均出现显著变化。图3a、b清楚地显示了这一点：不同空间群的中位数和小提琴图分布形状均呈现出明显差异。值得注意的是，较高的对称性并不总意味着力学响应不同。例如，尽管点群对称性不同，空间群 $P23$ 和 $Pm3m$ 的性能分布却相似。这种相似性可能源于 $P23$ 与 $Pm3m$之间的子群关系。然而，空间群 $F23$ 和 $Fd3m$ 在相同性能指标上的分布差异更为显著，尽管$F23$ 是$Fd3m$的子群。

在针对布拉维晶格类型进行检验的各项力学性能中，Zener 各向异性比尤为突出，其效应量似乎比较其他布拉维晶格类型检验所得的效应量更大，不过仍处于通常归类为小效应的上限范围内。尽管如此，对基础分布的考察显示，面心立方晶格生成的结构具有更宽泛的 Zener 各向异性比范围，主要分布在0 – 2之间；而简单立方（SC）晶格则主要产生各向异性响应，其法向刚度更强$Z < 0.5$（补充信息第2节）。

此外，在低相对密度范围内，空间群$Ia\bar{3}$、$F432$、$F\bar{4}3c$和$Fm3c$中各有至少 10% 的结构表现出拉胀行为。后三者通过子群-超群关系紧密关联，这或许表明，该对称族中的特定对称特征会促成有利于负泊松比响应的几何构型。有趣的是，尽管$Ia3$不属于这一子群层级结构，其负泊松比结构占比却最高：约 12% 的几何构型表现出负泊松比，这说明多种对称机制都可能产生拉胀行为。此外，我们发现，数据集中 66 个各向同性最优结构中，53 个属于面心立方，32 个属于$m3m$ 点群，这或许表明这些对称参数特别有利于实现高刚度架构。

总体而言，这些结果表明，Zener 各向异性比和泊松比等力学性能受结构对称性的强烈支配。相比之下，剪切模量的大小表现出较弱的

对晶体结构的依赖，而杨氏模量和体积模量的敏感性则更低。这一区别表明，空间群主要调节力学行为的方向性，而非其整体刚度尺度，凸显了对称性是低相对密度结构材料中力学多样性的关键决定因素。有关对称性与性能分布的更多详情，请参阅补充信息第2节。

表 1 低相对密度结构（$\rho \in [0.05, 0.2]$）中力学性能与对称性描述符的假设检验结果汇总。对于克鲁斯卡尔-沃利斯检验，零假设为相应力学性能的分布在不同空间群、布拉维晶格和点群之间完全相同。

| 比较的变量 | 统计量（H） | 自由度 | N | $p$ 值 | 效应量（$\varepsilon^2$） | 解读 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 空间群 × $E_{norm}$ | 40018.2 | 35 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.08 | 中等 |
| 空间群 × $G_{norm}$ | 93740.4 | 35 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.19 | 中等 |
| 空间群 × $K_{norm}$ | 41482.5 | 35 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.08 | 中等 |
| 空间群 × Z | 169858.8 | 35 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.34 | 大 |
| 空间群 × $\nu$ | 163300.8 | 35 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.33 | 大 |
| 布拉维晶格 × $E_{norm}$ | 9264.9 | 2 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.02 | 小 |
| 布拉维晶格 × $G_{norm}$ | 18613.3 | 2 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.04 | 小 |
| 布拉维晶格 × $K_{norm}$ | 8770.3 | 2 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.02 | 小 |
| 布拉维晶格 × Z | 34643.1 | 2 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.07 | 小型 |
| 布拉维晶格 × $\nu$ | 19174.8 | 2 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.04 | 小型 |
| 点群 × $E_{norm}$ | 5028.9 | 4 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.01 | 小 |
| 点群 × $G_{norm}$ | 8796.3 | 4 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.02 | 小 |
| 点群 × $K_{norm}$ | 7322.4 | 4 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.02 | 小 |
| 点群 × Z | 14230.0 | 4 | 500,663 | 段落 <- 001 | 0.03 | 小 |
| 小点群 × $\nu$ | 10224.4 | 4 | 500,663 | $p$ <.001 | 0.02 | 小 |

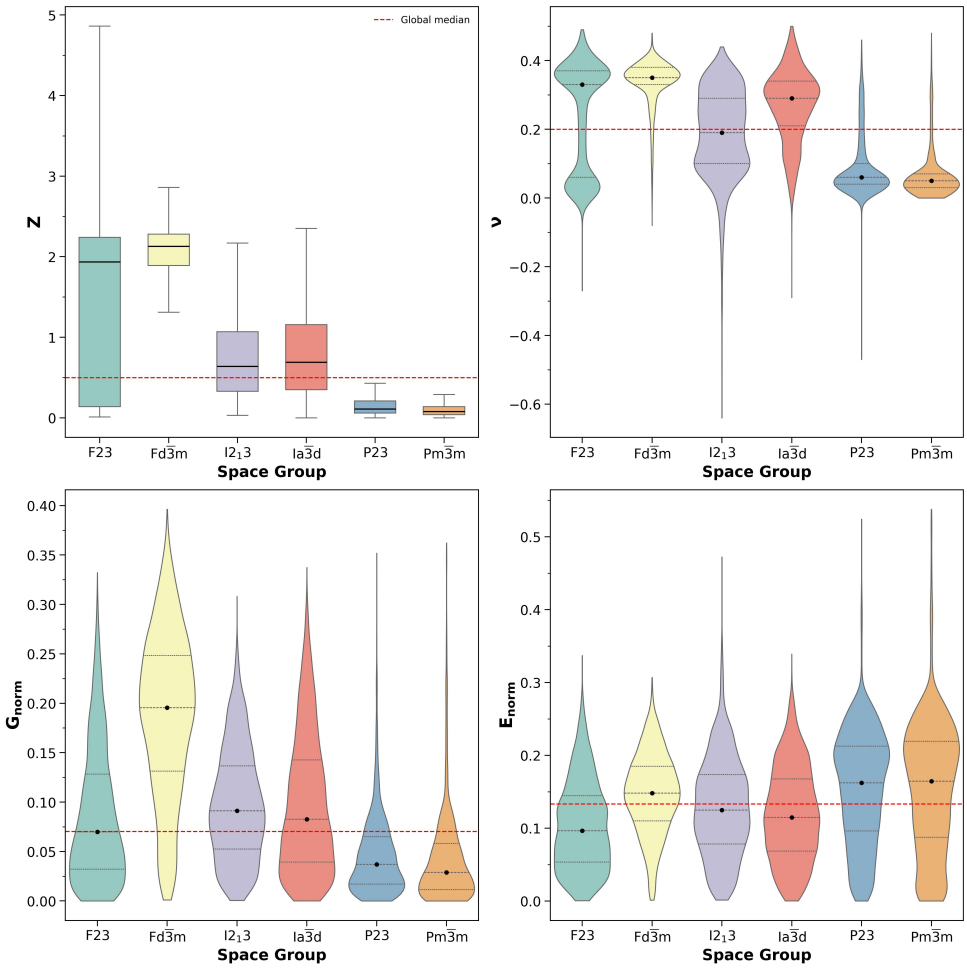



图 3 低相对密度范围内具有代表性的立方空间群的弹性模量和泽纳各向异性分布，并通过随机下采样进行平衡（$\rho \in [0.05, 0.2]$）。为清晰起见，仅展示部分具有代表性的立方空间群。所选空间群涵盖多个布拉维晶格和对称类，其性质分布各不相同。空间群 196、227、199、230、195 和 221 使用赫尔曼–莫冈符号标注。红色虚线表示图中所有立方空间群的总体中位数。（a）泽纳各向异性比 $Z$、（b）泊松比 $\nu$、（c）归一化剪切模量 $G_{norm}$，以及（d）100方向上的归一化杨氏模量 $E_{norm}$，展示了所选空间群的相关数据。

## 2.4 | 有限元结果

图 4a、b 显示了各向同性拉胀结构的左视图，其泊松比为 $\nu = -0.76$。沿 x 轴进行单轴拉伸加载时，结构在横向 y 轴上同步膨胀。图 4d 所示的相应冯·米塞斯应力场表明，变形响应主要由内部韧带网络控制。应力集中主要出现在这些韧带段上，体现出类手性弯曲机制的典型变形特征。单胞内的这种弯曲运动促使结构在轴向拉伸下发生横向膨胀，从而产生所观察到的拉胀响应。

图 4e、f、h 所示的高度各向异性构型在单轴加载下的刚度显著高于剪切时的刚度，且表现出近零泊松比（$\nu = 0.01$）。因此，沿 x 轴进行单轴加载时，结构几乎不发生横向变形（图 4f）。进一步考察单轴拉伸加载下的冯·米塞斯应力场可知，载荷主要由沿加载方向排列的细长桁架构件承受，这些构件上出现应力集中。相比之下，垂直于加载轴的构件基本不受应力，表明横向载荷传递极少。这种高度定向的承载机制抑制了侧向变形，并直接导致所观察到的近零泊松比。

在第2.2.3节中，我们将八隅体泡沫与图2c所示的各向同性最优结构进行比较。图4e–g展示了各向同性最优拓扑在单轴、剪切和静水加载下的冯·米塞斯应力场。在这三种加载条件下，应力分布都大致均匀，没有明显的应力局部化。相比之下，八面体泡沫虽然整体应力较为均匀，但在板状构件的连接处会出现局部应力集中 [40], ，这是由传力路径的突变所致。这凸显了我们的各向同性最优结构与传统八隅体泡沫之间的关键区别。各向同性最优拓扑并非由带有尖锐连接处的相交板构成，而是形成了平滑、连续的承载通路。这种几何连续性有助于应力逐步再分布，减轻连接处的应力放大，并促进多轴加载下形成更均匀的应力场。因此，与板式八隅体泡沫构型相比，其几何效率更高。

最后，考察五模结构在静水加载（图 4m）和剪切加载（图 4n）下的应力云图可知，载荷主要集中在细长桁架构件中。在静水加载下，这些构件主要发生轴向变形，呈现出拉伸主导响应，从而有效传递体积应力。进一步比较相应的应力标度可知，该结构在静水加载下承受的应力水平远高于剪切加载下的水平。这种显著差异符合五模超材料的典型特征：该结构实现了$K/G \approx 166$。

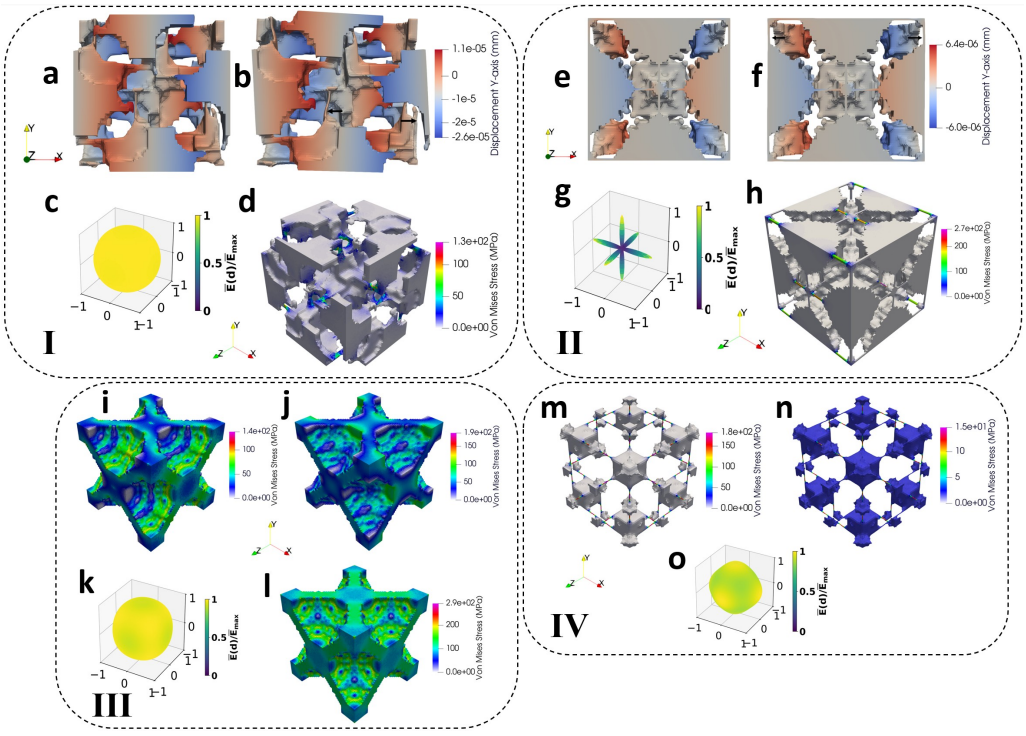



图 4 各向同性负泊松比样品、高度各向异性样品、各向同性最优样品和五模态样品的有限元分析。图中给出了刚度张量图，以展示这些结构弹性响应中的方向依赖性或各向同性程度，其中$E(d)$表示方向有效杨氏模量，$E_{max}$表示最大方向杨氏模量值。(a) 各向同性负泊松比样品的左视图，按沿 x方向单轴拉伸加载时 y轴场中的横向位移着色。(b) 各向同性负泊松比样品的左视变形图，展示沿 x方向单轴拉伸加载时的横向膨胀。(c) 各向同性负泊松比刚度张量图。(d) 单轴拉伸加载下各向同性负泊松比样品的冯·米塞斯应力场。(e) 高度各向异性样品的左视图，按沿 x方向单轴拉伸加载时 y轴场中的横向位移着色。(f) 高度各向异性样品的左视变形图，展示沿 x方向单轴拉伸加载时没有横向膨胀。(g) 高度各向异性样品的刚度张量图。(h) 单轴拉伸加载下高度各向异性样品的冯·米塞斯应力场。(i) 单轴拉伸加载下各向同性最优样品的冯·米塞斯应力场。(j) 剪切加载下各向同性最优样品的冯·米塞斯应力场。(k) 各向同性最优样品的刚度张量图。(l) 静水加载下各向同性最优样品的冯·米塞斯应力场。(m) 静水加载下五模态样品的冯·米塞斯应力场。(n) 剪切加载下五模态样品的冯·米塞斯应力场。(o) 五模态样品的刚度张量图

