

基于相场模型的 3D 打印设计 - 优化 - 仿真 一体化研究^{*1)}

夏 青

(西安交通大学数学与统计学院, 西安 710049)

余 倩

(北京大学数学科学学院, 北京 100871)

李义宝²⁾

(西安交通大学数学与统计学院, 西安 710049)

摘要

制件设计 (“数字化”), 性能优化 (“优化化”), 工艺仿真 (“仿真化”) 是 3D 打印过程的三个重要模块。“数字化”是指将设计图纸/预加工实物, 通过图像/视频/扫描等处理手段, 转化为可编辑的数字化制件。“优化化”是指在数字化的制件上施加力学, 热学等物理场约束, 提高制件性能。“仿真化”是指根据优化化的制件模拟真实制造场景的物理工况, 进行加工过程中的物理化学变化的数字仿真和孪生建模仿真。本研究旨在介绍基于相场模型框架下的特定工艺 3D 打印设计 - 优化 - 仿真建模与算法研究。在“数字化”模块中, 我们将针对计算机辅助设计常见的数据类型, 介绍相应的三维重构模型, 修补模型以及轻量化支撑结构设计模型。在“优化化”模块中, 我们将介绍系列多尺度, 多物理场, 多材料耦合的拓扑优化问题及相应的求解方法。在“仿真化”模块中, 结合 3D 打印参数和工艺, 我们介绍宏观(相变)-微观(晶界)尺度耦合的熔融沉积成型(FDM)工艺仿真方法, 以及基于激光-热-流-固等物理场耦合理论的选择性激光熔化(SLM)工艺的仿真方法。基于相场模型框架下的设计 - 优化 - 仿真研究方法将有助于缩短产品开发周期, 提高设计效率, 为实现 3D 打印制件质量溯源和根因分析提供理论依据和算法支撑。

关键词: 3D 打印; 相场模型; 制件设计; 性能优化; 工艺仿真

MR (2010) 主题分类: 00A72, 68U07, 97R20.

ON THE INTEGRATED 3D PRINTING RESEARCH FOR DESIGN, OPTIMIZATION AND SIMULATION WITHIN PHASE FIELD FRAMEWORK

Xia Qing

(School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Yu Qian

(School of Mathematical Sciences, Peking University, Beijing 100871, China)

* 2024 年 3 月 19 日收到。

¹⁾ 基金项目: 国家自然科学基金项目 (12271430) 和中国博士后科学基金面上项目 (2023M740105) 资助。

²⁾ 通信作者: 李义宝, Email: yibaoli@xjtu.edu.cn.

Li Yibao

(School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract

Component design (“digitalization”), performance optimization (“optimization”), and process simulation (“simulation”) are three critical modules in the 3D printing process. “Digitalization” refers to the transformation of design drawings or pre-processed physical objects into editable digital components through means such as images, videos, and scanning processes. “Optimization” involves the application of constraints from physical fields such as mechanics and thermodynamics to enhance the performance of digital components. “Simulation” entails the digital simulation and twin modeling of physicochemical changes during the manufacturing process, based on the optimized components, to emulate real-world physical conditions. This research aims to introduce integrated modeling and algorithmic studies in design, optimization, and simulation within the phase field framework. In the “digitalization” module, we will present three-dimensional reconstruction models, repair models, and lightweight support structure design models that correspond to common data types in computer-aided design. In the “optimization” module, we will introduce a series of multi-scale, multi-physical field, and multi-material coupled topology optimization problems and their corresponding solutions. In the “simulation” module, we will discuss macroscopic (phase transition) to microscopic (grain boundary) scale coupling theories and the physical field couplings such as laser-thermal-flow-solid, in addition to simulating methods for processes like Fused Deposition Modeling (FDM) and Selective Laser Melting (SLM), integrating 3D printing parameters and techniques. The integrated research approach to design, optimization, and simulation based on the phase field model framework aims to shorten the product development cycle, enhance design efficiency, and provide a theoretical basis and algorithmic support for quality traceability and root cause analysis of 3D printed components.

Keywords: 3D printing; Phase field modeling; Component design; Performance optimization; Numerical simulation.

2010 Mathematics Subject Classification: 00A72, 68U07, 97R20.

1. 引言

增材制造(3D 打印)作为“深入实施制造强国战略”的主攻方向,已成为我国制造业领域的亮眼“名片”。3D 打印技术通过实物化设计概念,数字化三维实体和程序化加工过程,将特定材料逐层堆叠,最终实现产品的制备^[1]。在过去几十年全球范围内逐步建立了涵盖 3D 打印打印材料,工艺,装备技术到重大工程应用的全链条创新体系^[2]。当前 3D 打印过程的全流程技术可以参照图 1,其中制件设计(“数字化”),性能优化(“优化化”),工艺仿真(“仿真化”)为三个重要过程。“数字化”是指将设计图纸/预加工实物,通过图像/视频/扫描等处理手段,转化为可编辑的数字化制件。“优化化”是指在数字化的制件上施加力学,热学等物理场约束,提高制件性能。“仿真化”是指根据优化化的制件模拟真实制造场景的物理工况,进行加工过程中的物理化学变化的数字仿真和孪生建模仿真。目前,我国 3D 打印一批重点工艺装备和核心器件实现国产替代,批量化供应能力和成本竞争优势显著,但产业界普遍存在“设计出来的制件,加工不出来”,“加工出来的制件,性能不稳定”的现象。其根本原因是制件设计软件(CAD),

性能优化软件(CAD, CAE),工艺仿真软件(CAM)彼此割裂,软件间相对独立,集成度低。由于3D打印过程的工艺复杂性高,多学科交叉性强,生命周期长,产品的定制化和设计自由度复杂,因此需要进行全流程的研究。基于相场模型框架下的设计-优化-仿真研究方法将有助于缩短产品开发周期,提高设计效率,为实现3D打印制件质量溯源和根因分析提供理论依据和算法支撑。

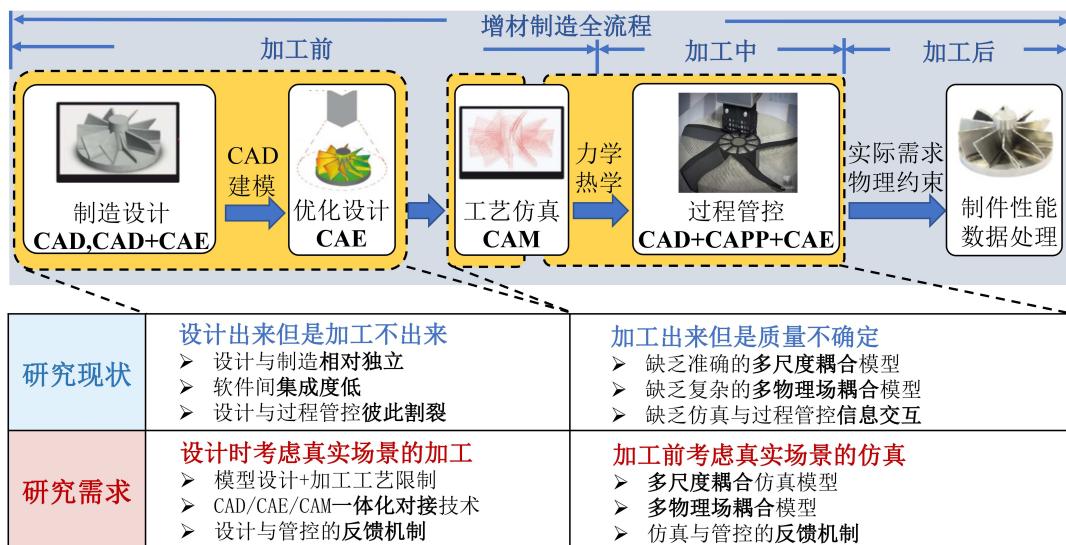


图1 3D打印全流程说明以及研究现状和需求说明

目前,对3D打印技术全流程建模与仿真的研究可以划分为“数字化”,“优化化”,以及“仿真化”三大模块^[3]。各模块受制于研究方法,数据类型,计算效率等因素,相关研究之间相互独立,从而制约着材料-工艺-组织-性能关系,质量溯源和根因分析。针对模型设计模块,需要根据收集到的数据类型进行自适应算法调整^[4]。然而,受制于对象特性,测量方法和环境的影响,数据不可避免地会产生丢失,漂移和包含噪声等问题。根据处理数据类型和生成重构模型的方式,可将该类问题的处理方法分为基于隐式函数的全局曲面重建(如隐式多项式函数曲面重构法,指示函数曲面重构法,径向基函数曲面重构法,Poisson方程求解指示函数法,基于相场方程的符号距离函数曲面重构法)和基于神经网络的方法(卷积图网络,Transformer模型,生成对抗网络)。此外还需要针对重构后的模型进行自适应修补^[5]和轻量化支撑结构的自适应设计^[6]。三维模型修复算法可分为基于体数据的方法和基于网格的修补方法。轻量化支撑结构的自适应设计通常需要提取三维模型的内部空间,利用代表单元方法构建多孔稀疏结构,在保证不影响内部应力分布的目标下优化材料分布,从而完成模型重构和轻量化设计。然而,由于设计的三维模型与3D打印技术孤立,需要建立重构模型的优化体系以实现对产品的全面优化^[7]。基于产品性能要求定义设计空间,设计条件,设计目标和设计外形,这种设计的核心技术是拓扑优化技术^[8]。拓扑优化研究有助于设计新型材料,通过调控材料的拓扑结构和物理场分布,实现特定性能和功能的材料设计^[9]。近年来,拓扑优化发展迅速,但由于材料,结构和工艺等多因素的耦合规律复杂,以及3D打印的加工特性,使得该工艺过程所涉及的宏观,介观,微观等多个尺度空间之间的协调困难。这些问题直接影响到拓扑优化技术的发

展。我们可以将拓扑优化技术的发展分为多尺度多材料和多物理场两种方式^[10]。通过拓扑优化最终得到适应 3D 打印技术的数字模型，可直接应用于实际制造过程^[12]。然而，目前 3D 打印领域的研究主要集中在通过实验和试错的方式寻找优化的加工参数，这是一个耗时且昂贵的过程^[13]。通过创建数字孪生模型，包含打印零件、支撑结构和模型加工，模拟整个打印工艺过程，提前预测可能出现的零件变形并进行变形修正，预测局部过热、收缩和刮板碰撞等打印问题，调整制备件的打印工艺参数，可提前识别潜在问题和缺陷^[14]。这有助于降低实际制造过程中的试错成本，避免材料浪费和生产时间浪费。目前，3D 打印过程的仿真研究主要根据制备件材料和用途进行区分，其中比较典型的工艺为基于热熔融技术^[15] 和选择性激光熔融技术的仿真模型^[16]。计算时间长，空间离散程度大，多尺度空间之间统一难度高，物理过程机理复杂等问题是工艺仿真的难点问题。因此，在构建仿真模型框架时，应结合多物理场景，开发适用于多尺度计算的快速算法，以满足仿真模型对真实物理场景的要求。