## 2.5 | 3D-卷积神经网络代理模型

卷积神经网络最初是为计算机视觉而开发的，凭借有效捕捉空间特征和模式的能力，在各种图像相关任务中取得了显著成功 [41][42][43][44]。近年来，研究人员越来越多地利用卷积神经网络来预测材料的力学性能，发挥其捕捉数据集中复杂非线性结构-性能关系的能力 [3][45][46]。训练完成后，这些模型可以根据几何形状快速推断材料行为，在保持较高预测准确率的同时，作为传统有限元模拟的高效计算代理模型。在此，我们利用包含约 195 万个矢量化拓扑结构的完整数据库，训练并评估一个含有 ~7.7 百万个参数的卷积神经网络。预测目标为单轴、剪切和静水加载条件下的应变能密度（$U_a$、$U_s$、$U_d$）。该模型使用 TensorFlow 和 Keras 构建，其架构设计借鉴了 ResNet 架构。ResNet 通过残差连接改善反向传播期间的梯度流，并缓解深度网络中的梯度消失问题 [42]。模型输入张量的形状为 (N,65,65,65,1)，其中 N 表示批量大小， 65×65×65对应 x、y 和 z 轴方向上的体素网格尺寸，最后一维表示单个输入通道。网络以一个包含 32 个滤波器、卷积核尺寸为 3 的卷积层开始，后接一个批归一化层。添加批归一化层是为了提高训练稳定性 [47]。随后是四个残差块，滤波器数量从 32 逐步增加至 256；每个残差块的起始卷积层步幅为 2，以执行空间下采样。经过卷积和残差运算后，特征图被展平并传入全连接层，最终生成三个线性输出，分别对应预测的单轴、剪切和静水应变能密度（图 5a）。模型采用 Adam优化器、1e-3 的学习率和 32 的批量大小，按照随机划分的 80/10/10 训练集-验证集-测试集进行训练，经过 10 个周期后收敛。在留出测试集上评估时，对于所有预测目标，该卷积神经网络的准确率均至少达到 $R^2$=99.9%，且归一化均方根误差低于 2%（以真实值的四分位距归一化）。这些结果表明，该卷积神经网络能够准确近似复杂超材料结构的弹性性能，从而在有限元验证前实现快速高通量筛选。关于完整模型架构和训练方案的更多详情，请参阅补充信息第 3 节。

此外，我们还对第 2.4 节讨论的各向同性负泊松比结构的卷积神经网络预测结果进行了事后显著性分析。通过比较网络对沿100方向的杨氏模量预测中梯度幅值较大的区域与单轴加载下得到的冯·米塞斯应力场，可以观察到两者在定性上明显对应（图 5c）。具体而言，网络识别出的梯度幅值较大的韧带区域，往往与应力较高的韧带在空间位置上重合，这表明卷积神经网络已学会将力学关键几何特征与其预测结果联系起来。梯度幅值较大的区域表明，在针对该结构生成预测时，模型对这些区域尤为敏感。尽管在定性上相符，但不应将显著性图解读为力学相关性的真实标示。基于梯度的归因方法应作为启发式工具使用，因为它们未必总是与具有明确物理意义的应力或应变分布直接对应。在某些情况下，显著区域的分布可能难以解释，也未必直接对应具有力学意义的区域。尽管如此，审慎使用显著性分析，仍可为探查网络学到的内部表征、启发关于重要几何基元的设想提供有价值的补充工具。这些结果凸显了深度学习的潜力：它不仅可以作为力学性能的替代预测器，还能帮助揭示值得进一步针对性研究的结构-性能关系。有关这些显著性图实现方式的更多详情，请参阅补充信息第 4 节。

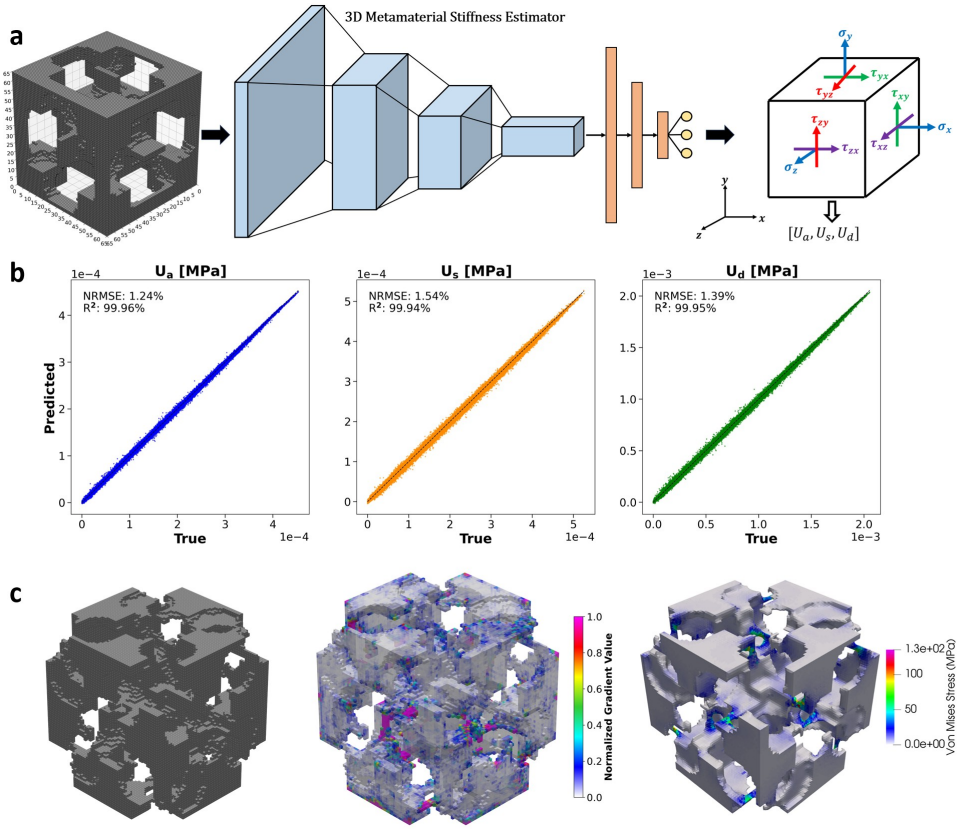



图5 用于刚度预测的CNN流水线的概述与性能。(a) CNN流水线。(b) 对单轴、剪切和静水应变能密度预测的准确性。(c) 对一种各向同性拉胀结构的可解释性分析，显著性图的梯度归一化至0到1。

## 3 |结论

在此，我们提出了一种基于立方晶体对称性的超材料晶胞设计方法，突破了常见的杆件、板式和壳式晶格设计，并创建了一个包含近两百万个晶胞的新数据集。我们的研究重点是探究立方空间群对称性如何支配弹性力学响应，并表明特定的对称操作会显著影响各向异性和泊松比特性。借助基于对称性的生成算法，我们展示了生成多种极端超材料拓扑结构的能力，包括各向同性最优、各向同性负泊松比、高度各向异性和五模态结构。该数据集所呈现的全面超材料族目录，为研究人员和工程师提供了丰富多样的设计空间，涵盖各向同性与各向异性响应，以及刚性和柔顺结构。这种广度使人们能够系统地选择和调整晶胞几何形状，以满足特定应用的性能要求，包括生物医学器件、航空航天结构和弹性力学隐身。除线弹性之外，该数据集所包含的几何形状还为未来研究多功能行为奠定了基础，例如电输运与热输运的耦合，以及强度、韧性和其他非线性力学响应。

作为数据集的补充，训练好的深度学习代理模型能够快速、大规模地筛选超材料拓扑结构。该框架不仅可用于正向性能预测，还可支持逆向设计。通过探索学得的结构-性能关系空间，该模型能够生成此前未见过的单胞架构，其刚度值超过原始数据集中观测到的值，展现出其作为数据驱动的超材料发现与优化实用工具的潜力。

## 4 |方法

### 4.1 | 拓扑生成

我们开发了一种高通量生成框架，用于合成受36个立方空间群约束的架构材料，对应第195至230号空间群。受晶体学对称性原理启发， [14],将单胞离散为分辨率为 $65^3$, 的二值体素网格，并以完全致密的固体结构作为初始状态。随后施加可控的随机侵蚀，使相对密度达到目标范围 $\rho \in (0, 0.5]$,，同时严格遵守各空间群特定的对称操作和周期性边界条件。最初生成了逾两百万个保持对称性的晶格，随后剔除了$\rho < 0.05$的结构，以避免潜在的网格划分和数值稳定性问题。此外，还移除了所有违反周期性边界条件的单胞，最终得到一个约含195万个有效结构的数据集。通过这一生成框架，我们生成了丰富多样的拓扑结构，涵盖弯曲主导和拉伸主导结构，以及开孔和闭孔结构。虽然有些几何形状与成熟的晶格设计相似，但许多结构完全新颖，具有复杂的片状承载壁或封闭空腔形态。拓扑生成算法的详细信息见补充信息第1节。

### 4.2 |网格划分

从表示超材料几何结构的三维二值数组生成网格的流程包含几个关键步骤。首先，使用 MATLAB iso2mesh 工具箱提取

超材料 [48] 的边界网格表面。随后，通过 CGALmesh 二进制可执行文件[49], 实现的网格划分算法使用预言机处理表面交点，并依据受限德劳内三角剖分原理计算交叉点 [50, 51], ，从而确保生成周期性且同胚的表面网格。接着，应用逻辑掩膜识别单胞包围盒内的表面单元，并通过拉普拉斯平滑增强网格的稳健性。利用细化后的表面网格，通过 TetGen [52], 生成表示超材料三维体积的四面体单元，得到二次四面体网格。最后，将处理后的网格数据（包括节点和单元）保存为 ABAQUS 输入文件格式（.inp），之后使用 meshio [53]将其转换为 Code-Aster 网格文件（.med）。

## 4.3 | 有限元建模

有限元仿真使用 Code Aster（v14.06）进行，计算资源由加拿大数字研究联盟提供。每个单胞的组成材料均建模为各向同性线弹性钢，其杨氏模量为$E_s$ = 205,000 兆帕，泊松比为 $\nu_s$ = 0.29。单胞模型采用标准周期性边界条件 [54]。施加单轴、剪切和静水加载，以计算相应的应变能密度（$U_a$、$U_s$、$U_d$）。利用这些量提取三个独立的刚度张量分量（$C_{11}, C_{12}, C_{44}$），并据此进一步求得有效弹性常数（$E$、$G$、$K$、 $\nu$）和 Zener 各向异性比$Z$。

## 4.4 | 可解释性

为深入了解卷积神经网络的预测行为，我们采用三维显著性图来识别每个单胞中对模型预测影响最大的体素，从而衡量输入敏感性。显著性图使用 SmoothGrad 方法计算；这是一种基于梯度的可解释性技术，通过输入扰动降低梯度噪声，从而增强显著性图 [55]。具体而言，SmoothGrad 通过添加高斯噪声生成多个带噪输入副本，计算模型输出相对于每个副本的梯度，并对所得梯度取平均，以突出持续影响预测的区域。按照 Smilkov 等人 [55] 的研究，我们对 50 个带噪副本取平均，并将高斯噪声的方差设为 0.2。此过程为每个单胞生成一张 65×65×65 体素级显著性图。随后，我们对显著性图应用掩膜，仅保留对应于结构存在位置处体素的梯度，从而分离出具有物理意义的归因。此外，为避免少数极端梯度值主导可视化结果，我们将显著性值截断在第99百分位数。

## 4.5 | 实验

为验证我们的有限元结果，我们制作了三种具有代表性的超材料结构，并进行了单轴压缩试验，以提取其有效杨氏模量。数据集中的两种结构采用聚乳酸+，通过 Prusa Mk4 上的熔融丝材制造（FFF）制成：一种简单的几何晶格（图 6d）和一种各向同性最优设计（图 6b），两者尺寸均为 30 × 30 × 30 毫米。为确定母体材料的块体性能，我们专门制作了一组由 10 个块体试样组成的样品（图 6a）。块体试样按照 ASTM D695 标准[56]中规定的标准尺寸 12.7 x 12.7 x 50.8 毫米制成。所有采用聚乳酸+ 打印的样品均以层纹垂直于加载轴的方向放置。作为额外的验证步骤，我们选用八节点桁架（OT）这一理论和实验刚度响应均已得到广泛研究的

超材料结构，制作了五个 OT 晶格（图 6e）。随后，如图 6c 所示，使用 Instron 5848微型试验机对这些样品进行单轴压缩表征。在两块平行板之间施加恒定的 1.3 毫米/分钟位移速率，并使用量程为 2,000 牛顿的载荷传感器测量载荷。连续记录力和位移数据，随后沿 x 轴平移数据，以排除初始就位阶段的大部分相关位移，从而得到最终的力-位移曲线。为确定每个样品的杨氏模量，将施加载荷除以理论块体横截面积（$L_{格}^2$），换算为名义表观应力；应变则根据试样的名义高度计算。对所有样品采用统一的 0.1 毫米位移窗口，并通过对该线性区间内计算得到的响应取平均值，获得有效杨氏模量。所有块体样品的平均测得杨氏模量为 1238.5 ± 20.6 兆帕，这与 Pastor-Artigues等人 [57] 的研究结果相近；他们报告的聚乳酸平均压缩模量为 1370.2 兆帕。图 6f 比较了各晶格样品的相对刚度及其对应的有限元法预测结果。