通过回顾在建立 3D 打印过程中各个模块的发展现状，我们可以对建模与计算方法提出如下要求：(1) 各个模块涉及的数据格式相同，方便相互之间传递与整合。(2) 针对涉及的问题进行统一建模与统一计算框架。(3) 模型在不同尺度空间之间可以拓展和应用，方便针对不同物理现象与问题进行调整与改进。为了克服 3D 打印过程中各个部分相互独立的问题，并避免不同环节之间数据存储、转换、处理和优化方面的障碍，我们以相场模型为深层框架，将各个模块之间串联起来^[18]。相场模型在几十年的快速发展中展现出了适用场景广泛、多物理场景耦合便捷、计算数据格式统一等优点^[17]。该方法作为一种综合建模和仿真技术，在面向特定工艺的 3D 打印中展现出了巨大的潜力。在统一框架下，针对特定 3D 打印中减重量、增强度的需求，建立鲁棒的三维重构和修补的数字化模型；建立多材料、多尺度、适配多物理场景的拓扑优化数学模型，推导相应的控制方程并进行高性能数值求解；建立适配多种加工工艺的多物理场、多尺度的孪生仿真模型，开展高性能算法研究。相场方法在该框架建立过程中的优势在于：(1) 具有全面性和综合性。该方法能够全面考量材料特性、工艺参数和几何结构，实现对复杂系统的全面描述。相比于传统的分离建模方法，该方法能够综合考虑多个因素之间的相互作用，从而更准确地反应真实系统的动力学行为。(2) 一体化建模与计算。通过相场方法可以在同一框架下进行多个环节的处理，从而减少了信息丢失和误差累积，提高了整体建模和仿真的准确性和效率。(3) 灵活性和可扩展性。相场方法可以通过调整模型参数或添加新的物理过程来适应不同的应用场景，从而满足多个模块的需求。(4) 物理意义和可解释性。相场方法基于物理学原理，相比于黑盒模型或者经验模型，能够从根本上理解系统的行为机制，为进一步优化和改进提供指导。(5) 高精度和准确性。相场方法通过对物理过程的精确建模和仿真，能够准确预测系统的行为和性能，为产品设计和工艺优化提供可靠的依据。

在这篇文章当中，我们将介绍设计 - 优化 - 仿真框架中所涉及的模型以及相应的算法，为后续完善和优化该框架提供支撑。在 3D 打印中的计算机辅助模型重构阶段，通常收集到的是三维点云数据或者二维 CT 切片数据。为了将这些离散化数据转化为后续阶段可以优化和仿真的三维实体模型，需要开发针对常见数据类型的点云和 CT 数据重构算法。对可能出现的噪点和缺失，提出自适应光滑和修复算法。考虑工艺约束和场景需求，开发多尺度、多材料的拓扑优化方法，以实现性能驱动的生成式设计。建立复合系统跨时间和空间尺度的物理耦合模型，以解决加工过程中的流动、传热、凝固和相变等多物理问题。提出多物理场耦合系统的求解方案和数值模拟方法，为复杂偏微分方程的求解提供理论和方法支持。除此之外，针对不同的加工工艺过程，例如粉末床熔融、定向能量沉积、材料挤压等，需要开发结合相关工艺特性的物理模型和仿真技术。基于热熔融沉积工艺，需要建立多尺度的仿真框架；针对选择性激光

熔融工艺, 需要建立多物理场仿真框架, 以实现对 3D 打印技术全流程的跟踪和模拟计算.

本文的其余部分按照如下架构整理: 在第二章节中, 我们回顾了面向 3D 打印加工个性化设计方面的模型和算法, 包括点云数据重构, CT 数据重构, 模型光滑和修正以及三重周期极小曲面轻量化支撑结构优化设计. 在第三章节中, 我们回顾了面向 3D 打印加工过程的个性化优化, 包括多尺度多材料框架下的拓扑优化以及多物理场耦合场景下的拓扑优化建模与计算. 在第四章节中, 我们回顾了面向 3D 打印加工过程的全流程仿真建模研究, 包括基于熔融沉积技术的 3D 打印多尺度建模以及基于选择性激光熔融工艺的多物理场耦合建模仿真系统. 最后, 我们在第五章节针对现存问题进行剖析并对未来发展趋势进行展望.

2. 制造设计 (“数字化”)

在 3D 打印过程中, 数字化部分通常包括数据转化、切片提取、支撑设计和路径规划四个关键步骤. 增材制造过程中常见的数据类型是 STL 文件或者 PLY 文件, 获得该类型的软件通常采用计算机辅助设计的正向设计方式或者利用扫描技术获取现有物体的三维点云数据或者 CT 切片数据的逆向设计方式. 然而针对 STL 数据或者 PLY 数据无法直接进行优化和修正, 在后续的过程中不能直接被处理, 因此需要进行数据转化将其转化为易于处理的体素数据. 切片提取是将三维模型切分成一系列连续的二维薄片的过程. 这些薄片被称为“切片”, 每个切片代表了打印过程中一个水平层. 由于我们采用的是体素数据格式, 因此该数据的每一层就对应打印过程的一层切片. 支撑设计是在打印过程中添加支撑结构, 以支撑悬空部分, 避免变形或塌陷. 路径规划则确定了打印头在每一层的运动轨迹, 能够保持打印过程中模型的稳定性以确保打印质量和效率, 防止出现变形、下垂、裂纹等问题. 3D 打印过程中打印头的路径规划直接影响了打印速度、表面质量和内部结构的均匀性. 合理的路径规划能够最大程度地减少打印时间和材料浪费, 同时确保打印件的表面质量和内部结构的均匀性, 从而提高打印效率和打印质量. 本章我们重点介绍数据转化和切片生成, 主要涉及作者关于点云偏置重构, CT 重构, 曲面光滑以及轻量化支架设计的相关研究. 这些研究的目的是获取制备件的精确几何形状, 为后续的优化设计, 仿真和制造提供基础.“数字化”部分提供了一种数据转化方式, 统一了后续优化和仿真阶段的数据格式. 三维重构在 3D 打印方面的研究广泛的应用在生物组织工程和金属器件制造等方面. 在生物组织工程中, 三维重构有助于创建复杂的生物组织结构, 并为组织工程和再生医学提供了有力工具, 可以实现生物模型的创建, 组织工程支架设计, 评估生物材料性能和生物相容性以及辅助建立疾病模型, 为生物组织的研究、诊断和治疗提供了重要的技术支持和工具. 金属材料 3D 打印主要面向的是航空航天、车辆船舶等机械制备件生产修复过程, 只需通过扫描、重构, 获取损坏零件的数字模型, 便可直接进行打印修复, 大大缩短了修复时间. 这对于急需进行产品修复的场景具有重要意义, 例如在生产设备突发故障的情况下制备件出现缺陷和破损. 在 3D 打印过程中, 光滑的模型表面有助于提高制造精度, 减少制造中的表面缺陷. 但由于点云数据和 CT 切片数据的噪音和缺失, 基于数据重构技术得到的重构模型可能存在表面粗糙, 甚至有所缺陷的问题. 因此, 本章对光滑算法的研究旨在优化模型表面, 处理模型表面的不规则性, 确保模型表面光滑而连续, 使其更适合 3D 打印. 本章最后针对某些应用领域对于轻量化支撑结构的需求, 例如微电子器件, 生物医学器械等, 考虑一类具有特殊性质的曲面, 即三重周期极小曲面, 介绍了基于该曲面的自适应轻量化支撑结构设计算法. 本章介绍的两种数据重构技术, 重构光滑技术, 以及具有特殊性质的曲面结构设计算法, 它们共同构成了面向 3D 打印的设计 - 优化 - 仿真框架中的数字化

处理部分.

2.1. 点云偏置重构

点云偏置重构技术在工业设计、地形建模和医学影像处理等领域有着广泛的应用。通过激光扫描和传感技术，实现了复杂零部件的精确建模。随着激光扫描和三维传感技术的快速发展，点云偏置重构技术面临巨大挑战。第一，可采集的点云数据规模庞大，数据的处理和存储方式有待进一步升级；第二，点云数据的不规则性和噪声使得重构模型表面错综复杂。第三，点云数据的不完整性和缺失使得重构模型精度不高。此外，现有的算法在处理大规模复杂场景时，往往难以平衡高性能和准确度，因此如何提高重构算法的鲁棒性和适用性，是当前重构算法面临的一大挑战。目前的点云偏置重构技术根据重构模型曲面表示方式，分为显式曲面方法和隐式曲面方法^[19]。在显式曲面表示中，曲面的位置和几何形状以显式的方式表达。Boissonnat 等人^[20]使用 Delaunay 三角剖分来构建点集的单一连接形状。该方法通过逐步剔除 Delaunay 三角剖分中的四面体实现曲面重塑。而在隐式曲面重建方法中，通常在固定的矩形网格上构造一个符号距离函数，利用偏微扩散模型使得给定的散乱数据接近函数的零水平集，最终得到三维形状的零等值面^[4]。Ye 等人^[21]提出了一种从散乱点云中快速重建隐式曲面的方法，该方法针对重建表面建立一个窄带，并在该窄带的水平集函数上采用了一个高效的多重网格求解器，利用分区域的思想加速重构的计算。相场模型中的 Allen-Cahn(AC) 方程对界面过渡层和平均曲率运动具有内在的平滑作用^[22]。该方法相较于水平集方法而言减少了频繁的初始化操作，可以实现更加高效的求解。在基于 AC 的隐式曲面重建方法中，通过将相场函数作为在固定矩形网格上构建的符号距离标量函数，通过反应扩散作用使得散乱数据接近函数的零水平集^[23]。

该方法能有效地处理点云数据中缺失数据或者数据夹杂噪声的问题。该方法的具体模型如下：

对于通过扫描获得的点云数据 $S = \mathbf{X}_p = (X_p, Y_p, Z_p) \in \mathbb{R}^3 | p = 1, \dots, M$ 。从给定的无组织表面数据中重建一个以 l 为距离的均匀窄体，其中 M 是数据总量。为了得到一个平滑的窄域，我们使用以下偏微分方程^[24]：

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = g(\mathbf{x}) \left(-\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\epsilon^2} + \Delta \phi(\mathbf{x}, t) \right), \quad (2.1)$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \tanh \left(\frac{l - d(\mathbf{x})}{\sqrt{2}\xi} \right), \quad (2.2)$$

$$g(\mathbf{x}) = (1 - |\phi(\mathbf{x}, 0)|)|\phi(\mathbf{x}, 0)|, \quad (2.3)$$

其中 $\phi \in [-1, 1]$ 是相场函数，它在重构的窄域内外分别取 $\phi = 1$ 和 $\phi = -1$ 。三维结构体的表面由等势面 $\phi = 0$ 表示。方程中的双阱势函数取为 $F(\phi) = 0.25(\phi^2 - 1)^2$ ，相应参数 ϵ 和 ξ 都是正常数， $d(\mathbf{x})$ 是到目标点 \mathbf{x} 到结构体表面的无符号距离函数。从方程 (2.2) 中可以观察到，当 $d(\mathbf{x}) = l$ 时， $\phi(\mathbf{x}, 0) = 0$ 。这意味着 ϕ 的初始值足够接近精确解。假设 S 是给定的散乱数据， V 是嵌入的窄域， Ω 是包含 V 的全局域。为了减少计算成本，这里只在窄带域 $\Omega^{nb} = \{\mathbf{x} | |\phi(\mathbf{x}, 0)| < 1 - \delta\} \cap \Omega$ 内执行演化，其中 δ 是一个比较小的正参数，可选取为 $\delta = 0.01$ 。我们针对边界 $\partial\Omega^{nb}$ 选用 Dirichlet 边界条件进行处理：

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 - \delta & \text{if } \mathbf{x} \in \{\mathbf{x} | \phi(\mathbf{x}, 0) > 0\} \cap \partial\Omega^{nb}, \\ -1 + \delta & \text{if } \mathbf{x} \in \{\mathbf{x} | \phi(\mathbf{x}, 0) < 0\} \cap \partial\Omega^{nb}. \end{cases} \quad (2.4)$$