各向同性最优晶格的相对误差为 43.3%，而八节点桁架为 50.0%，简单晶格为 7.1%。简单晶格与有限元法的预测结果较为吻合，而八节点桁架和各向同性最优结构则存在较大的差异。值得注意的是，尽管八节点桁架的相对误差较大，但与有限元法结果的绝对偏差很小，仅为 0.02；相比之下，各向同性最优晶格的偏差为 0.13。各向同性最优拓扑所呈现的较大差异可能表明，该结构对制造约束尤其敏感。具体而言，闭孔结构复杂的内部几何形状可能给 3D打印机带来挑战，导致实际几何形状偏离理想设计，进而改变其力学响应。此外，值得注意的是，我们仅测试了一个方向；若要更全面、深入地表征这些晶格，则需要使用计算机辅助设计重新调整晶格的方向，以便分别沿 [110] 和 [111]方向加载，类似于 Yu等人 [58]的研究。如需了解实验结果的更多详情，请参阅补充信息第 5 节。

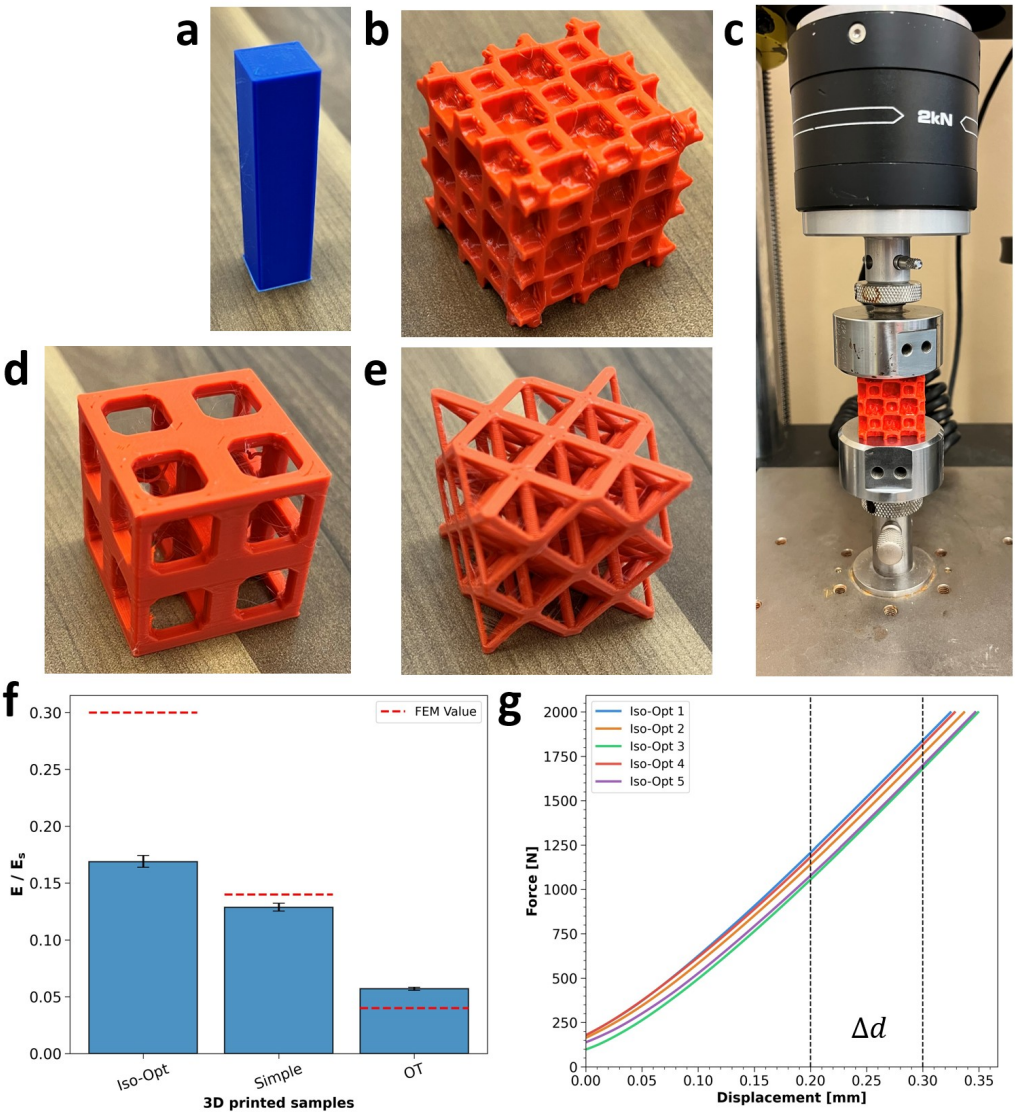



图6 熔融丝材制造打印架构材料的实验制备与力学测试。(a) 块体样品；(b) 以1.5cm晶胞打印为2×2×2阵列的各向同性最优样品。(c) 准静态单轴压缩测试装置，正在加载各向同性最优样品。d) 以1.5cm晶胞打印为2×2×2阵列的简单样品。e) 以1.5cm晶胞打印为2×2×2阵列的八面体桁架样品。f) 所有受测晶格样品相对刚度平均值的比较。误差条表示基于所测刚度和压缩模量极值确定的最坏情况界限。g) 五个各向同性最优样品的力-位移曲线， $\Delta d$ 表示沿线性区域用于计算杨氏模量的位移范围。

## 数据可用性

数据和代码将在加拿大数字研究联盟网站上提供。

## 致谢

作者衷心感谢加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC）和加拿大数字研究联盟提供的资金支持。作者还感谢多伦多大学机械与工业工程系的Hani Naguib博士和Adam Pearson博士提供机械测试设施的使用权限。Naguib博士允许使用其实验室，Pearson博士则提供了安全、正确操作测试设备的培训。此外，作者感谢多伦多大学机械与工业工程系的Peter Di Palma和Sanjeev Chandra博士协助进行样品3D打印。

## 利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

## 支持信息

**第 1 节- 拓扑生成方法**

图 S1 展示了拓扑生成算法的逐步流程。该流程从尺寸为 65×65×65 的初始块体材料开始。

步骤 1：随机空洞播种：首先随机选择并设置若干空洞种子点，种子数量 $N_{seed}$ 在范围 $1 \leq N_{seed} \leq 6$ 内选取。这些空洞种子点作为材料移除的初始起点。在此图中使用了一个种子点。

步骤 2：通过空间群操作施加对称性约束：接下来，根据目标晶体空间群应用对称操作。在此示例中，施加了空间群 195（P23）。这些对称操作应用于结构中的初始种子点，确保设计从一开始就遵循所选空间群的约束。

步骤 3：在对称性约束下进行顺序侵蚀：随后对空洞种子区域进行逐步侵蚀，同时在施加对称性约束的情况下，沿种子边界随机移除材料。该顺序侵蚀过程持续进行，直至达到目标相对密度。由于侵蚀具有随机性，结构的某些区域可能会失去连通性。为防止出现孤立的悬浮物体，系统会施加连通性约束，将任何分离元素重新连接到主体结构上，从而确保结构连续。

步骤 4：周期性与对称性约束的细化：侵蚀过程结束后，所得结构同时强制满足周期性边界条件（PBCs）与完整对称性。

步骤 5：最终优化与缺陷去除：作为最后一步，重新施加周期性边界条件，以确保边界处的平移连续性。随后去除先前步骤中可能引入的小孔洞和小物体。该过程的结果是一个施加了对称性约束且拓扑连通的结构，并符合指定的晶体学约束。

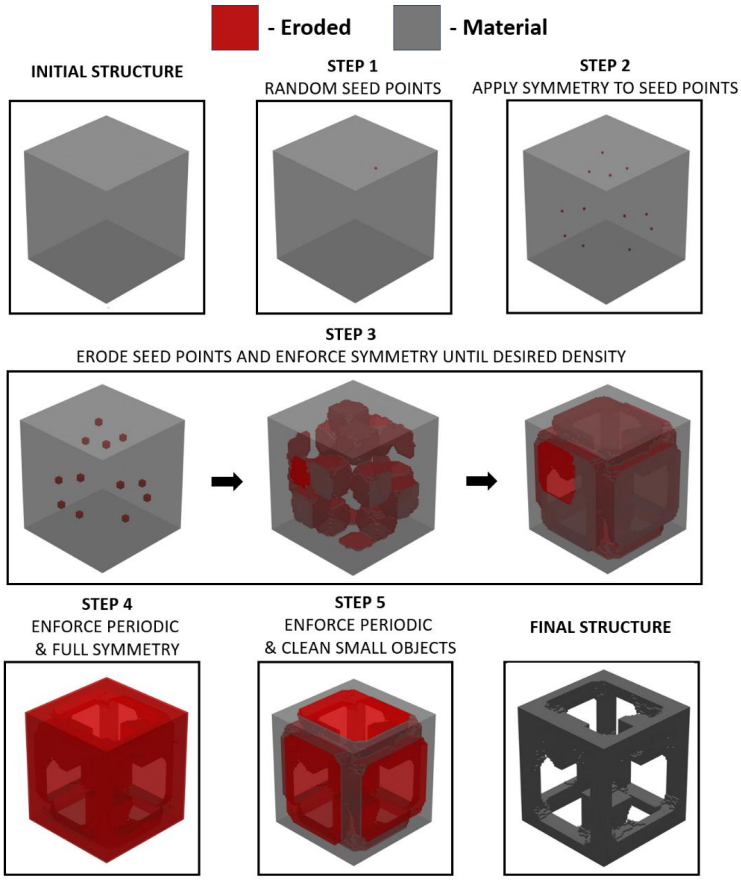



图 S1：用于拓扑生成的基于立方晶体对称性的侵蚀算法 .