这种窄带计算可以在不损失精度的情况下大幅度的减少计算代价。为了更清晰的说明基于AC方程的点云偏置重构算法，我们在图2中展示了从点云数据到三维重构模型的技术路线。以二维空间中的离散点为例，首先针对离散点云进行空间中窄域的划分，如图2(a)-(c)所示，该窄域的界面是具有符合双曲函数性质的有限厚度的界面。其次针对划分出的窄域中的有限点进行计算，就可以重构出二维空间中的圆形。将该方法直接拓展到三维空间，针对如图2(e)中所示的点云数据，采用该算法可以直接重构出相应的三维模型，如图2(d)所示，其中三维窄域的划分如图2(f)所示。通过该结果可以看出，所采用的算法可以将点云数据进行重构得到光滑鲁棒的三维模型。

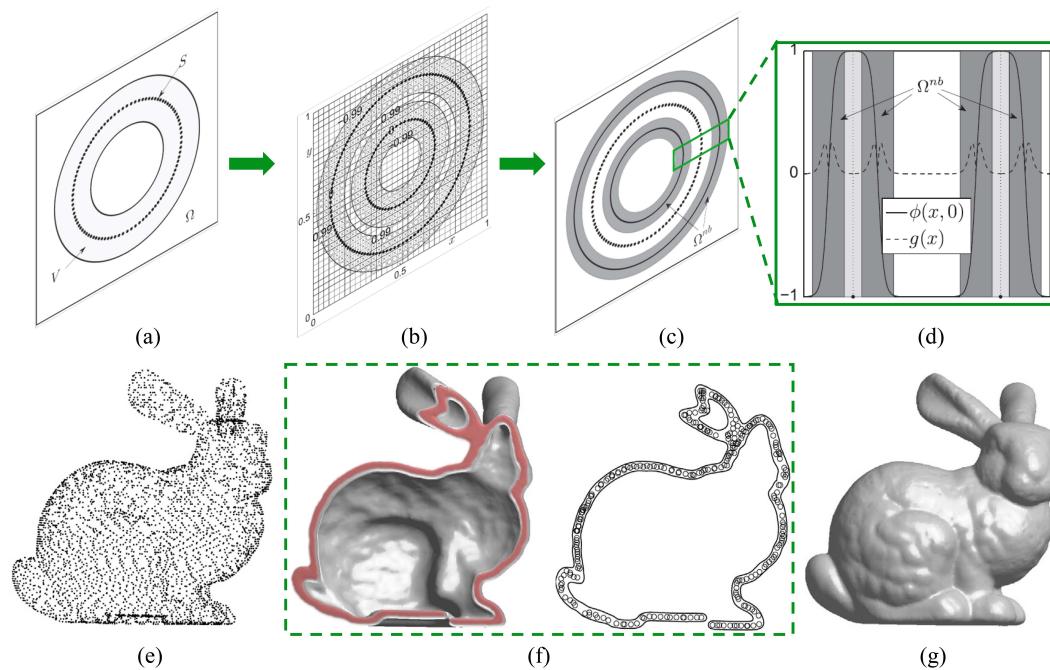


图2 从点云数据到三维重构模型的技术路线。(a) 二维离散点云数据。(b) 二维狭窄区域划分。(c) 二维点云数据和窄域的平面示意图。(d) 双阱势函数的剖面图。(e) 三维离散点云数据。(f) 三维模型切片以及离散点分布。(g) 三维模型重构效果示意图

2.2. CT 重构

CT重构是从一系列切片数据中重建三维实体的技术，广泛应用于医学诊断系统、治疗规划、解剖学教学以及虚拟手术系统等领域。在3D打印领域，针对大型制备件缺乏全局扫描技术，往往也通过切片扫描来获得其三维数据。由于切片数据中包含总体数据中的局部二维信息，将局部信息进行提取整合获得三维模型是一项重要研究。Guo等人^[25]提出了一种基于形态学插值的方法用于3D图像重建。Deng等人^[26]提出了一种基于变分隐式函数的3D超声表面重建方法。Sharma和Agarwal^[27]开发了一种利用非组织化的平面切片进行3D表面重建的方法。然而，现有的CT重建技术对于分离区域的处理较为出色，但在处理接触区域时存在很大困难。此外重构对象通常蕴含多种组分特征，在重构的同时如何将这些特征进行区分也

是一项挑战。因此目前迫切需要一种高效且稳健的算法，能够从一组交叉切片中重建多标签对象的三维体素模型，同时避免区域重叠。这种多组分体积重建技术不仅能用于获得分割模型，还能保持区域的分离。Bretin 等人^[28] 基于相场提出了一种利用几何正则性准则最小化变分的方法。Ju 及其合作者^[29] 提出了一种高效的拓扑控制重建算法，用于从交叉切片中重建多标签体积。这种方法既能产生平滑的多材料界面，同时也满足拓扑要求。在作者之前的研究中，通过在 Cahn-Hilliard (CH) 方程中引入一项保真项，可以实现对模型的平滑重建，同时保证所得数据接近切片数据。该方法旨在构建没有重叠区域或界面不匹配的三维模型。具体模型如下：

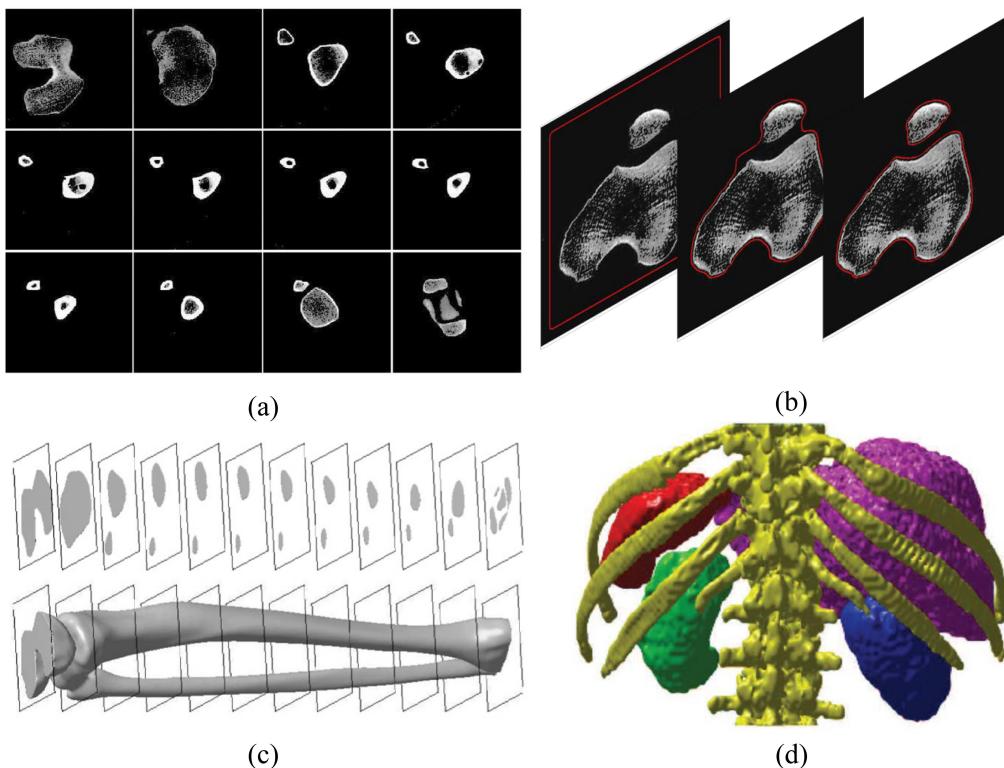


图 3 基于 CT 切片数据的模型重构算法示意图. (a) 人体骨骼真实 CT 切片数据. (b) 针对 CT 数据进行边缘检测. 其中红色线代表图像中剖分出来的人体组织. (c) 根据处理后的 CT 数据进行人体骨骼 (单相) 三维重构. (d) 根据 CT 数据进行重构的人体多器官模型

在定义域 $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ 中考虑一个 N 组分混合物。相场函数 $\phi_i = \phi_i(\mathbf{x}, t)$ 表示系统中每个组分的浓度。其中， $i = 1, \dots, N$ 是组分指标。我们用 \mathbf{x} 和 t 分别表示空间和时间变量。值得注意的是各组分的总和必须等于 1，即 $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$ 。令 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)$ 表示矢量值相场，总自由能定义为，

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{\phi}) = \int_{\Omega} \left(F(\boldsymbol{\phi}) + \frac{\epsilon^2}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \phi_i|^2 \right) d\mathbf{x}, \quad (2.5)$$

其中 $F(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^N \phi_i^2 (\phi_i - 1)^2 / 4$ 是双阱势函数。

相场的时间演化由以下多组分 CH 系统控制:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \Delta (f(\phi_i) + \bar{\beta}_i(\phi) - \epsilon^2 \Delta \phi_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.6)$$

其中

$$f(\phi_i) = \frac{\partial F(\phi)}{\partial \phi_i} = \phi_i(\phi_i - 0.5)(\phi_i - 1) \text{ 和 } \bar{\beta}_i(\phi) = -\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\phi_j). \quad (2.7)$$

上式中 $\bar{\beta}$ 变量为 Lagrangian 乘子, 旨在保持空间和时间上的质量守恒约束 $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$, 这是因为 Lagrangian 乘子满足以下特性:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^N \phi_i &= \sum_{i=1}^N \frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \Delta \left(\sum_{i=1}^N f(\phi_i) + \sum_{i=1}^N \bar{\beta}_i(\phi) - \epsilon^2 \Delta \sum_{i=1}^N \phi_i \right) \\ &= \Delta \left(\sum_{i=1}^N f(\phi_i) + \sum_{i=1}^N \bar{\beta}_i(\phi) \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

因此我们可以将用于多组分体积重建的多组分 CH 方程重新整理如下:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = \Delta [f(\phi_i) + \bar{\beta}_i(\phi) - \epsilon^2 \Delta \phi_i] + \lambda_i(\psi_i - \phi_i) \quad \text{for } i = 1, \dots, N, \quad (2.9)$$

其中

$$\lambda_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \lambda_i^0, & \text{如果 } \mathbf{x} \text{ 在第 } i \text{ 个分量的给定切片数据中,} \\ 0, & \text{其余情况.} \end{cases}$$

这里, λ_i^0 是第 i 个分量的正常数. 我们在 $\partial\Omega$ 上采用零 Neumann 边界条件 $\nabla \phi_i \cdot \mathbf{n} = 0$, 其中 \mathbf{n} 是 $\partial\Omega$ 上任意点的单位法向量. 在二维切片数据中, 总区域被分类为具有不同标签 ψ_i 的区域, 用来表示系统中每个组分的浓度, 并满足

$$\sum_{i=1}^N \psi_i = 1. \quad (2.10)$$

由于我们根据能量在 L^2 空间中采用梯度流方式推导的控制方程 (2.9) 中, 包含了保真项 $\lambda_i(\psi_i - \phi_i)$, $\int_{\Omega} \sum_{i=1}^N 0.5 \lambda_i (\psi_i - \phi_i)^2 d\mathbf{x}$. 因此对方程 (2.9) 两边同时求和, 可以得到

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^N \phi_i = \sum_{i=1}^N \left(\Delta [f(\phi_i) + \bar{\beta}_i(\phi) - \epsilon^2 \Delta \phi_i] + \lambda_i(\psi_i - \phi_i) \right) \\ &= \begin{cases} \lambda^0 \left(\sum_{i=1}^N \psi_i - \sum_{i=1}^N \phi_i \right), & \text{如果 } \mathbf{x} \text{ 在第 } i \text{ 个分量的给定切片数据中,} \\ 0, & \text{其余情况.} \end{cases} \end{aligned}$$