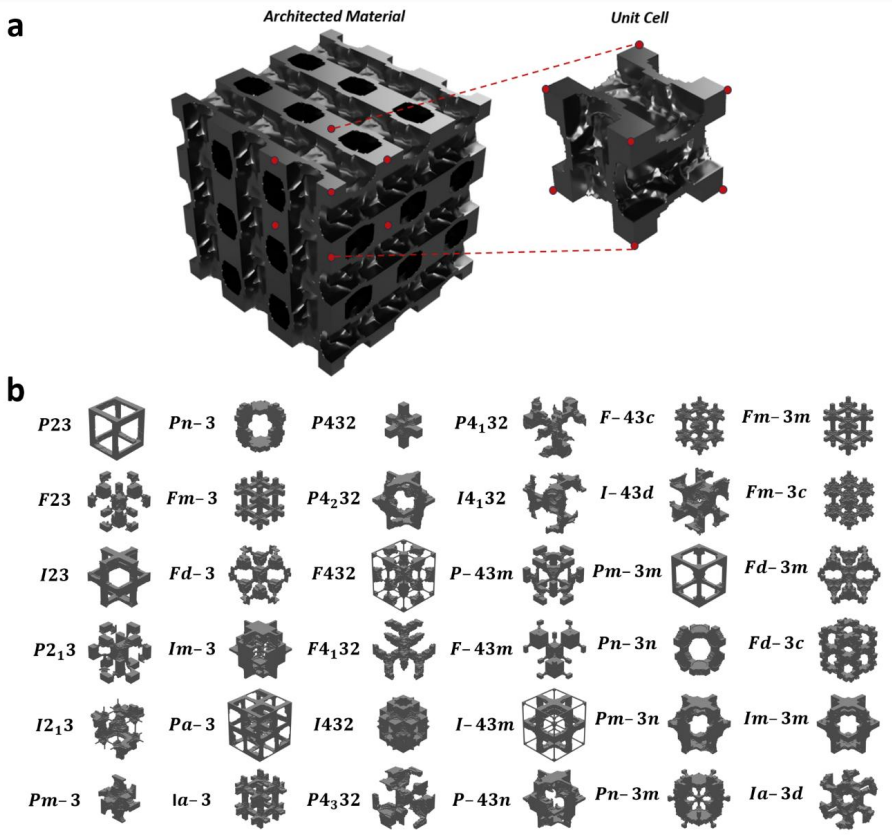



图 S2：a) 由 3x3x3 周期性重复晶胞组成的架构材料的等轴测图。b) 来自各立方空间群、相对密度范围为 0.1 - 0.2 的代表性立方晶胞样品。

**第 2 节——数据集中单胞的力学性能**

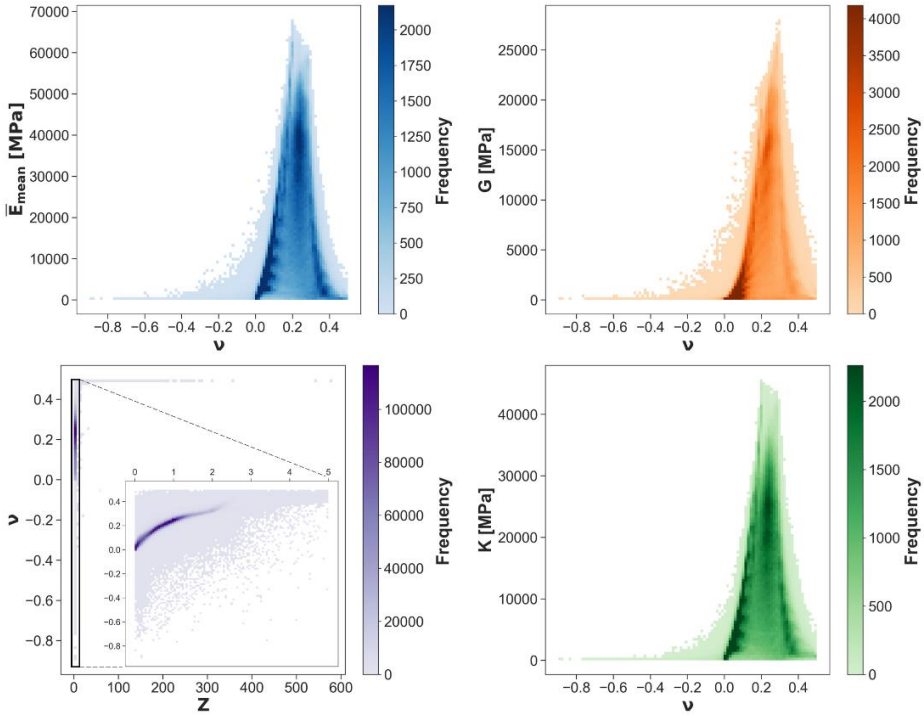



图 S3：完整数据集中泊松比、Zener 各向异性比和有效弹性模量的联合分布。

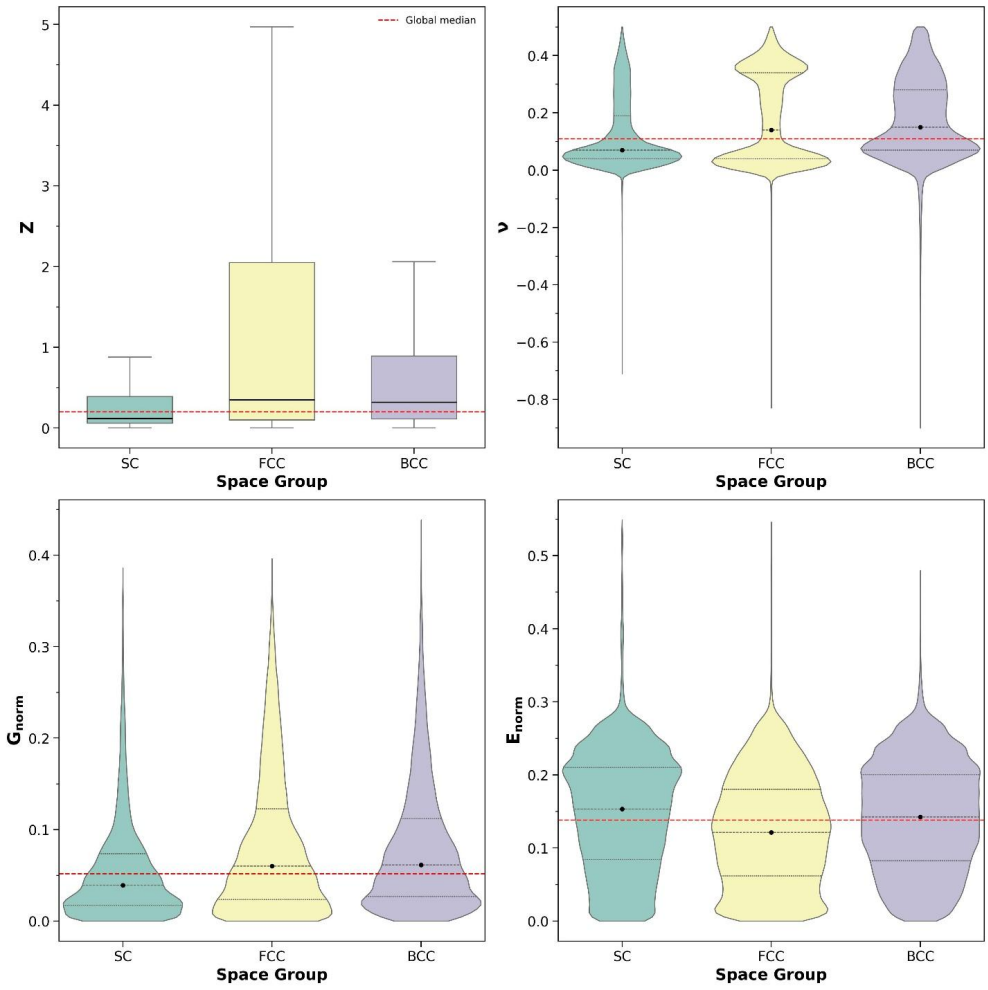



图 S4：低相对密度范围内不同布拉菲晶格类型的弹性模量和泽纳各向异性分布，经随机下采样平衡（

$\rho \in [0\ 05, . .2]$）

0

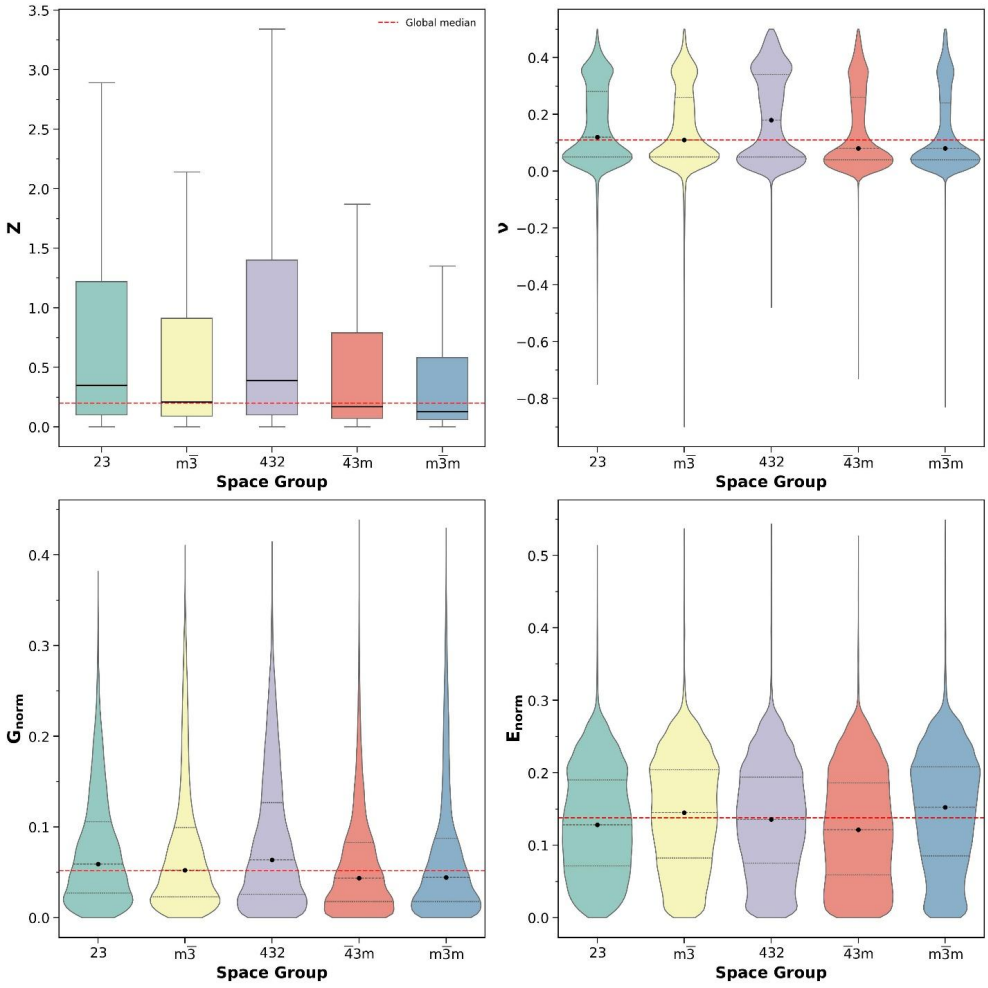



图 S5：低相对密度范围内各点群的弹性模量和泽纳各向异性分布，通过随机下采样进行平衡（$\rho \in [0.05, 0.2]$）

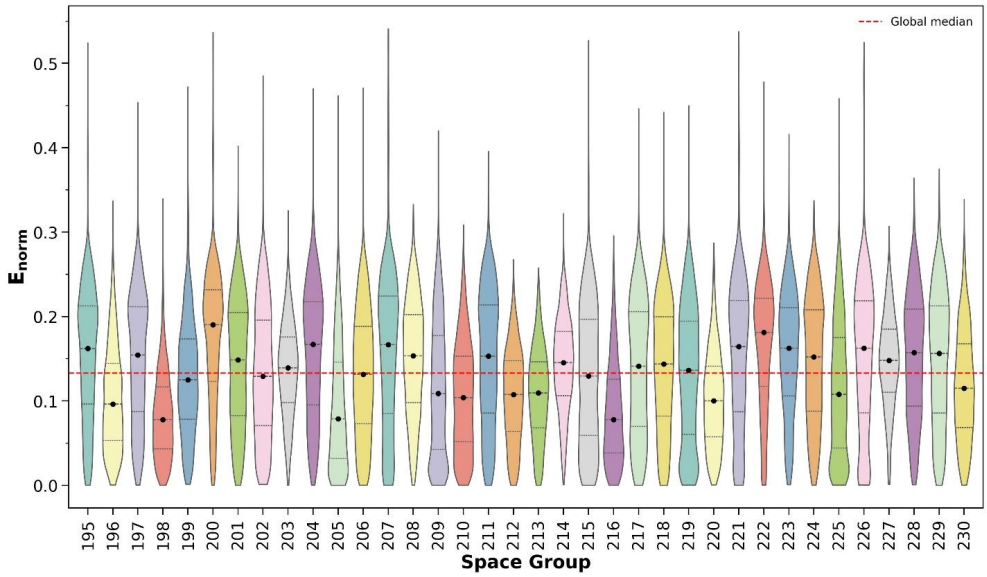



图 S6：低相对密度范围内所有空间群中 $E_{norm}$ 的分布，经随机下采样平衡（ρ ∈ [0.05, 0.2]）

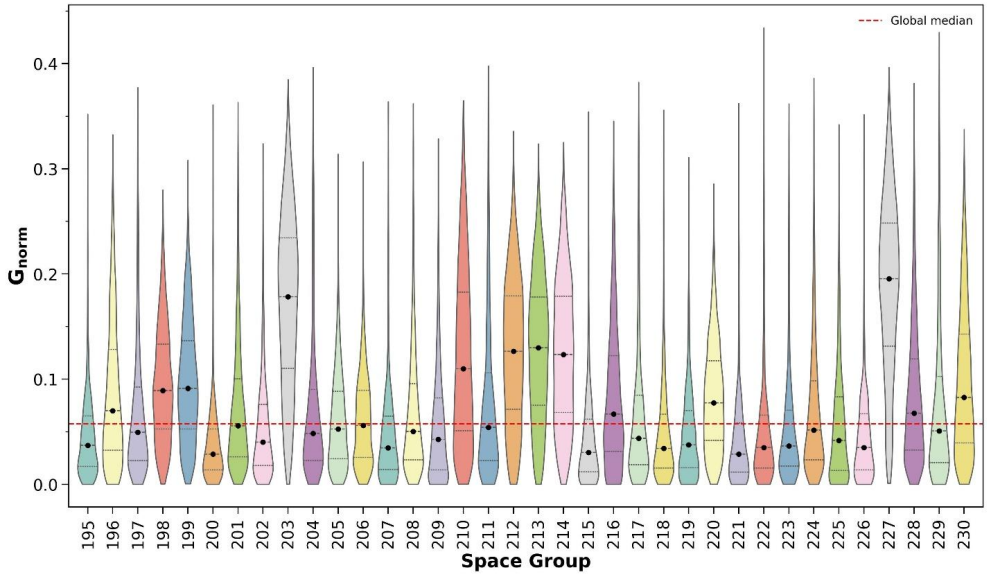



图 S7：低相对密度范围内所有空间群中 $G_{norm}$ 的分布，经随机下采样平衡（ρ ∈ [0.05, 0.2]）

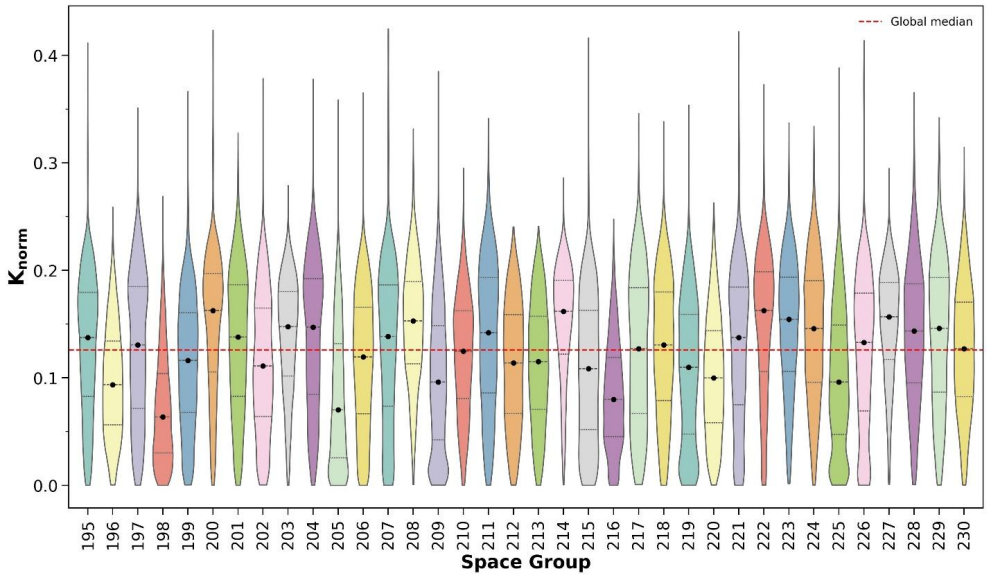



图 S8：低相对密度范围内所有空间群的$K_{norm}$ 分布，通过随机下采样进行平衡（ρ ∈ [0.05, 0.2]）

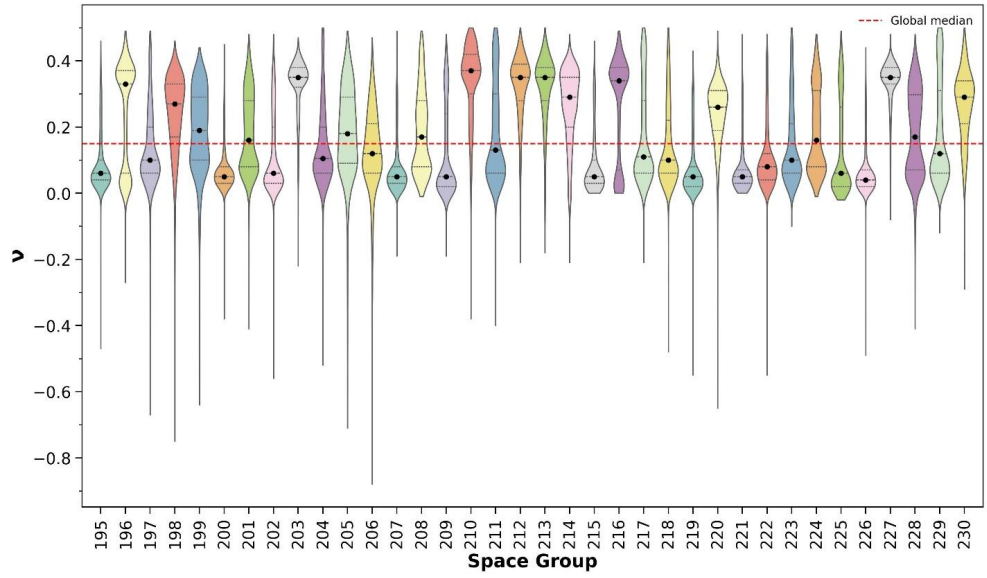



图 S9：低相对密度范围内所有空间群的$\upsilon$ 分布，

通过随机下采样进行平衡（ρ ∈ [0.05, 0.2]）

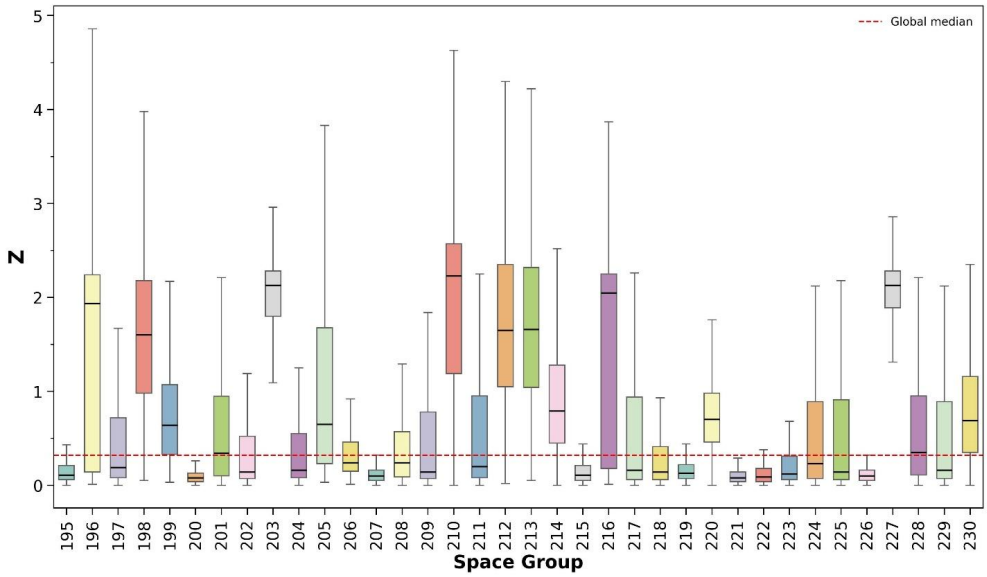



图 S10：低相对密度范围内所有空间群中$Z$ 的分布，通过随机下采样进行平衡（ρ ∈ [0.05, 0.2]）

**第3节 - 机器学习**

该卷积神经网络架构（图 S11）基于 ResNet 模型[1], 利用残差连接，使深度模型能够高效提取层次特征，同时保持稳定的梯度流。该模型由多个残差块组成，通道深度逐步增加，这些残差块由堆叠的3 × 3 卷积层构成，并采用批归一化和 ReLU 激活，在需要时使用 1 × 1 卷积跳跃连接以匹配特征维度。

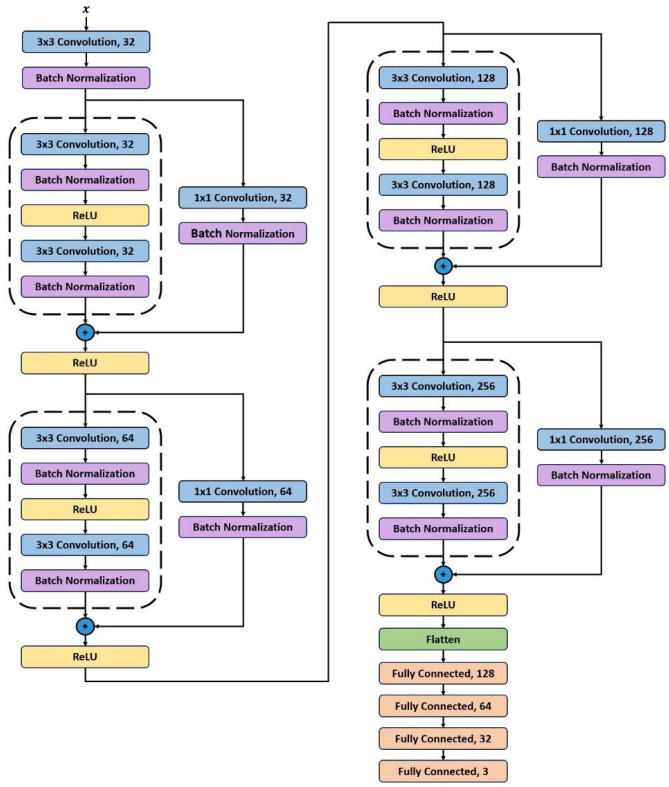



图 S11：用于预测体素化结构应变能密度的三维卷积神经网络模型架构。

训练损失和验证损失均在第一个 epoch 内收敛，并在剩余训练过程中保持稳定且接近于零（图 S12）。这种快速收敛

这归因于数据集的规模，因为每个训练周期约包含 50,000 个参数更新步数。训练曲线与验证曲线高度一致，表明模型具有良好的泛化能力，且未出现过拟合。

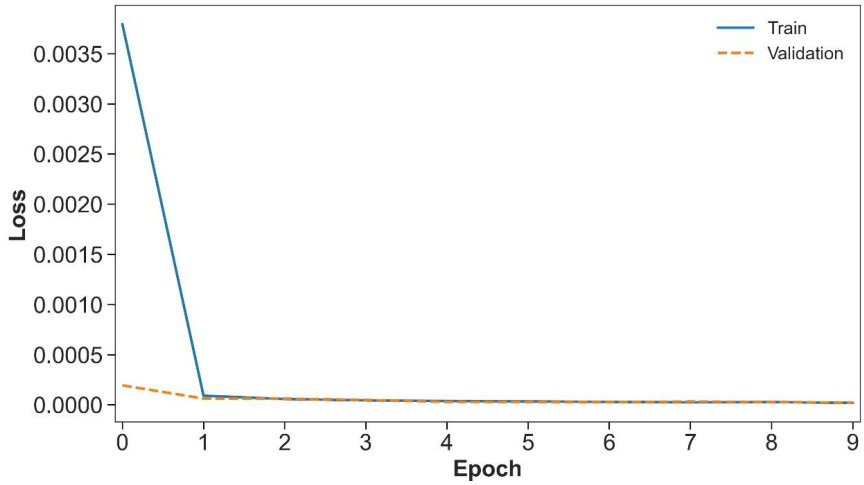



图 S12：训练模型的训练损失和验证损失