这里我们使用了方程 (2.8) 和 (2.10), 其中 $\lambda_i^0 = \lambda^0$, 以及 $\sum_{i=1}^N \phi_i = 1$. 通过以上模型, 我们的算法可以实现针对给定切片数据 ψ_i , 重构出相应的三维模型 ϕ_i . 为了更加详细的说明我们所提出的三维 CT 重构算法, 我们在图 3 中展示了所提出的算法示意图以及单相和多相模型的

重构效果。针对图 3(a) 中所展示的人体骨骼真实的 CT 切片数据，首先需要对所有切片数据进行目标边缘检测，如图 3(b) 所示，其中红色线代表图像中剖分出来的人体组织。根据处理后的 CT 数据进行人体骨骼的三维重构，如图 3(c) 所示。真实的 CT 数据是包含多组织、多目标结构的人体器官或组织的，这里所提出的 CT 切片数据重构算法，可以有效的剖分出多种目标结构，如图 3(d) 所示。该图展示的是通过所提出的算法根据真实胸片进行重构的包含人体部分脊柱、肺、胃、肾脏、心脏等器官的人体内部结构。从结果可以看出，该算法针对 CT 切片数据可以很有效的重构出相应的目标结构。

2.3. 重构光滑

由于获取数据的过程中难免会夹杂噪声数据，这使得通过数据重构技术得到的数字模型可能具有缺陷，而数字模型的缺陷所带来的影响会在真实加工制造中被放大。因此，需要构建针对重构模型进行光滑修复的技术，来确保优化和仿真之前的数字模型具有光滑鲁棒无缺陷的特性。在此之前，先介绍三维实体的可视化数据，即体素数据。基于体素的模型重构是一项用于可视化体数据的技术。该技术通过传递函数 (Transfer Functional, TF) 确定可视化结构并评估其效果^[30]。然而，通过传递函数渲染的模型存在两个主要缺点。第一，体数据中的体重叠问题或由于 TF 空间选择区域较大而引起的碎片化问题。第二，在可视化模型上存在孔洞或粗糙区域等缺陷。可视化中出现缺陷的原因是一些体素被分配了较低的不透明度。因此，对可视化重构模型缺陷的修复可以在扩散模型框架下通过利用较高不透明度的体素进行扩散演化来修补数字模型。

基于扩散方程对重构体进行修复的流程如下。首先标记体素的不透明度，得到每个体素作为结构体一部分的概率。设 $f(\mathbf{x})$ 是定义在区域 $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y) \times (0, L_z)$ 上的 3D 体数据，其中 $\mathbf{x} = (x, y, z) \in \Omega$ ，令 $\nabla f(\mathbf{x})$ 表示 $f(\mathbf{x})$ 的梯度函数。在体积渲染中，通过 TF 选择或分割特定区域来确定 $f(\mathbf{x})$ 中的某个体积，使用函数 $\psi(\mathbf{x})$ 来确定和表示体积缺陷。具体而言，如果体素 \mathbf{x} 被确定为结构体体素，则 $\psi(\mathbf{x}) = 1$ ；否则， $\psi(\mathbf{x}) = 0$ 。正如前文所述， ψ 包含许多良好的体素数据和少量的丢失数据。此时的目标是得到一个新的函数 $\phi(\mathbf{x})$ ，令它无限接近给定的 $\psi(\mathbf{x})$ 。此时可求 $\phi(\mathbf{x})$ 的平均曲率并且用具有零平均曲率的体素表示该体素是光滑没有孔洞的^[6]。而具有缺陷的部分体素的平均曲率将远大于零。因此，可以通过水平集框架中的平均曲率来检测丢失的结构体素，并且通过几何演化定律使体积的平均曲率保持为零，从而消除噪声并修复缺失的体积。根据这一思路，建立如下模型。假设给定体积数据 $\psi(\mathbf{x})$ 可以在平均曲率流动下移动，在此过程中，移动超表面的法向速度等于负的平均曲率：

$$V_n = -\kappa, \quad (2.11)$$

其中 V_n 表示几何体的法向速度， κ 是平均曲率。在平均曲率流驱动下，具有较高平均曲率的体素将快速移动。一旦体素发生移动，移动区域将通过从附近区域扩散的信息来补充。然而，方程 (2.11) 是定义在结构体上的，并且在体积移动时难以计算。而 AC 方程在这种情况下可以更简单地执行，并且具有平均曲率的运动性质^[31]：

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\epsilon^2} + \Delta \phi(\mathbf{x}, t). \quad (2.12)$$

式中， $\phi(\mathbf{x}, t)$ 为相场函数或概率分布函数，它分别接近于 1 和 0，用于表示体积的内部和外部。 ϵ 是正常数，与相变宽度有关。函数 $F(\phi) = 0.25\phi^2(\phi - 1)^2$ 是一个双势阱函数。为了使得修复

域中重构的体素与已知体素值相同, 在 AC 方程中加入了一个拟合项:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\epsilon^2} + \Delta \phi(\mathbf{x}, t) + \lambda(\mathbf{x})(\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}, t)), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.13)$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \psi(\mathbf{x}), \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega, \quad (2.15)$$

式中 λ 的取值如下:

$$\lambda(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \text{如果 } \mathbf{x} \in \Omega_D, \\ \lambda_0, & \text{其余情况.} \end{cases} \quad (2.16)$$

其中 λ_0 是一个正常数, Ω_D 是修复域, 可定义为 $\Omega_D = \{\psi(\mathbf{x})|\psi = 0\}$. 用到的已知的体素信息被标记为 $\psi = 1$, 其余的被标记为 $\psi = 0$. 假设 ϕ 在 $\partial\Omega$ 上满足 Neumann 边界条件, 如等式 (2.15) 所示, 其中 \mathbf{n} 是外法向量. 修复域中的体素值是通过曲率驱动的 AC 方程扩散得到的. 方程 (2.13) 的第三项使得修复区域外的体素值将趋近于已知体素值. 值得注意的是, 经过扩散反应后的 ϕ 可表示修复域重构的体素属于真实体积的概率, 例如 $\phi = 0.5$ 表示该体素有 50% 的概率属于真实结构.

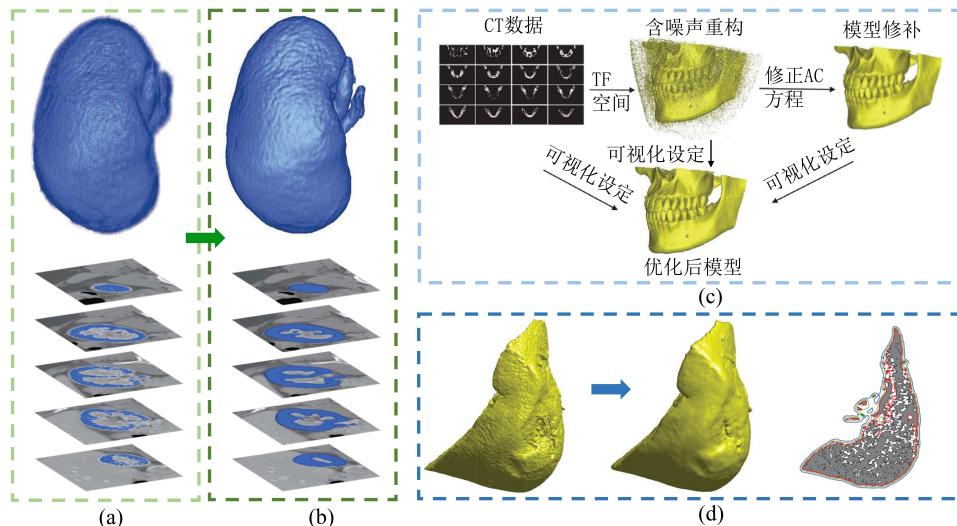


图 4 三维重构光滑算法示意图. (a) 原始 CT 数据重构算法结果以及相应切片结果. (b) 针对 (a) 结果进行光滑后的重构结果以及相应切片. (c) CT 数据重构, 降噪, 光滑一体化框架. (d) 真实器官(肝脏)重构光滑前后对比, 其中红线部分是在原始重构模型基础上通过本小节介绍的方法重新修复得到的结果

在实际应用中, 一些体素可能会被错误地标记为结构体素. 为了降低它们对体积修复结果的影响, 可以通过为这些体素的不透明度值分配一定的权重进行处理. 方程 (2.13)–(2.15) 的解 $\phi(\mathbf{x})$ 提供了体素属于真实体积的概率. 如果相对误差 $\partial\phi(\mathbf{x}, t)/\partial t$ 小于一定容差率 tol , 此时可把解 $\phi(\mathbf{x})$ 视为稳态解. 通过设定一个阈值 $\alpha \in (0, 1]$ 来确定具有较高概率 (例如, $\phi(\mathbf{x}) > \alpha$)

的体素为修复后的结构体素。在设计传输函数时，根据求得的解 $\phi(\mathbf{x})$ 和已知的体积数据 $\psi(\mathbf{x})$ 为每个体素分配不透明度值。体素的概率值越高，体素的不透明度就越大。然而，一些不属于结构体本身的体素可能被分配较高概率值。因此，可根据这些体素的灰度值 $f(\mathbf{x})$ 计算特定的权重来修改它们的不透明度值。这些体素通常在其邻域区域内具有相似的灰度值。如果恢复后的结构体素在其分布中具有一个灰度值，则它将被分配一个较大的权重；否则，它将被分配一个与其灰度值和分布中的一个灰度距离相关的权重。具体的不透明度设置如下所示：

$$Opa(\mathbf{x}) = \begin{cases} w\phi(\mathbf{x}), & \text{如果 } \phi(\mathbf{x}) > \alpha, \\ 0, & \text{其余情况,} \end{cases} \quad (2.17)$$

其中

$$w = \begin{cases} 1, & \text{如果 } \psi(\mathbf{x}) = 1, \\ \beta, & \text{如果 } \psi(\mathbf{x}) = 0 \text{ 并且 } \mathbf{x} \in \mathbf{K}_8, \\ \gamma, & \text{其余情况.} \end{cases} \quad (2.18)$$

这里 $\beta \in (0, 1)$, $\gamma \in (0, 1)$, 并且 $\beta > \gamma$. 当 $\psi(\mathbf{x}) = 1$ 时，意味着体素 \mathbf{x} 位于给定的体积区域内。 $\mathbf{x} \in \mathbf{K}_8$ 表示在 \mathbf{x} 处的 3D 图像的标量值满足 $|f(\mathbf{x}) - f_{\max}| \leq 8$ 或 $|f(\mathbf{x}) - f_{\min}| \leq 8$. 这里 f_{\max} 和 f_{\min} 分别是三维结构的最大和最小标量值。假设 $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.7$, 和 $\gamma = 0.3$. 这意味着这里只考虑属性大于 0.3 的体素。如果所考虑的体素已经在给定的体积中被标记过，那么将 $w = 1$ 设置为完全透明。如果该体素的灰度值与其在 3D 图像中的邻域非常相似，将设置 $w = \beta = 0.7$. 如果所考虑的体素在给定的体积中尚未被标记，并且其在三维图像中的灰度值与邻域区域差异很大，将设置 $w = \gamma = 0.3$ 以获得低不透明度的体素数据。

为了更清楚的展示基于修正的 AC 方程的曲面重构光滑算法，我们在图 4 中展示了该算法流程的示意图。该图针对真实人体器官的 CT 切片数据，按照章节 2.2 中所提出的重构算法，可以重构出相应的人体肾脏器官，如图 4(a) 所示。虽然可以重构出相应器官的外形结构，但是该三维结构表面粗糙，重构效果有待提升。通过本小节介绍的重构光滑算法，最终可以得到如图 4(b) 所示的光滑的器官模型。通过对比两图结果可以很清晰的看出我们的光滑算法可以有效的剔除重构模型表面的非物理毛刺，并将模型中的缺陷进行填补。图 4(c) 中展示的是 CT 数据重构，降噪，光滑一体化框架。针对人体头骨模型的切片数据进行重构，最终得到的优化后的模型。可以看出所介绍的算法有效的去除了 CT 数据中的噪声。图 4(d) 展示了缺少光滑算法和应用了光滑算法的人体真实肝脏器官重构结果，并将两者之间差距在最后一张二维对比切片中展示出来，其中红线部分是在原始重构模型基础上通过所提出的方法重新修正得到的结果。可以很明显的看出来，本节介绍的算法针对 CT 重构得到的模型确实具有修补效果，可以弥补由于 CT 切片数据中噪声引起的重构缺陷。

2.4. 极小曲面设计

曲面光滑和曲面形状对重构模型的准确性以及稳定性起着重要作用。除了针对三维模型进行重构和修复外，在真实制造过程中还需要考量该模型的机械性能，并为相应的数字模型提供轻量化支撑设计。本小节将介绍一种具有特殊性质的曲面，三重周期极小曲面 (Triple Periodic Minimal Surface, TPMS)，并基于该特殊曲面自适应设计任意模型的内部支撑结构。TPMS 结构在三个独立的方向上具有周期性并且表面平均曲率为常数^[32]，该类型结构的几

何形状强烈地影响着材料的物理性质。比较常见的 TPMS 结构有 Schwarz-P 结构, Schwarz-G 结构, Schwarz-D 结构, 以及 Schwarz-I-WP 结构, 更多关于极小曲面详细的内容介绍可以参考 [68, 69]。三重周期极小曲面属于同余空间的有效分割^[5], 因其结构稳定以及适合生物组织生长方面的出色性能, 被广泛应用在工程领域, 如双连续混合物, 洗涤剂膜, 溶致胶体和复杂生物系统。Qi 和 Wang^[33] 提出了一个具有周期表面的模型, 该模型可以生成近似的 TPMS。Pan 等^[32] 提出了一种新的基于质心 Voronoi 嵌套优化框架的离散常平均曲率曲面建模新方法。在任意曲面网格上执行六阶几何演化方程以获得最小表面。Jung 等人^[34] 在表面分离的区域(相) 体积分数的约束下, 研究了具有最小表面积的三周期表面。他们在域 Ω 上定义了 $\phi(\mathbf{x})$ 来表示表面 $\Gamma = \{\mathbf{x} : \psi(\mathbf{x}) = 0\}$, 令表面的内部为 $\{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) > 0\}$, 外部为 $\{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) < 0\}$ 。这里 ϕ 接近于符号距离函数, 其平均曲率 κ 定义为:

$$\kappa(\phi) = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right). \quad (2.19)$$

他们的方法受到 Osher 和 Santosa^[35] 的启发, 利用以下方程沿着最速下降的方向设计结构变量 ϕ :

$$\phi_t = v(\phi)|\nabla \phi|. \quad (2.20)$$

式中 v 为时空相关的速度场, 即

$$v(\phi) = \kappa(\phi) - \lambda, \quad (2.21)$$

式中 λ 为曲面上平均曲率的平均值, 即

$$\lambda = \frac{\int_{\Gamma} \kappa ds}{\int_{\Gamma} ds} = \frac{\int_{\Omega} \kappa \delta(\phi) dx}{\int_{\Omega} \delta(\phi) dx}. \quad (2.22)$$

在这里 $\delta(\mathbf{x})$ 是 Dirac 函数。通过结合方程 (2.20)–(2.22), 在平衡条件下迫使整个表面的平均曲率是恒定的, 即 $\kappa(\phi) = \lambda$ 。Yang 等人^[36] 使用类似水平集函数的 CH 方程生成三周期常平均曲率曲面。与水平集方法^[34]相比, 他们的模型速度更快, 效率更高。Yang 等人对三周期表面的研究是寻找受体积约束的总界面面积的局部最小值, 更新算法是基于 CH 方程用于 spinodal 分解^[37]的思想。他们在域 Ω 上定义相场 $\phi(\mathbf{x})$ 来表示表面 $\Gamma = \{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) = 1/2\}$, 表面内部用 $\{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) \approx 1\}$ 表示, 表面外部用 $\{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) \approx 0\}$ 来表示。因此, 具有体积分数守恒的 ϕ 的时间演化方程为:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = M \Delta \mu(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad 0 < t \leq T, \quad (2.23)$$

$$\mu(\mathbf{x}, t) = F'(\phi(\mathbf{x}, t)) - \epsilon^2 \Delta \phi(\mathbf{x}, t), \quad (2.24)$$

式中 M 为常数, $F(\phi)$ 和 ϵ 同以上定义。通过假设相场轮廓为双曲切线轮廓^[36, 38], 即

$$\phi(\mathbf{x}, t) = 0.5 + 0.5 \tanh \left(\frac{d(\mathbf{x}, t)}{2\sqrt{2}\epsilon} \right), \quad (2.25)$$

式中 $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ 是两相的交界面。 $d(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t)$ 是从交界面到 \mathbf{x} 的符号距离函数。如果 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 从 0.05 变成 0.95, $d(\mathbf{x}, t)$ 则属于 $(-2\sqrt{2}\epsilon, 2\sqrt{2}\epsilon)$ 区间。方程 (2.25) 是由热力学相场模型^[39, 40] 平衡曲线驱动的。如果采用方程 (2.25) 刻画界面上的相场变化, 则下式满足

$$F(\phi) = \frac{\phi^2(1-\phi)^2}{4} \approx \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2, \quad (2.26)$$

也就是 $|\nabla\phi| = \phi(1 - \phi)/(\sqrt{2}\epsilon)$. 通过使用方程 (2.26), 重新整理方程 (2.19) 可得:

$$\begin{aligned}\kappa &= \nabla \left(\frac{1}{|\nabla\phi|} \right) \cdot \nabla\phi + \frac{\Delta\phi}{|\nabla\phi|} = \nabla \left(\frac{\sqrt{2}\epsilon}{\phi(1 - \phi)} \right) \cdot \nabla\phi + \frac{\Delta\phi}{|\nabla\phi|} \\ &= -\frac{\sqrt{2}\epsilon(1 - 2\phi)|\nabla\phi|^2}{\phi^2(1 - \phi)^2} + \frac{\Delta\phi}{|\nabla\phi|} = -\frac{(1 - 2\phi)}{\sqrt{2}\epsilon} + \frac{\sqrt{2}\epsilon\Delta\phi}{\phi(1 - \phi)} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\epsilon\phi(1 - \phi)} \left(-\phi^3 + \frac{3}{2}\phi^2 - \frac{\phi}{2} + \epsilon^2\Delta\phi \right) = \frac{1}{|\nabla\phi|} \left(-\frac{F'(\phi)}{\epsilon^2} + \Delta\phi \right).\end{aligned}\quad (2.27)$$

通过调用方程 (2.24) 和 (2.27), 可以将方程 (2.23) 改写为 $\phi_t = \epsilon^2 M \Delta\kappa \Delta|\nabla\phi|$, 这意味着在平衡条件下, 由 CH 方程得到的平均曲率在整个表面上是常数, 即 $\Delta\kappa = 0$. 在此模型中, 总体积 $\int_{\Omega} \phi d\mathbf{x}$ 是守恒的, 即:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \phi_t d\mathbf{x} = \int_{\Omega} M \Delta\mu d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} M \frac{\partial\mu}{\partial n} d\mathbf{s} = 0,$$

这里用到了三周期边界条件. 为了降低计算成本并结合水平集建模和 CH 方程的优点, 我们针对结构曲面的修复使用修正的 AC 方程并提出相应的控制方程

$$\phi_t = |\nabla\phi|(\kappa(\phi) - \lambda) = -\frac{F'(\phi)}{\epsilon^2} + \Delta\phi - \lambda \frac{\phi(1 - \phi)}{\sqrt{2}\epsilon}. \quad (2.28)$$

上式融合了方程 (2.20), (2.26) 和 (2.27) 以及 λ 的定义. 在相场框架中, 正则 Dirac 函数可以记作 $\delta(\phi) = |\nabla\phi|^{[41]}$. 通过使用正则 Dirac 函数和方程 (2.26)–(2.27), 可以将方程 (2.22) 改写为

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{\int_{\Omega} \kappa \delta(\phi) dx}{\int_{\Omega} \delta(\phi) dx} = \frac{\int_{\Omega} \kappa |\nabla\phi| dx}{\int_{\Omega} |\nabla\phi| dx} = \frac{\sqrt{2} \int_{\Omega} (-F'(\phi) + \epsilon^2\Delta\phi) dx}{\epsilon \int_{\Omega} \phi(1 - \phi) dx} \\ &= \frac{-\sqrt{2} \int_{\Omega} F'(\phi) dx + \sqrt{2}\epsilon^2 \int_{\partial\Omega} \frac{\partial\phi}{\partial n} d\mathbf{s}}{\epsilon \int_{\Omega} \phi(1 - \phi) dx} = \frac{-\sqrt{2} \int_{\Omega} F'(\phi) dx}{\epsilon \int_{\Omega} \phi(1 - \phi) dx}.\end{aligned}\quad (2.29)$$

综上, 在所介绍的 AC 类型的方程 (2.28) 中, 参数 λ 有两个影响. 其一是曲面上平均曲率的平均值, 另一个是体积分数守恒约束. 对方程 (2.28) 的两边进行积分得到:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \phi_t d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} (-\kappa |\nabla\phi| + \lambda |\nabla\phi|) d\mathbf{x} \\ &= -\int_{\Omega} \kappa |\nabla\phi| d\mathbf{x} + \lambda \int_{\Omega} |\nabla\phi| d\mathbf{x} = -\int_{\Omega} \kappa |\nabla\phi| d\mathbf{x} + \frac{\int_{\Omega} \kappa |\nabla\phi| dx}{\int_{\Omega} |\nabla\phi| dx} \int_{\Omega} |\nabla\phi| d\mathbf{x} = 0.\end{aligned}$$

因此, 方程 (2.28) 的解 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 具有总体积分数守恒的性质. 在 3D 打印领域使用 TPMS 单元结构作为设计轻量化支撑结构的时候, 需要考虑结构联通属性的同时保持曲率守恒的性质, 因此, 设计一套基于 TPMS 特性进行全局结构优化的复合多孔支架算法是有必要的. 这种算法可涉及两个步骤. 第一步是针对隐式函数框架下的单元 TPMS 结构进行合并. 复合支架可以通过合并不同的单元结构来设计以满足内部连通性的要求. 详细的合并过程可以参考图 5(b). 该图展示了二维多尺度极小曲面结构拼接过程, 该方法经验证也适用于三维空间. 第二步是基于算子分裂法对所设计的复合材料支架进行优化, 以满足曲率守恒的性质. 在图 5(a) 中清