为了更好地理解卷积神经网络的能力，我们将模型在低对称性结构上训练并在高对称性群上评估时的性能（图 S13a）与相反情形——在高对称性结构上训练并在低对称性群上评估（图 S13b）——进行比较。尽管两种训练情形都取得了较高的预测准确率，但仅在低对称性数据上训练的模型明显优于仅在高对称性数据上训练的模型。这表明低对称性结构提供的机制信息能够很好地泛化到高对称性，而仅在高对称性上训练则不能同样好地泛化到低对称性。

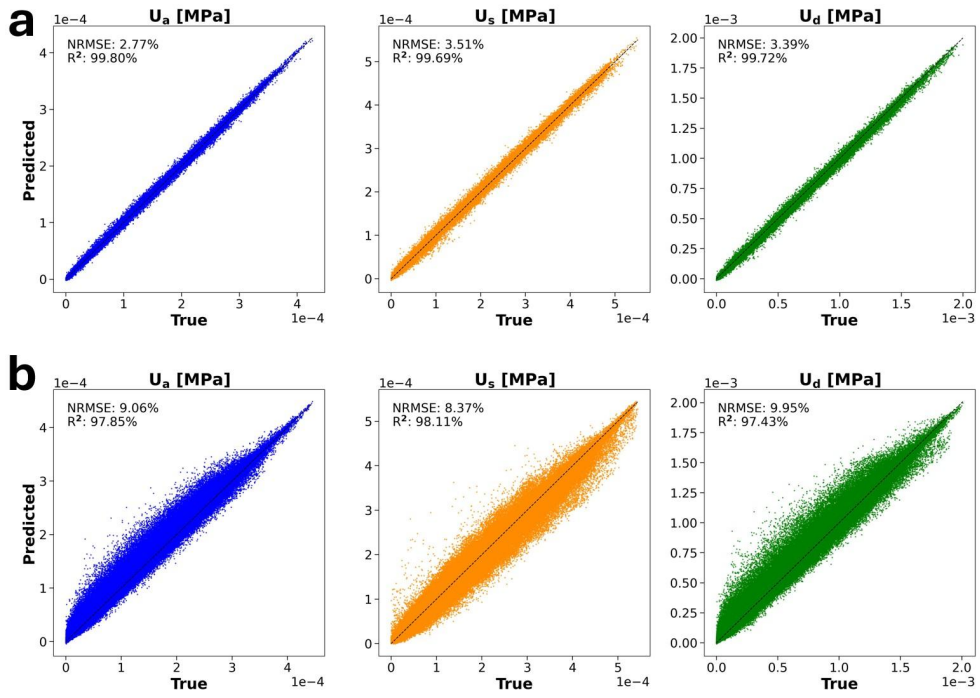



图 S13：a) 在 195–200 上训练的卷积神经网络预测空间群 229 和 230 的样品时的奇偶图。b) 在 221–230 上训练的卷积神经网络预测空间群 195–199 的样品时的奇偶图。

**第 4 节 - 可解释性**

为了深入了解模型的行为，我们使用三维显著性图来可视化对于给定输入单胞的输出最为相关的体素。为了确定影响最大的体素，我们采用了 SmoothGrad 技术 [2], 这是一种基于梯度的技术，通过向输入中添加噪声来减少噪声，从而增强可解释性。SmoothGrad 的工作原理是创建多个输入副本，并向其中添加高斯噪声进行扰动，然后计算输出相对于每个副本的梯度，并对所得梯度取平均值，以突出显示对预测影响最大的区域。梯度越高，体素对输出的影响越大。

原始梯度显著性图的计算公式如下：

$$S(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_V}\right) \tag{A.1}$$

其中，$V$ 是体素总数（$V = 65^3$），$x$ 是二值输入体素矩阵，而$f(x)$是卷积神经网络的标量预测。使用 TensorFlow 的梯度带方法计算梯度。

SmoothGrad 随后在原始梯度方法的基础上，通过对输入的 $N$ 个扰动版本的梯度取平均来构建，每个扰动版本均通过添加高斯噪声生成，表示为$\mathcal{N}(0, \sigma^2)$。遵循 Smilkov 等人的工作[2]，我们使用的 $N$ 值为 50，并将方差设为 0.2。

$$\hat{S}(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S(x + \mathcal{N}(0, \sigma^2))^2 \tag{A.2}$$

随后，我们对 65x65x65 显著性图施加掩膜，仅保留结构所在体素对应的梯度，从而分离出具有物理意义的归因。由于输入 x 是与显著性图维度相同的二值体素网格，掩膜后的显著性图通过对二者进行逐元素乘法得到。

$$\hat{S}_{masked} = \hat{S} \odot x \tag{A.3}$$

此外，为防止少数梯度极高的体素在视觉上压低其他有意义的激活值，我们将梯度值截断至第99百分位数。这一步骤在保留相对重要性的同时减轻离群值的影响，从而提高可解释性。最后，将梯度归一化到介于 [0, 1] 之间。

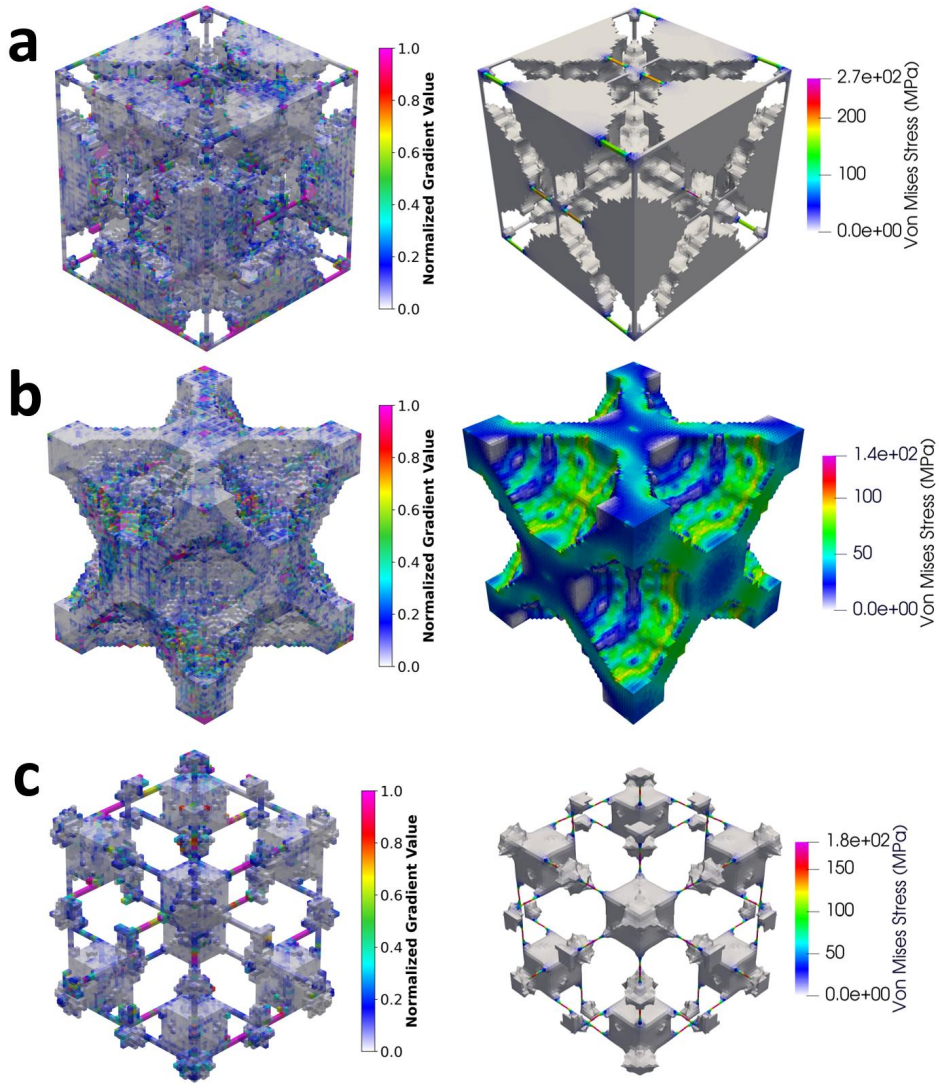



图 S14：极端结构的显著性图与冯·米塞斯应力云图对比。a）高度各向异性结构。左侧为根据预测杨氏模量的梯度计算得到的显著性图。右侧为单轴加载下的冯·米塞斯应力云图。b）各向同性最优结构。左侧为根据预测杨氏模量的梯度计算得到的显著性图。右侧为单轴加载下的冯·米塞斯应力云图。c）五模结构。左侧为根据预测体积模量的梯度计算得到的显著性图。右侧为静水加载下的冯·米塞斯应力云图。