楚地展示所提出的优化算法框架。为了优化多 TPMS 单元复合轻量化支撑结构, 可在水平集框架中定义:

$$\psi(\mathbf{x}) := \begin{cases} 1 & \text{如果 } \tilde{\psi}(\mathbf{x}) > \alpha(\tilde{\psi}_{\max} - \tilde{\psi}_{\min}), \\ 0 & \text{如果 } \tilde{\psi}(\mathbf{x}) < -\alpha(\tilde{\psi}_{\max} - \tilde{\psi}_{\min}), \\ \frac{0.5\tilde{\psi}(\mathbf{x})}{\alpha(\tilde{\psi}_{\max} - \tilde{\psi}_{\min})} + 0.5 & \text{其他情况.} \end{cases}$$

将 $\tilde{\psi}$ 的零水平集作为结构的表面来区分轻量化支撑结构的内部和外部。如果确定体素 \mathbf{x} 是一个该支撑结构的体素, 那么 $\tilde{\psi}(\mathbf{x}) > 0$; 否则, $\tilde{\psi}(\mathbf{x}) < 0$ 。这里 $\tilde{\psi}_{\max}$ 和 $\tilde{\psi}_{\min}$ 分别为 $\tilde{\psi}$ 的最大值和最小值, α 是控制界面转换的双曲正切参数。在 L_2 空间中构造自由能泛函:

$$\mathcal{E}(\phi) = \int_{\Omega} \left(\frac{F(\phi)}{\varepsilon^2} + \frac{|\nabla \phi|^2}{2} + \lambda \frac{g(\phi)}{\sqrt{2}\epsilon} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\beta}{2} (\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}, \quad (2.30)$$

当 $g(\phi) = \phi^2/2 - \phi^3/3$ 时, 可以推导出具有约束梯度流的系统为:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\varepsilon^2} + \Delta \phi(\mathbf{x}, t) - \lambda \frac{\phi(1 - \phi)}{\sqrt{2}\epsilon} + \beta(\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}, t)), & \mathbf{x} \in \Omega, t > 0 \\ \phi(\mathbf{x}, 0) = \psi(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{n}} = 0, & \mathbf{x} \in \partial \Omega, t > 0, \end{cases} \quad (2.31)$$

其中 β 为正常数, ϕ 满足 $\partial \Omega$ 上的 Neuman 边界条件, \mathbf{n} 为向外法向量。由于惩罚项 $\beta(\psi - \phi)$ 的存在, 该系统可以保证计算结果 ϕ 尽可能与原模型 ψ 保持相似。这里 ψ 描述了复合的 TPMS 结构, 它近似于最小曲面结构。观察修正后的方程, 可以发现在平衡条件下, 函数 ϕ 变成了极小曲面结构。因此, 该基于 TPMS 单元的复合结构可以被修正为极小曲面结构。

为了证明所设计的轻量化支撑结构具有连通性, 我们在图 5(c) 使用八个不同孔隙率的 Schwarz-P 结构设计了一个复合轻量化支撑结构。该子图右侧是该复合结构从上到下的八张切面结果。从这些结果可以清晰的看出所提算法在保证复合结构满足极小曲面性质的同时, 很好的处理了原始单元结构不光滑, 不连通的问题。通过 3D 打印技术打印了一个基于不同尺寸 TPMS 单元的复合轻量化结构, 如图 5(d) 所示。可见由所提算法设计的复合结构适合实际制造, 并且具有可接受的稳定性和连通性。为了检验基于该方法设计的复合多孔结构的机械性能, 在原始多孔结构和设计得到的多孔结构上负载 150N 的外力, 由此计算 von Mises 应力的大小和分布。假设制造两种结构使用的是均匀的, 且具有各向同性的线弹性材料。图 5(d) 最后两张图片展示了修正的 TPMS 支撑结构和原始结构上 von Mises 应力的大小和分布情况。仿真结果表明, 改进后的结构的应力分布比原结构的应力分布更均匀, 因此具有更稳定的特性。

3. 优化设计 (“优化化”)

在 3D 打印中, 为了满足不同应用场景下复杂结构的需求, 需要不断对复杂结构进行优化设计, 其中涉及几何形状设计, 支撑结构设计, 切片参数优化, 路径规划优化, 材料选择优化以及后处理工艺优化等多个方面。由于“优化化”模块涉及种类繁杂, 本文仅以最大化制备件性能为目标, 介绍基于相场方法的结构优化设计方法。结构优化设计的常见方法为拓扑优化方法, 该方法可以在特定的设计空间内对材料布局进行优化, 以实现在给定荷载, 边界和

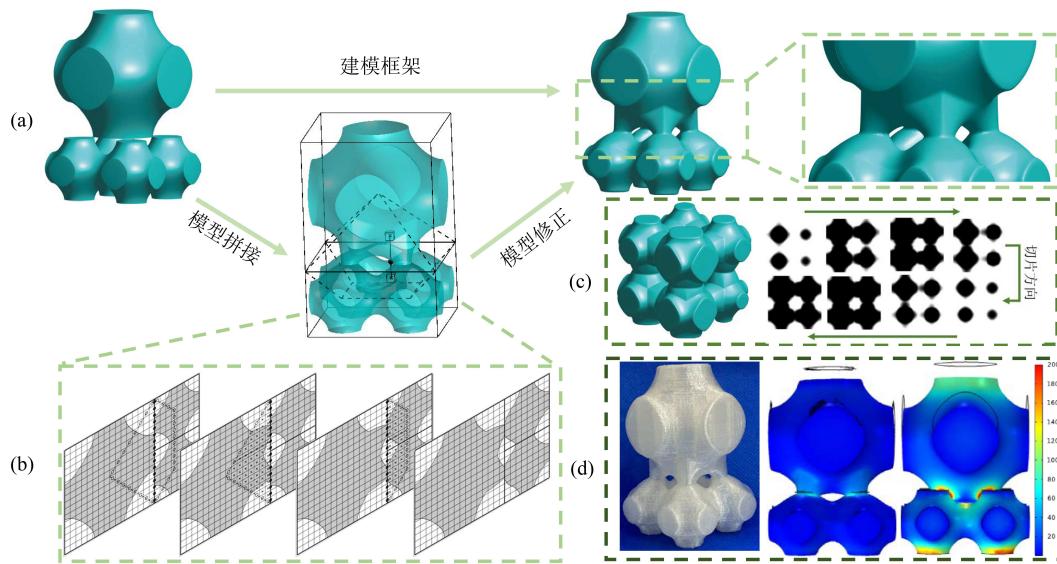


图 5 极小曲面结构优化设计以及加工检测. (a) 多尺度极小曲面单元拼接优化方法的流程框架图. (b) 二维切片数据插值示意图. (c) 变孔隙率的模型拼接连通性探究. (d) 优化结构的真实制造结果以及数值应力分布测试

约束条件下设计结构性能的最大化. 目前, 拓扑优化已广泛应用于结构分析^[42], 水动力学^[43], 热弹性^[44] 和电磁学^[45] 等学科领域. Kikuchi^[7] 在 1988 年提出拓扑优化方法, 通过几十年的发展, 逐渐成为目前 3D 打印的主流优化方法, 为不同加工工艺的制造提供解决方案. 目前拓扑优化方法可以分为各向同性材料罚函数法 (Solid isotropic material with penalization)^[46], 渐进结构优化 (Evolutionary structural optimization)^[47], 水平集方法 (Level set method)^[48] 和相场方法 (Phase field method)^[8]. 在这篇文章中, 我们针对纯固体材料结构介绍了优化制备件机械性能的多尺度多材料拓扑优化方法, 该类方法综合考量了增材制造的工艺需求 (联通), 性能需求 (最小化柔度) 以及设计的可行性. 这意味着我们不再局限于单一材料或单一尺度的优化, 而是将目光拓展到了更广泛的范围, 涵盖了不同尺度下材料的组合和优化. 通过在多尺度上优化材料的分布和结构, 我们能够更好地调控制备件的力学性能, 并在不同尺度下实现更好的性能平衡和优化结果. 同时, 针对流固耦合应用的制备件设计, 我们还进行了多物理场景下的拓扑优化研究. 在制备件设计中考虑流固耦合的影响, 对于实现更准确的设计和更优异的性能至关重要. 我们通过多物理场景下的拓扑优化研究, 探索了不同物理场景下的最佳结构配置, 以实现在流固耦合条件下的最佳性能表现和应用效果. 需要指出的是我们在“优化化”过程中的研究为增材制造中的设计模块儿和制造模块儿之间建立了沟通渠道, 使得两者之间不再相互独立, 但仍有许多工作需要完善, 例如建立制造向设计的反馈通道等.

3.1. 多尺度多材料框架下的拓扑优化建模与应用

通过 3D 打印技术可以精确控制人造骨骼组织构建, 该技术在制造生物支架方面引起了广泛关注^[50]. 人工骨关节应像天然骨骼一样, 由具有生物相容性和生物活性的多孔支架组成. 生物多孔支架应具备以下特点^[51]: (i) 具有相互连接的三维多孔结构, 包括连通的孔隙用于输送营养物质和排除代谢废物; (ii) 具有生物相容性, 能够被人体组织降解和再吸收, 具备人工调

节机制; (iii) 提供适宜的环境, 促使细胞的分裂, 增殖和分化; (iv) 具备适当的机械性能, 以适应移植部位的组织。Chua 等^[52] 研究了适用于组织支架的多面体形状, 并为 AM 开发了组织工程支架库。Puppi 等^[53] 采用 3D 打印技术生成了一种用于制造 3D 聚合物支架的模型。事实上, 人工设计的多孔结构具有卓越的力学性能, 例如高热绝缘性^[11], 良好的组织吸附性^[54], 出色的强度和刚度^[55] 等, 因此该技术被广泛使用。

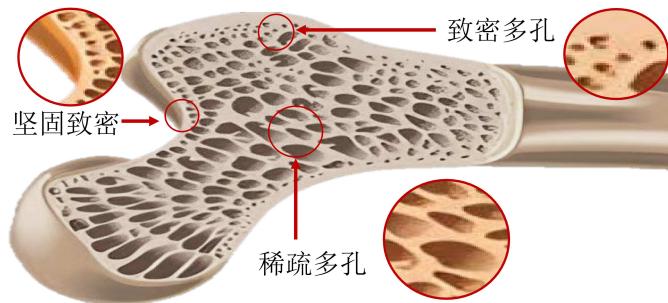


图 6 人体骨骼示意图说明。人体骨骼中区域可以粗略分为坚固致密, 致密多孔, 稀疏多孔类型

在进行人工骨关节内部轻量化支撑结构设计的时候, 需要利用多材料算法探究骨骼内部不同种类材料的分布。利用拓扑优化方法, 可以在特定的设计空间内对材料布局进行优化, 以实现在给定载荷, 边界和约束条件下设计结构的特定性能最大化。此外, 需要利用多尺度算法探究内部支撑结构的组合关系, 同时考虑宏观结构载荷和边界条件对微结构设计的影响, 以实现复合结构的多尺度拓扑优化。多尺度拓扑优化已广泛应用于最小耗散^[56], 最佳导热配置^[57], 功能梯度材料设计^[58] 和多孔复合材料的频率响应^[59] 等问题。在过去的几十年里, 用单个数学方程自由生成孔隙形状进行隐式表面建模, 为骨骼组织数字化设计提供了一种新思路^[60]。其中具有代表性的是针对 TPMS 的研究。TPMS 模型的固有孔隙率可以表征聚合物和大分子的自然形态, 现已被证明非常适合人体组织支架^[61], 使用 TPMS 结构创建蜂窝状材料可以克服基于支架结构的共同弱点。Melchels 等人^[62] 证明多孔支架的高渗透性和气孔的强大可及性, 在细胞增殖, 营养物质运输和代谢物方面具有更有利的生物学行为。Yang 等人^[63] 基于不同的 TPMS 结构提出了一种启发式仿生结构设计方法, 可以有效地生成不同孔隙形态的结构组合。因为天然骨表现出各向异性和不均匀的材料分布等特性, 在人造骨优化设计中, 需要合理的设计和优化组织支架结构来满足这些特性^[63]。这就要求人工骨骼的内部组织支架必须由数以万计的不同类型和大小的结构组成, 而模拟生物形态的结构则可以通过连续的曲面将模型内部划分为多个子空间(孔隙和非孔隙)^[64] 来实现。