**第5节 - 实验验证**

块体试样的预期质量通过将样品体积与聚乳酸+ （1.23 g/cm3）[3]的密度相乘计算得出。对于每个打印的样品，预期质量估计为$mass = V_T\bar{\rho}\rho_s$。其中$V_T$ 为样品总体积，$\bar{\rho}$ 为相对密度，$\rho_s$ 为基材的密度。

表 S1：块体和晶格样品的质量，均以克为单位

| 样品# | Bulk | Iso-Opt | 简单 | OT |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 9.24 | 18.65 | 9.19 | 5.83 |
| 2 | 9.27 | 18.64 | 9.21 | 5.82 |
| 3 | 9.25 | 18.65 | 9.21 | 5.82 |
| 4 | 9.36 | 18.65 | 9.20 | 5.83 |
| 5 | 9.35 | 18.64 | 9.20 | 5.83 |
| 6 | 9.34 | - | - | - |
| 7 | 9.26 | - | - | - |
| 8 | 9.29 | - | - | - |
| 9 | 9.40 | - | - | - |
| 10 | 9.25 | - | - | - |
| 平均值 ± 标准差 | 9.30 ± 0.06 | 18.65 ± 0.01 | 9.20 ± 0.01 | 5.83 ± 0.01 |
| 预期质量 | 10.08 | 16.27 | 9.96 | 6.64 |

表 S2：块体和晶格样品的压缩模量，均以兆帕为单位

| 样品编号 | Bulk | Iso-Opt | 简单 | OT |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 1218.41 | 210.92 | 160.37 | 70.78 |
| 2 | 1217.25 | 207.27 | 158.50 | 70.83 |
| 3 | 1239.16 | 208.84 | 158.50 | 70.59 |
| 4 | 1264.69 | 211.14 | 159.40 | 70.80 |
| 5 | 1258.47 | 207.26 | 160.03 | 70.26 |
| 6 | 1249.48 | - | - | - |
| 7 | 1243.71 | - | - | - |
| 8 | 1212.24 | - | - | - |
| 9 | 1263.45 | - | - | - |
| 10 | 1218.33 | - | - | - |
| 平均值 ± 标准差 | 1238.52 ± 20.57 | 209.08 ± 1.89 | 159.36± 0.86 | 70.65 ± 0.24 |

表 S3：晶格样品的相对刚度

| 样品 | 测量相对刚度 | 预期相对刚度 |
|---|---|---|
| Iso-Opt | 0.17 | 0.30 |
| 简单 | 0.13 | 0.14 |
| OT | 0.06 | 0.04 |

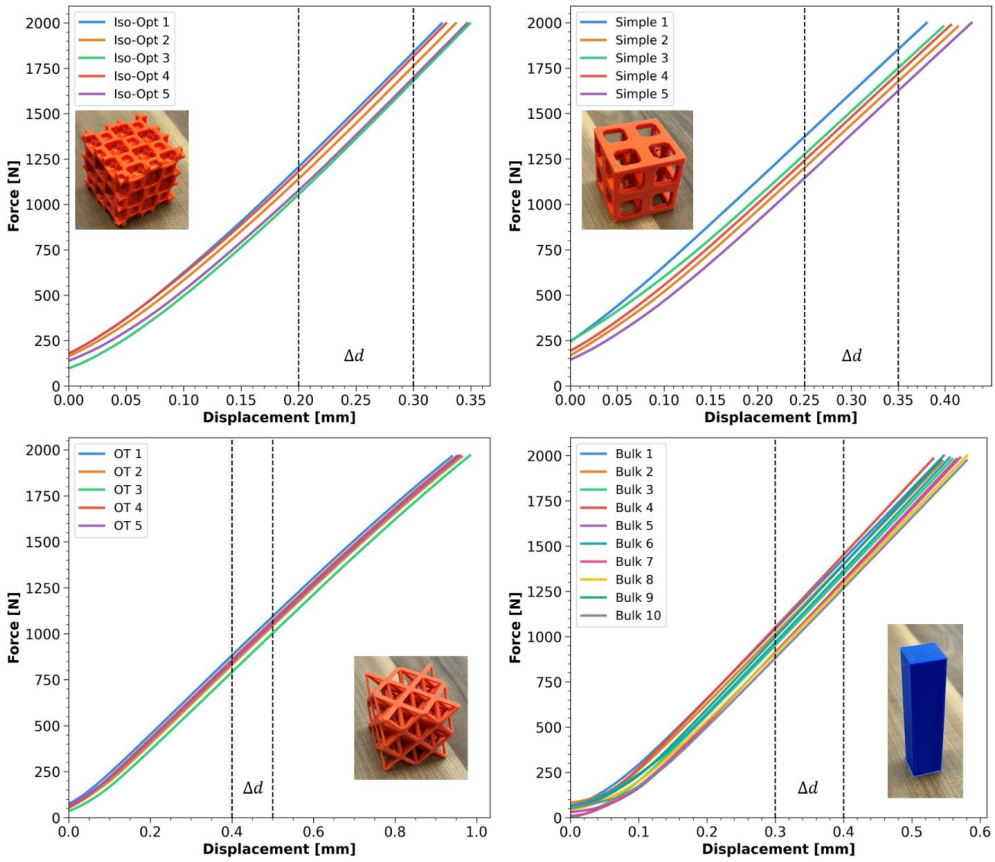
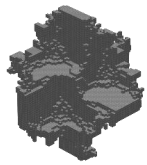
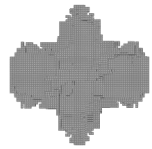
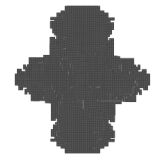
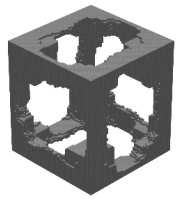
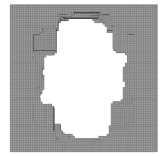
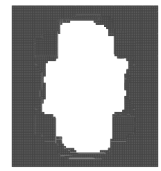
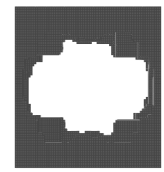
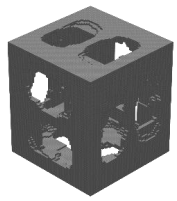
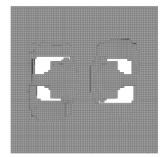
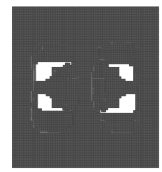
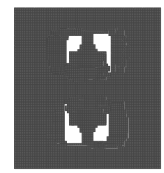
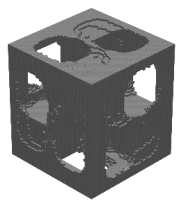
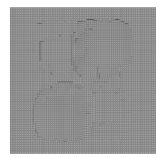
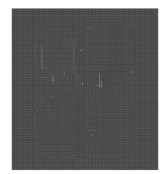
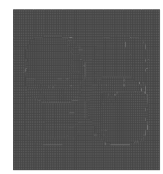
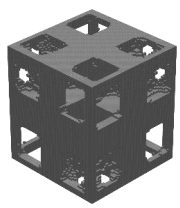
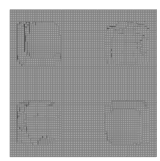
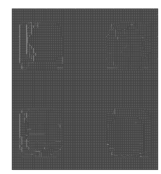
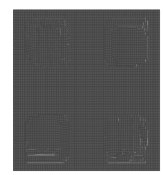
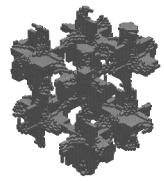
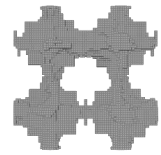
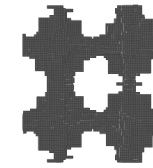
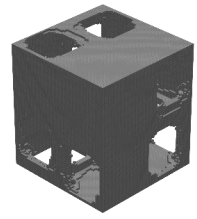
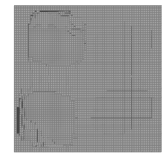
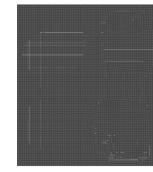
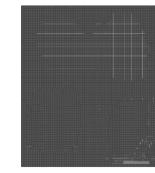
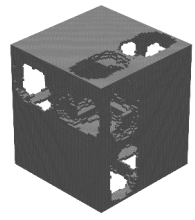
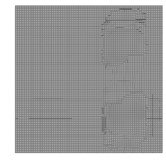
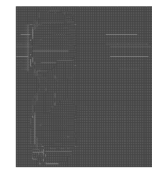
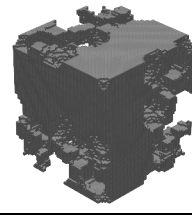
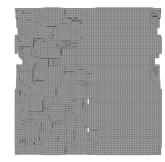
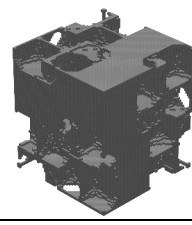
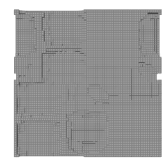
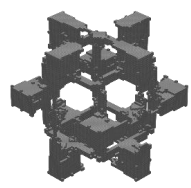
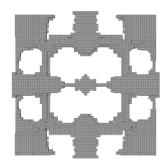
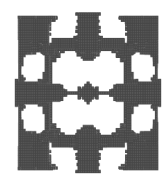
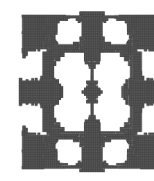
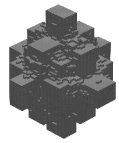
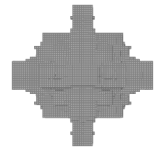
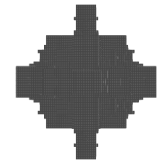
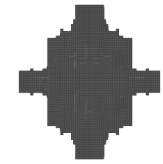
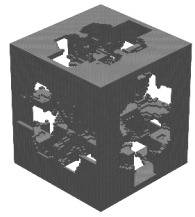
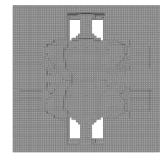
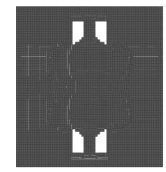
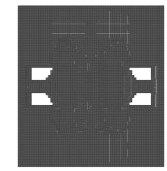
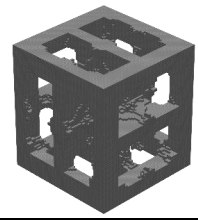
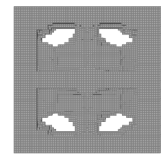
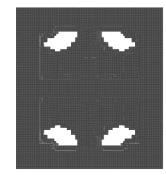
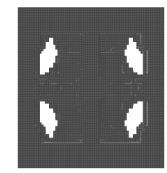
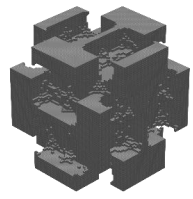
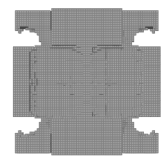
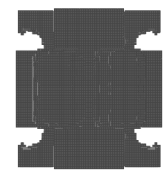
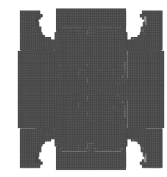
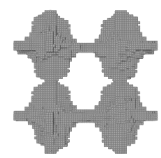
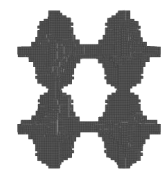
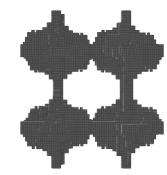
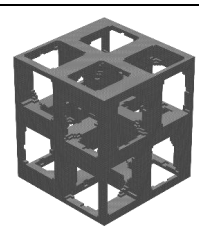
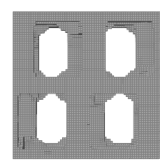
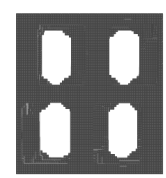
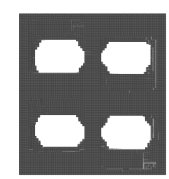