如图 6 所示, 人体骨骼结构中, 靠近中心的位置呈现出稀疏多孔的结构, 而靠近骨表面的区域则呈现出致密多孔的特征, 最外层的骨骼表面则具有坚固致密的结构。为了更好地模拟天然骨骼的材料分布, 在之前的研究中, 作者特别关注了天然骨骼内部材料的连通特性, 并且在满足骨骼机械性能要求的前提下, 采用了多尺度多材料框架下的拓扑优化方法。此处先以球形结构为例, 对人体骨骼内部结构的设计进行说明。如图 7 所示, 采用不同尺寸的 P 类型的 TPMS 结构进行轻量化复合支架设计。图 7(a) 是将填充后的多孔支架以及球壳进行 Boolean 差运算得到的切片结果以及复合结构的局部放大视图。图 7(b) 上半部分是球体模型的有限厚度的壳体, 下半部分是相应的轻量化支撑结构。通过 Boolean 并运算可以得到针对球壳进行轻

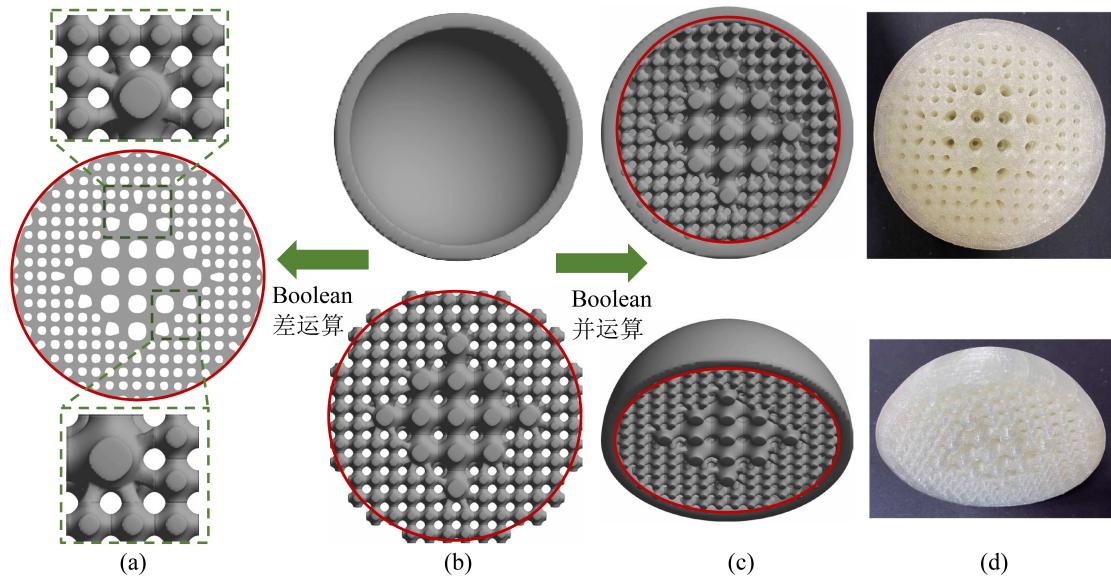


图 7 针对球体采用两种不同尺寸的 Schwarz-P 类型基础结构进行轻量复合支架设计. (a) 进行 Boolean 差运算的切片结果以及复合结构的局部放大视图. (b) 有限厚度球壳和针对半球的轻量化复合结构. (c) 进行 Boolean 并运算的复合结构. (d) 根据所提出的数学算法在不同的视图下生成物理模型的真实制造结果

量化支撑结构设计的模型. 为了验证得到的多孔支撑结构的机械性能, 在图 7(d) 中展示了采用热熔融技术制备的模型. 从图中可以看到, 设计的模型在真实的 3D 打印加工过程中表现出了很好的效果. 为了更清晰的说明该设计框架是如何分层次, 分步骤的为人工骨骼结构设计提供自适应的解决方案, 下文中作者将分成多材料拓扑优化和多尺度拓扑优化两个部分介绍.

3.1.1. 多尺度拓扑优化建模与应用

多尺度拓扑优化是指在进行拓扑结构优化时, 考虑不同尺度的结构特征以获得设计结构的更好的力学性能^[47]. 这种方法为设计和优化复杂结构提供了一种综合考虑不同尺度特征的方式, 以更全面有效地进行结构设计和优化. 多尺度拓扑优化主要关注两个问题: (1) 是否比传统的单尺度拓扑优化更好. (2) 相邻微结构之间是否连通. 近些年来, 众多方法被开发出来以解决上述两种跨尺度拓扑优化面临的核心挑战. 在均匀化方法^[65]中, 宏观结构的性质可以等效地用各向同性或各向异性的多孔微结构表示, 从而大大降低了优化宏观结构的计算复杂性. 具有惩罚的实体各向同性材料 (Simple isotropic material with penalization, SIMP) 方法^[66]通过考虑密度设计变量和材料性质之间的插值, 生成了一个良性优化问题. 但像 SIMP 这种基于单元的拓扑优化方法通常会导致结构边界出现锯齿状缺陷, 并且存在数值不稳定的问题, 通常需要采用额外的算法, 比如滤波方案^[67], 来避免此类不稳定性. 由 Hamilton-Jacobi 方程驱动的隐式水平集方法^[48]通过高维水平集函数的零等值面隐式跟踪结构边界, 然而该方法的计算过程中需要不断地进行重新初始化操作, 这往往导致计算收敛缓慢以及陷入局部极小值的问题. 相场法同样属于边界演化方法, 目前在分级材料优化中逐渐流行起来. 相场法中由于引入了有限厚度的界面, 通过该方法可以在追踪边界变化的同时捕捉拓扑结构变化的型状. 因此, 在前期的研究中, 作者结合均匀化方法和相场法来优化多尺度结构的柔顺性问题^[49]. 所提出的多尺度拓扑优化框架包括三个阶段: (1) 进行宏观尺度的拓扑优化, 以获得宏

观结构的固定拓扑形状; (2) 针对宏微观两尺度开发并行拓扑优化方法, 以实现在最佳宏观结构中微结构的设计; (3) 处理多个微结构之间的联通性问题, 将宏观载荷传递到整个复合结构。为了降低问题的复杂度, 在研究中始终假设宏观结构由多种微结构构成, 且每种微结构都周期性地分布在宏观结构的不同区域。

首先定义一些数学符号。 Θ^M , Γ^M 和 Ω^M 表示宏观固体域, 结构边界和宏观结构的参考域。宏观空白域可以描述为 Ω^M/Θ^M 。基于相场法的拓扑优化需要引入一个范围从 0 到 1 的相场函数, 用于确定宏观结构的材料质量浓度:

$$\begin{cases} \phi^M(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega^M/\Theta^M, \\ 0 < \phi^M(\mathbf{x}) < 1, & \mathbf{x} \in \Gamma^M \cap \Omega^M, \\ \phi^M(\mathbf{x}) = 1, & \mathbf{x} \in \Theta^M. \end{cases} \quad (3.1)$$

在 Ω^M 上, 线性弹性方程可以记作如下形式:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma(\phi^M, \mathbf{u}^M) = 0, \\ \varepsilon(\mathbf{u}^M) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^M + (\nabla \mathbf{u}^M)^T), \\ \sigma(\phi^M, \mathbf{u}^M) = \mathbf{D}^M(\phi^M) : \varepsilon(\mathbf{u}^M). \end{cases} \quad (3.2)$$

这里, \mathbf{u}^M 代表位移向量。设 $\mathbf{D}^M(\phi^M) = (\phi^M)^3 \mathbf{D}$, 其中 \mathbf{D} 是一个四阶刚度张量, 记作 $D_{ijkl} = 2G(\delta_{ik}\delta_{jl} + \frac{\nu}{1-2\nu}\delta_{ij}\delta_{kl})$ 。其中, $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$ 是剪切模量, E 是弹性模量, ν 是泊松比, δ 是 Dirac 函数。 $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \mathbf{A}_{ij}\mathbf{B}_{ij}$ 是两个二阶张量的内积。我们用 Θ_τ^m , Γ_τ^m 和 Ω_τ^m 来表示第 τ 个微结构的实体域, 结构边界和参考域。宏观参考域 Ω^M 被划分为 Π 个微观参考子域 Ω_τ^m , $\tau = 1, \dots, \Pi$ 。每个 Ω_τ^m 只由一种微结构组成。第 τ 个微结构的相场函数定义如下:

$$\begin{cases} \phi_\tau^m(\mathbf{y}) = 0, & \mathbf{y} \in \Omega_\tau^m/\Theta_\tau^m, \\ 0 < \phi_\tau^m(\mathbf{y}) < 1, & \mathbf{y} \in \Gamma_\tau^m \cap \Omega_\tau^m, \quad (\tau = 1, 2, \dots, \Pi) \\ \phi_\tau^m(\mathbf{y}) = 1, & \mathbf{y} \in \Theta_\tau^m. \end{cases} \quad (3.3)$$

宏观和微观尺度的设计变量的演化方程可以分别记作:

$$\frac{\partial \phi^M}{\partial t} = -F'(\phi^M) + (\epsilon^M)^2 \Delta \phi^M - \eta^M \frac{\partial W^M}{\partial \phi^M} - \gamma^M (\phi^M - \psi^M) - \beta^M (A(\phi^M) - V_0^M), \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \phi_\tau^m}{\partial t} = F'(\phi_\tau^m) + (\epsilon_\tau^m)^2 \Delta \phi_\tau^m - \eta_\tau^m \frac{\partial W^M}{\partial \phi^M} - \gamma_\tau^m (\phi_\tau^m - \psi_\tau^m) - \beta_\tau^m (A(\phi_\tau^m) - V_\tau^m), \quad (3.5)$$

其中 $\tau = 1, 2, \dots, \Pi$ 。 V_τ^m 是第 τ 个微结构的最大体积分数。我们通过设计 N 个元素对宏观参考设计域 Ω^M 进行离散。假设第 i 个元素的设计变量为 ϕ_i^M , 其中 $i = 1, \dots, N$ 。这里, 需要针对宏观和微观设计变量的目标函数的一阶导数进行说明:

$$\int_{\Omega^M} \frac{\partial W^M}{\partial \phi^M} d\mathbf{x} = - \sum_{\tau=1}^{\Pi} \int_{\Omega_\tau^M} \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^M) : 3(\phi_\tau^M)^2 \mathbf{D}_\tau^H : \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^M) d\mathbf{x}. \quad (3.6)$$

$$\int_{\Omega^M} \frac{\partial W^M}{\partial \phi_\tau^m} d\mathbf{x} = - \int_{\Omega_\tau^M} \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^M) : (\phi_\tau^M)^3 \frac{\partial \mathbf{D}_\tau^H}{\partial \phi_\tau^m} : \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^M) d\mathbf{x}. \quad (3.7)$$