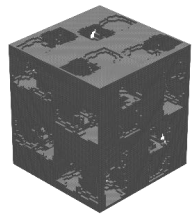
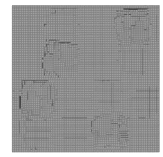
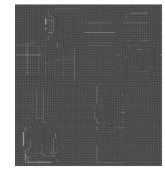
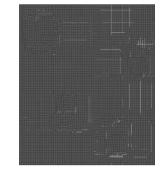
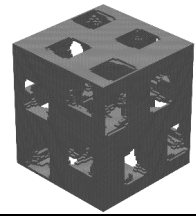
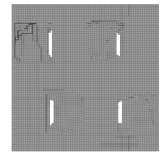
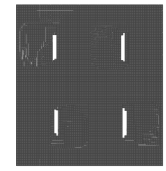
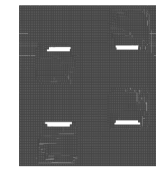
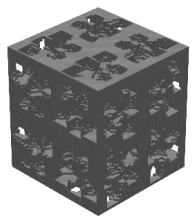
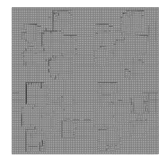
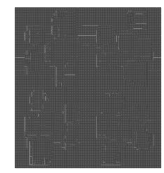
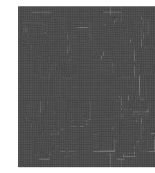
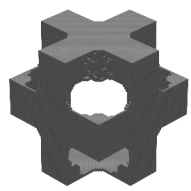
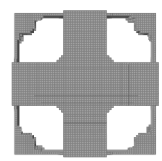
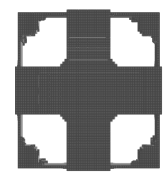
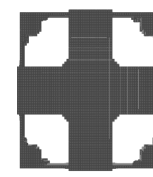
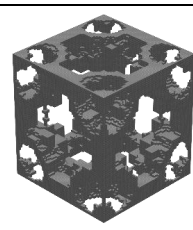
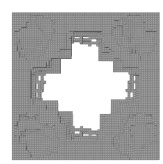
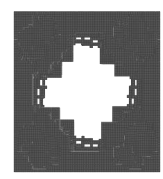
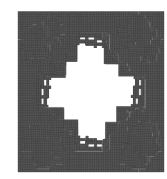
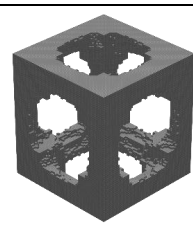
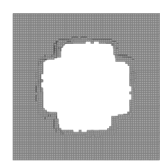
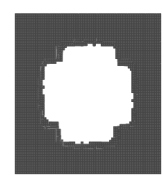
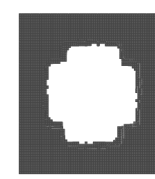

图 S15：测试的熔融丝材制造打印样品的力-位移曲线。用于计算杨氏模量的位移范围以 $\Delta d$ 表示。

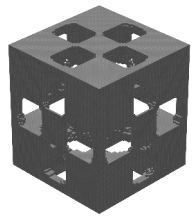
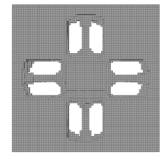
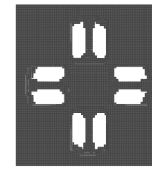
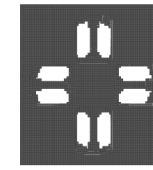
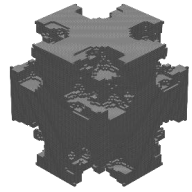
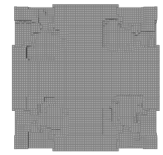
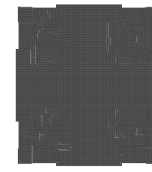
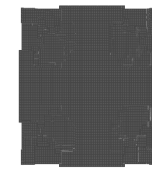
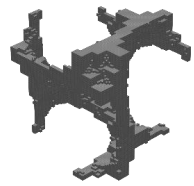
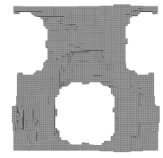
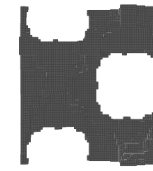
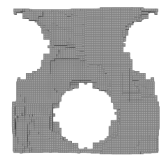
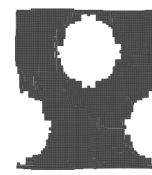
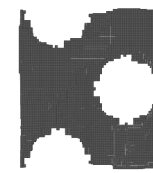
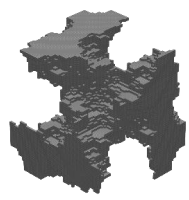
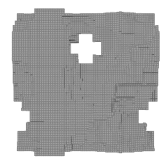
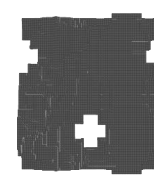
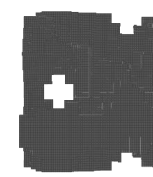
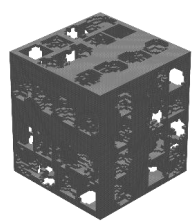
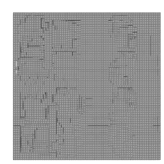
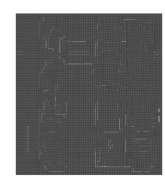
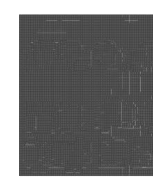
**表 S4**：空间群 195–230 中结构的样品晶胞，相对密度范围为 0.1 至 0.5。图中展示了辅助视图、俯视图、右视图和正视图。

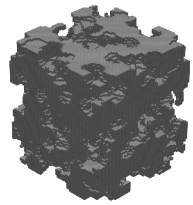
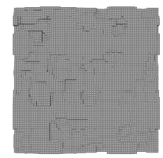
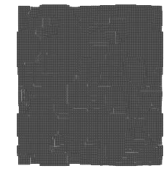
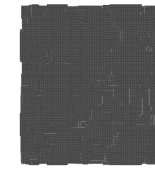
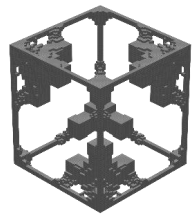
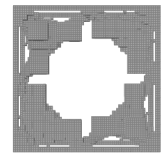
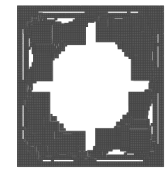
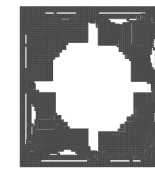
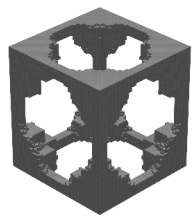
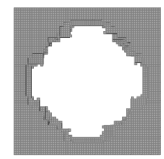
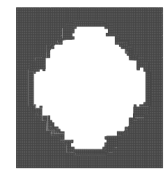
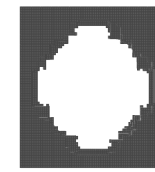
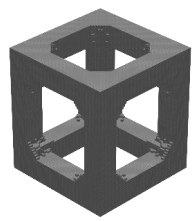
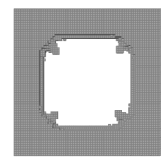
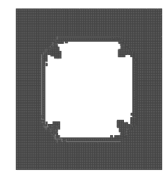
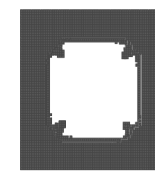
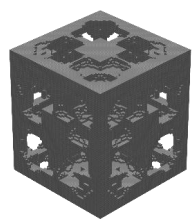
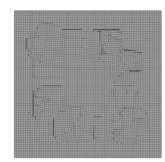
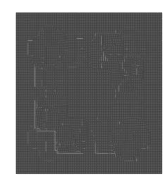
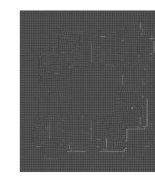
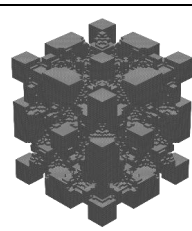
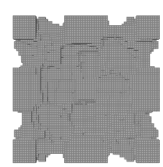
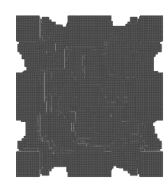
| ID | 空间群 | 相对密度 | 辅助 | Top | 右 | 前 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 195 | 0.104 |  |  |  |  |
| 2 | 195 | 0.202 |  |  |  |  |
| 3 | 195 | 0.300 |  |  |  |  |
| 4 | 195 | 0.396 |  |  |  |  |
| 5 | 195 | 0.499 |  |  |  |  |

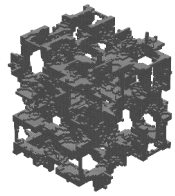
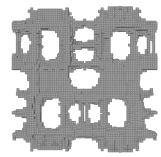
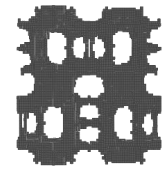
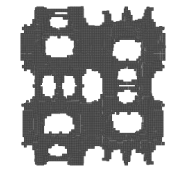
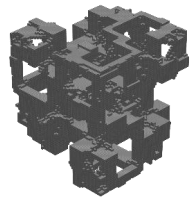
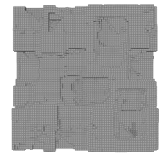
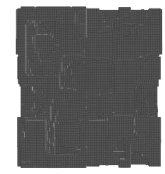
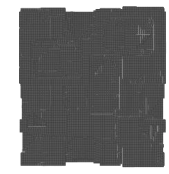
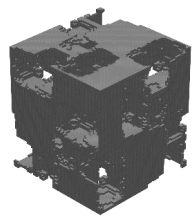
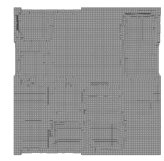
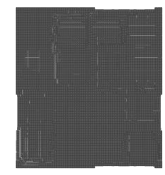
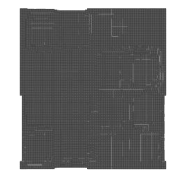
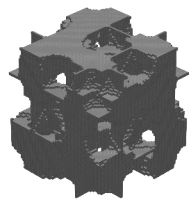
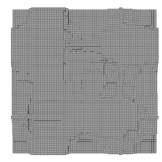
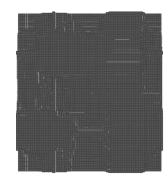
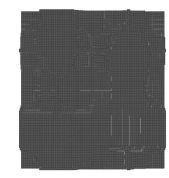
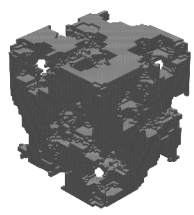
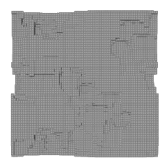
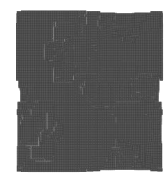
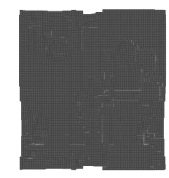
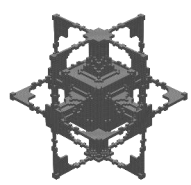
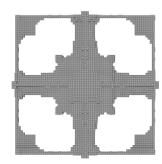
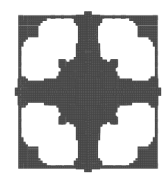
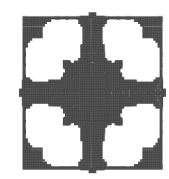
| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 6 | 199 | 0.102 |  |  |  |  |
| 7 | 199 | 0.196 |  |  |  |  |
| 8 | 199 | 0.300 |  |  |  |  |
| 9 | 199 | 0.397 |  |  |  |  |
| 10 | 199 | 0.497 |  |  |  |  |
| 11 | 200 | 0.102 |  |  |  |  |

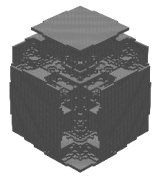
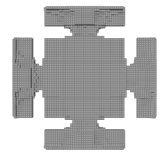
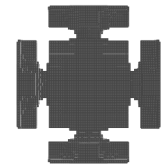
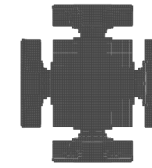
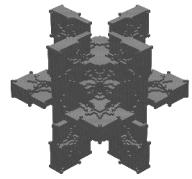
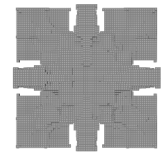
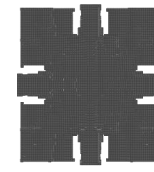
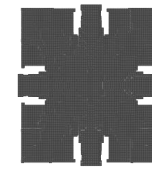
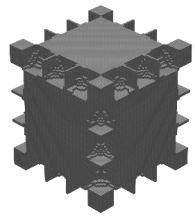
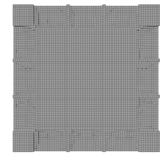
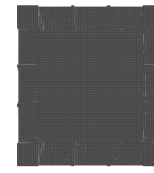
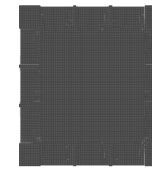
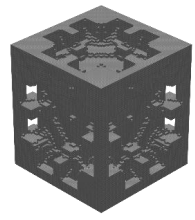
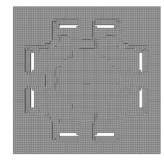
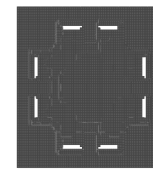
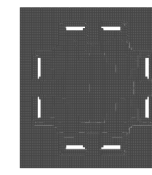
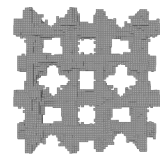
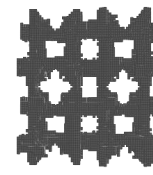
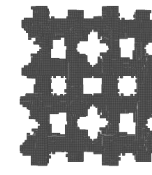
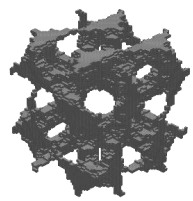
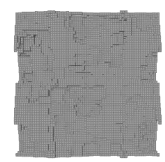
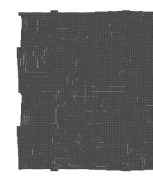
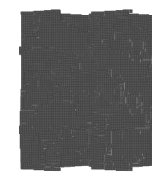
| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 12 | 200 | 0.197 |  |  |  |  |
| 13 | 200 | 0.295 |  |  |  |  |
| 14 | 200 | 0.400 |  |  |  |  |
| 15 | 200 | 0.497 |  |  |  |  |
| 16 | 206 | 0.098 |  |  |  |  |
| 17 | 206 | 0.198 |  |  |  |  |

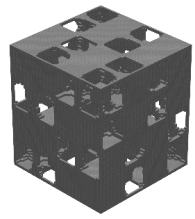
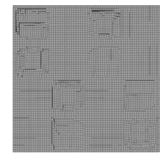
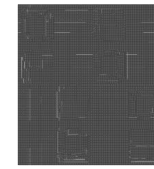
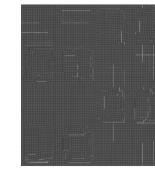
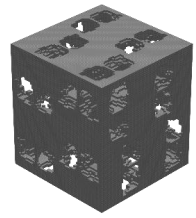
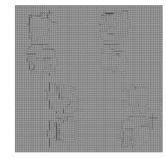
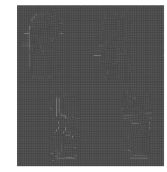
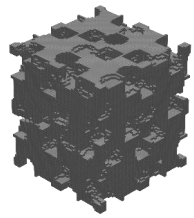
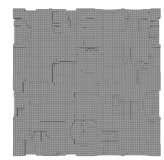
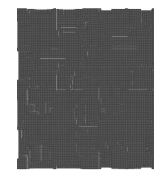
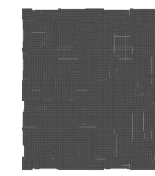
| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 18 | 206 | 0.296 |  |  |  |  |
| 19 | 206 | 0.404 |  |  |  |  |
| 20 | 206 | 0.499 |  |  |  |  |
| 21 | 207 | 0.095 |  |  |  |  |
| 22 | 207 | 0.200 |  |  |  |  |
| 23 | 207 | 0.297 |  |  |  |  |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 24 | 207 | 0.404 |  |  |  |  |
| 25 | 207 | 0.499 |  |  |  |  |
| 26 | 214 | 0.103 |  |  |  |  |
| 27 | 214 | 0.197 |  |  |  |  |
| 28 | 214 | 0.304 |  |  |  |  |
| 29 | 214 | 0.404 |  |  |  |  |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 30 | 214 | 0.498 |  |  |  |  |
| 31 | 215 | 0.103 |  |  |  |  |
| 32 | 215 | 0.202 |  |  |  |  |
| 33 | 215 | 0.296 |  |  |  |  |
| 34 | 215 | 0.396 |  |  |  |  |
| 35 | 215 | 0.495 |  |  |  |  |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 36 | 220 | 0.105 |  |  |  |  |
| 37 | 220 | 0.197 |  |  |  |  |
| 38 | 220 | 0.295 |  |  |  |  |
| 39 | 220 | 0.397 |  |  |  |  |
| 40 | 220 | 0.497 |  |  |  |  |
| 41 | 221 | 0.103 |  |  |  |  |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 42 | 221 | 0.201 |  |  |  |  |
| 43 | 221 | 0.303 |  |  |  |  |
| 44 | 221 | 0.403 |  |  |  |  |
| 45 | 221 | 0.499 |  |  |  |  |
| 46 | 230 | 0.104 |  |  |  |  |
| 47 | 230 | 0.202 |  |  |  |  |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 48 | 230 | 0.295 |  |  |  |  |
| 49 | 230 | 0.403 |  |  |  |  |
| 50 | 230 | 0.500 |  |  |  |  |

**参考文献**

[1] K. He、X. Zhang、S. Ren、J. Sun，《用于图像识别的深度残差学习》，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2016年：第770–778页。[2] D. Smilkov、N. Thorat、B. Kim、F. Viégas、M. Wattenberg，《SmoothGrad：通过添加噪声去除噪声》（2017年）。http://arxiv.org/abs/1706.03825。[3] eSun，聚乳酸+ 技术数据集，2021年。https://www.esun3d.com/uploads/eSUN_聚乳酸+- Filament_TDS_V4.0.pdf（访问于2025年12月29日）。

# 5 |参考文献

[1] Yu X、Zhou J、Liang H、Jiang Z、Wu L. 与刚度、刚性和压缩性相关的力学超材料：简要综述。Progress in Materials Science 2018;94:114–173。[2] Barchiesi E、Spagnuolo M、Placidi L. 力学超材料：现状。Mathematics and Mechanics of Solids 2019;24(1):212–234。[3] Wilt JK、Yang C、Gu GX. 利用深度学习加速负泊松比超材料设计。Advanced Engineering Materials 2020 5;22。[4] Zheng X、Lee H、Weisgraber TH、Shusteff M、DeOtte J、Duoss EB 等。超轻、超高刚度的力学超材料。Science 2014;344(6190):1373–1377。[5] Sun M、Hu X、Tian L、Yang X、Min L. 用于骨科手术的负泊松比生物医学超材料：全面综述。Orthopaedic Surgery 2024;16(8):1801–1815。[6] 空中客车，开创仿生3D打印；2016年。https://www.airbus.com/en/newsroom/news/2016-03-pioneering-bionic-3d-printing，（访问于2025年12月5日）。[7] Bastek JH、Kumar S、Telgen B、Glaesener RN、Kochmann DM. 利用深度学习逆转桁架超材料的结构-性能映射。美国国家科学院院刊 - PNAS 2022;119(1):1–8。[8] Meyer PP、Tancogne-Dejean T、Mohr D. 非对称板格结构：基于循环神经网络的最优超材料设计。Acta Materialia 2024;278。[9] Patel D、Yang R、Wang J、Rai R、Dargush G. 基于深度学习的逆向设计框架，用于设计性能目标明确的新型架构互穿相复合材料。《复合材料结构》2023;312。[10] Latture RM、Rodriguez RX、Holmes Jr LR、Zok FW. 节点圆角和外边界对八面体桁架压缩响应的影响。Acta Materialia 2018;149:78–87。[11] Liu Y、Wang Y、Ren H、Meng Z、Chen X、Li Z 等。通过多层策略和拓扑优化生成的超高刚度超材料。Nature Communications 2024;15(1):2984。[12] Dastani K、Movahhedy MR、Yu H、Khodaygan S、Zhang L、Wang MY. 几何偏差对增材制造超轻周期性壳基晶格强度的影响。Engineering Failure Analysis 2023;150:107328。[13] Kumar S、Tan S、Zheng L、Kochmann DM. 逆向设计的旋节线状超材料。npj Computational Materials 2020;6(1):73。[14] Mao Y、He Q、Zhao X. 利用生成对抗网络设计复杂架构材料。Science Advances 2020;6(17):eaaz4169。[15] Lumpe TS、Stankovic T. 探索基于晶体网络的周期性胞状结构的性能空间。美国国家科学院院刊 2021;118(7):e2003504118。[16] Mizzi L、Attard D、Gatt R、Farrugia PS、Grima JN. 不规则六手性蜂窝力学性能的解析与有限元研究。Smart Materials and Structures 2018;27(10):105016。[17] Findeisen C、Hohe J、Kadic M、Gumbsch P. 基于屈曲单元的力学超材料特性。Journal of the Mechanics and Physics of Solids 2017;102:151–164。[18] Zhao J、Li Y、Liu WK. 利用扩展有限元法预测复杂几何三维机械超材料的能带结构。Computational Mechanics 2015;55:659–672。

[19] Hsieh MT, Endo B, Zhang Y, Bauer J, Valdevit L. 具有旋节线拓扑结构的胞状材料的力学响应。《固体力学与物理学杂志》2019年;125:401–419。[20] Qi Z, Zhang N, Liu Y, Chen W. 基于跨尺度有限元法和机器学习预测碳纤维的力学性能。《复合材料结构》2019年;212:199–206。[21] Nath D, Neog DR, Gautam SS, et al. 机器学习和深度学习在有限元分析中的应用：全面综述。《工程计算方法档案》2024年;p. 1–40。[22] Wilt JK, Yang C, Gu GX. 利用深度学习加速负泊松比超材料设计。《先进工程材料》2020年;22(5)。[23] Jiang X, Liu F, Wang L. 基于机器学习的数字复合超材料刚度优化：实现预期的正或负泊松比。《理论与应用力学通讯》2023年;13(6):100485。[24] Abu-Mualla M, Huang J. 利用物理引导机器学习逆向设计三维胞状材料。《材料与设计》2023年 8;232。[25] Pahlavani H, Tsifoutis-Kazolis K, Saldivar MC, Mody P, Zhou J, Mirzaali MJ, et al. 深度学习用于随机网络三维打印机械超材料的与尺寸无关的逆向设计。《先进材料》（魏因海姆）2024年;36(6)。[26] Zheng L, Karapiperis K, Kumar S, Kochmann DM. 通过生成式建模统一设计空间并优化线性和非线性桁架超材料。《自然通讯》2023年;14(1):7563。[27] Meier T, Li R, Mavrikos S, Blankenship B, Vangelatos Z, Yildizdag ME, et al. 在反直觉设计空间中获得负泊松比和各向同性超材料：一种自动优化方法及实验表征。npj Computational Materials 2024年;10(1):3。[28] Berger J, Wadley H, McMeeking R. 达到各向同性弹性刚度理论极限的力学超材料。《自然》2017年;543(7646):533–537。[29] Soman P, Fozdar DY, Lee JW, Phadke A, Varghese S, Chen S. 一种具有零泊松比的三维聚合物支架材料。《软物质》2012年;8(18):4946–4951。[30] Li Z, Gao W, Wang MY, Wang CH, Luo Z. 具有极端各向同性和负泊松比的三维超材料。《国际机械科学杂志》2023年;259:108617。[31] Chen D, Skouras M, Zhu B, Matusik W. 极值微结构族的计算发现。Science Advances 2018年;4(1):eaao7005。[32] Zhao Y, Wang L, Zhai X, Han J, Ma WWS, Ding J, et al. 利用隐式神经表示构建近各向同性、极端刚度的连续三维机械超材料序列。《先进科学》2025年;12(3):2410428。[33] Du Y, Gu D, Xi L, Dai D, Gao T, Zhu J, et al. 仿生晶格结构的激光增材制造：成形质量、微结构与能量吸收行为。《材料科学与工程：A辑》2020年;773:138857。[34] Alagha AN, Sheikh-Ahmad JY, Almesmari A, Jarrar F, Almaskari F, Abu Al-Rub RK. TPMS菱形结构和混合SC-FCC-BCC板晶格的力学行为与能量吸收。《工程力学杂志》2024年;150(12):04024088。[35] Wu S, Luo Z, Li Z, Liu S, Zhang LC. 利用增材制造进行五模超材料的拓扑设计。计算机方法在应用力学与工程中的应用 2021年;377:113708。[36] Bückmann T, Thiel M, Kadic M, Schittny R, Wegener M. 由五模超材料制成的弹性力学不可感知隐身斗篷。《自然通讯》2014年;5(1):4130。

[37] Fielding SM. 简单而有效的力学隐身。《固体力学与物理学杂志》2024年;192:105824。[38] Schittny R, Bückmann T, Kadic M, Wegener M. 宏观三维五模超材料的弹性测量。《应用物理快报》2013年;103(23)。[39] Mangiafico SS. R语言中推广项目评估的总结与分析。罗格斯合作推广服务：美国新泽西州新不伦瑞克，2016年;125:16–22。[40] Liu Y. 一种新型板-晶格结构的力学性能。《国际机械科学杂志》2021年;192:106141。[41] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton GE. 利用深度卷积神经网络进行ImageNet分类。ACM通讯 2017年;60(6):84–90。[42] He K, Zhang X, Ren S, Sun J. 用于图像识别的深度残差学习。载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集；2016年。第770–778页。[43] Wang J, Yang Y, Mao J, Huang Z, Huang C, Xu W. CNN-RNN：多标签图像分类的统一框架。载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集；2016年。第2285–2294页。[44] Gu J, Wang Z, Kuen J, Ma L, Shahroudy A, Shuai B, et al. 卷积神经网络的最新进展。《模式识别》2018年;77:354–377。[45] Rao C, Liu Y. 用于非均质材料均匀化的三维卷积神经网络（3D-CNN）。《计算材料科学》2020年;184:109850。[46] Zhao M, Li X, Yan X, Zhou N, Pang B, Peng B, et al. 机器学习加速晶格超材料设计，实现可定制的能量吸收。薄壁结构 2025年;208:112845。[47] Ioffe S, Szegedy C. 批归一化：通过减少内部协变量偏移加速深度网络训练。载于：国际机器学习会议，PMLR；2015年。第448–456页。[48] Fang Q, Boas DA. 从体积二值和灰度图像生成四面体网格。载于：2009年IEEE生物医学成像国际研讨会：从纳米到宏观，IEEE；2009年。第1142–1145页。[49] Jamin C, Alliez P, Yvinec M, Boissonnat JD. CGALmesh：用于德劳内网格生成的通用框架。ACM数学软件汇刊（TOMS）2015年;41(4):1–24。[50] Boissonnat JD, Oudot S. 有理论保证的曲面采样与网格划分。《图形模型》2005年;67(5):405–451。[51] Rineau L, Yvinec M. 一种用于德劳内细化网格划分的通用软件设计。《计算几何》2007年;38(1- 2):100–110。[52] Hang S. TetGen：基于德劳内方法的高质量四面体网格生成器。ACM数学软件汇刊 2015年;41(2):11。[53] Schlömer N，meshio：适用于多种网格格式的Python输入/输出工具；2024年。https://github.com/nschloe/meshio。[54] Danielsson M, Parks D, Boyce M. 含孔洞聚合物材料的三维细观力学建模。《固体力学与物理学杂志》2002年;50(2):351–379。[55] Smilkov D, Thorat N, Kim B, Viégas F, Wattenberg M. SmoothGrad：通过添加噪声去除噪声。arXiv预印本 arXiv:170603825 2017年;。[56] D695–23 AS. 硬质塑料压缩性能的标准试验方法。ASTM国际；2023年。

[57] Pastor-Artigues MM、Roure-Fernández F、Ayneto-Gubert X、Bonada-Bo J、Pérez-GuindalE、Buj-Corral I。熔融沉积成型打印部件中聚乳酸材料的弹性非对称性：关于用于数值模拟的实验表征的考量。《Materials》2019年；13(1)：15。

[58] Yu T、Li X、Zhao M、Guo X、Ding J、Qu S 等。桁架与板混合晶格结构：各向同性、大应变变形及其机制的模拟与实验研究。《Materials Today Communications》2023年；35：106344。