宏观尺度拓扑优化问题的目标是找到 ϕ_i^M 的最佳分布, 以实现目标函数 J^* 的最小化。 ϕ^M 通过方程 (3.4) 进行演化, 其最优解可作为下一阶段宏观结构拓扑形状的依据, 这意味着在宏观尺度拓扑优化阶段中, 方程 (3.5) 中的 ψ^M 等于 ϕ^M 的最优分布。接下来将对多尺度并行拓扑优化的数学模型进行简要描述。类似于 Ω_τ^m 的定义, Ω_τ^M 被定义为包含属于 Ω_τ^m 的所有宏观单元的宏观参考子区域。将微观参考域 Ω_τ^m 离散化为 N_τ^m 个单元。微观设计变量 $\phi_{\tau,j}^m$ 表示 Ω_τ^m 中第 j 个单元的密度分数。我们知道, 多尺度拓扑优化的目标是找到最优的 ϕ_i^M 和 $\phi_{\tau,j}^m$ 分布, 以最小化宏观结构的柔度 $J(\phi^M, \phi^m)$ 。为了实现该目标, 先对符号进行说明: \mathbf{u}_τ^M 表示子区域 Ω_τ^M 中所有宏观单元的位移向量。 ϕ_τ^M 表示子区域 Ω_τ^M 中所有宏观单元的密度。 \mathbf{u}_τ^m 表示子区域 Ω_τ^m 中所有微观单元的位移向量。 $|\Theta_\tau^m|$ 表示 Ω_τ^m 的面积。 \mathbf{V} 是位移空间。第 τ 个代表性微结构的均匀化刚度矩阵 \mathbf{D}_τ^H 可以通过数值均匀化方法得到^[65]。 \mathbf{D}_τ^m 表示第 τ 个微结构的刚度张量。 \mathbf{u}_τ^0 表示初始单元位移场, V_0^M 表示规定的总材料消耗量, V_τ^m 表示第 τ 个微结构的体积约束。多尺度并行拓扑优化的数学模型如下所示:

$$\begin{aligned} & \text{寻找: } \phi_i^M, \phi_{\tau,j}^m \quad (i = 1, \dots, N^M; \tau = 1, \dots, \Pi; j = 1, \dots, N_\tau^m) \\ & \text{最小化: } J(\phi^M, \phi^m) = \eta^M J(\phi^M, \phi_\tau^m) + \int_{\Omega^M} \left(F(\phi^M) + \frac{(\epsilon^M)^2}{2} |\nabla \phi^M|^2 \right) d\mathbf{x} \\ & \quad + \frac{\gamma^M}{2} \int_{\Omega^M} (\phi^M - \psi^M)^2 d\mathbf{x} + \frac{\beta^M}{2} (A(\phi^M) - V_0^M)^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

使得如下条件得到满足:

$$\begin{aligned} & \sum_{\tau=1}^{\Pi} \int_{\Omega_\tau^M} \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^M) : (\phi_\tau^M)^3 \mathbf{D}_\tau^H : \varepsilon(\mathbf{v}_\tau^M) d\mathbf{x} = \int_{\partial \Omega^M} \mathbf{s} \cdot \mathbf{v}^M ds, \forall \mathbf{v}_\tau^M \in \mathbf{V}(\Omega_\tau^M), \quad \forall \mathbf{v}^M \in \mathbf{V}(\Omega^M), \\ & \int_{\Omega_\tau^m} \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^m) : (\phi_\tau^m)^3 \mathbf{D}_\tau^m : \varepsilon(\mathbf{v}_\tau^m) d\mathbf{y} = \int_{\Omega_\tau^m} \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^0) : (\phi_\tau^m)^3 \mathbf{D}_\tau^m : \varepsilon(\mathbf{v}_\tau^m) d\mathbf{y}, \quad \forall \mathbf{v}_\tau^m \in \mathbf{V}(\Omega_\tau^m), \\ & \mathbf{D}_\tau^H = \frac{1}{|\Theta_\tau^m|} \int_{\Omega_\tau^m} (\varepsilon(\mathbf{u}_\tau^0) - \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^m)) : (\phi_\tau^m)^3 \mathbf{D}_\tau^m : (\varepsilon(\mathbf{u}_\tau^0) - \varepsilon(\mathbf{u}_\tau^m)) d\mathbf{y}, \\ & \int_{\Omega_\tau^m} \phi_\tau^m d\mathbf{y} \leq V_\tau^m, \quad V_\tau^m = \bar{\phi}^\tau = \frac{1}{N^{\tau}} \sum_{i=1}^{N^{\tau}} \phi_{\tau,i}^M \quad (\tau = 1, 2, \dots, \Pi), \quad \tau = 1, \dots, \Pi. \end{aligned}$$

在这里, ψ^M 用于定义 Ω^M 中宏观结构的拓扑形状。校正项 $\int_{\Omega^M} (\phi^M - \psi^M)^2 d\mathbf{x}$ 使得解 ϕ^M 尽可能接近于固定形状 ψ^M 。 γ^M 是一个正参数。方程里面的四阶刚度张量 $\mathbf{D}_\tau^m = D_{\tau,ijkl}^m = 2G_\tau(\delta_{ik}\delta_{jl} + \frac{\nu_\tau}{1-2\nu_\tau}\delta_{ij}\delta_{kl})$ 。 G_τ 和 ν_τ 是第 τ 个微结构的弹性性能指标。为了简化起见, 我们假设所有的微结构具有相同的材料性质, 即 $\mathbf{D} = \mathbf{D}_\tau^m$, $G = G_\tau$, $\nu = \nu_\tau$ ($\tau = 1, \dots, \Pi$)。

在多尺度并行拓扑优化阶段, 相邻区域中的不同微结构可能无法很好地连接。微结构之间的连接性差会导致微结构无法按照均质化理论所预期的方式准确传递载荷。在作者之前的研究^[68] 中, 可通过设计合并算法来确保优化中的连接性, 在该阶段可以参考所提出的合并算法对微结构进行连接。值得注意的是, 在处理连通问题的过程中, 该操作仅影响两个相邻子区域之间的微单元, 不涉及子域内部, 因此只需使用方程 (3.8) 来优化相关的多尺度设计变量, 从而避免无效计算。通过并行拓扑优化这两个过程, 我们可以获得宏观结构中微结构的最佳分布, 而宏观结构可以表现出出色的力学性能。为了验证所提方法的实用性, 这里针对任意区域的悬臂梁结构的多尺度优化问题进行探究。假定材料参数为 $E = 1$ 和 $\nu = 0.3$ 。其他参数选择为 $\epsilon^M = \epsilon^m = \epsilon = 5/(2\sqrt{2}\tanh^{-1}(0.9))$, $\Delta t^M = \Delta t^m = \Delta t = 0.01$ 。宏观设计变量的容差表

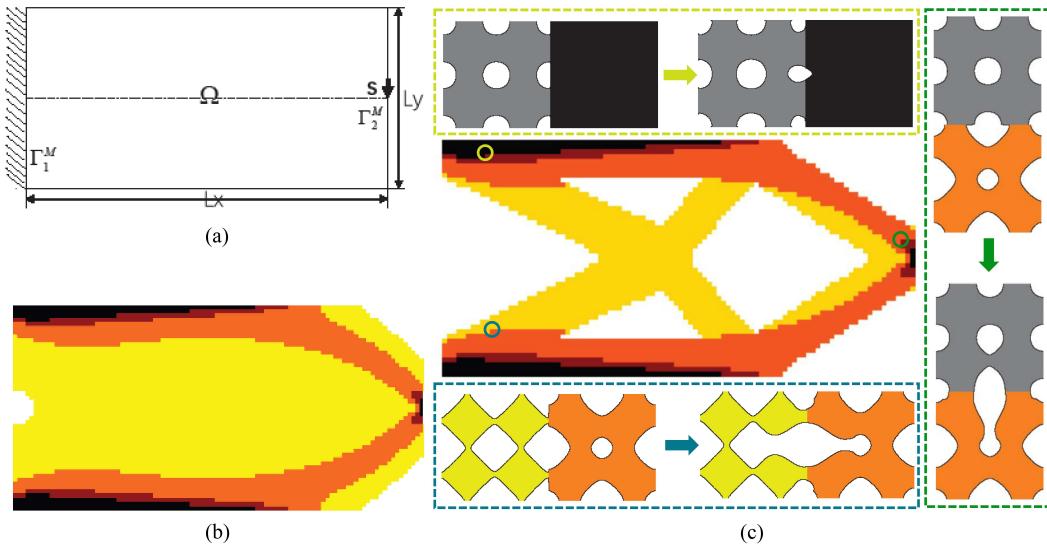


图8 多尺度拓扑优化框架流程图. (a) 悬臂梁结构设计域以及场景设定. (b) 连续可变厚度的规范域. (c) 根据所提出的并行拓扑优化算法设计的多尺度悬臂梁结构. 其中的子图分别是不同孔隙率微观单元结构之间的连通变化情况

示为 $\phi_{tol}^M = 0.01$, 微观设计变量的容差表示为 $\phi_{tol}^m = 0.001$. 假定该问题的计算区域为图 8(a) 所示, 在该区域右端中心处施加向下的载荷. 为了不使应力集中, 并且将相应的载荷分散出去, 首先使用正则化机制^[56] 来获取每个子域中的正则化密度, 如图 8(b) 所示. 然后通过所提出的并行拓扑优化方法得到复合结构的最优拓扑形状, 如图 8(c) 所示. 图 8(c) 中还展示了宏观结构中微观结构优化前后对比效果. 从宏观结构中选取了三个不同区域材料之间的微观结构, 更清楚的展示了在优化过程中微观结构的连通性变化. 此外, 通过对采用宏微观并行拓扑优化方法与采用单尺度拓扑优化方法所得到的优化结构的性能, 我们发现对于图 8(c) 中的这种情况, 宏观结构的刚度增加了 17%, 这证明了所提方法确实可以有效的解决多尺度拓扑结构优化问题并且获得了良好的力学特性.

3.1.2. 多材料拓扑优化建模与应用

假定上述不同子域表示不同材料, 优化设计结构中的不同材料分布, 考虑不同材料之间的应力应变性能, 是多材料拓扑优化中需要解决的关键问题. 在多材料拓扑优化方法中, 将描述各种材料的变量表示为单个变量^[10], 借助 SIMP 方法来刻画整个结构的力学性质. 多材料拓扑优化问题主要面临如下挑战: (1) 不同材料之间的相互作用通常非常复杂. (2) 高昂的计算成本会限制优化问题的规模以及实际可行性. (3) 平衡所涉及的多个优化目标增加了求解的难度. (4) 鲁棒性不足导致优化算法陷入局部极小值. 基于以上挑战, 我们尝试结合 SIMP 方法和多相相场方法来处理多材料结构拓扑优化问题. Garcke 针对经典的 Ginzburg-Landau 能量进行自适应修正以解释弹性效应^[70], 推导出带有弹性的 CH 系统, 并为解的存在性和唯一性提供了理论支撑. 基于此理论, 我们构建了由经典 Ginzburg-Landau 能量, 弹性势能和一些约束条件构成的多相场弹性系统能量泛函^[71]. 为了简化计算, 令加载在弹性体上的所有外部力的总和为零, 并且考虑位移不随时间变化的静弹性力学问题. 各材料之间的力学性质可以用

以下线弹性模型来描述:

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \sigma^0(\mathbf{u}) = \mathbf{D}^0 : \mathcal{E}(\mathbf{u}), \nabla \cdot \sigma^0(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \text{in } \Omega. \quad (3.9)$$

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{0}, & \text{on } \Gamma_1 \subset \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \sigma^0(\mathbf{u}) = \mathbf{s}, & \text{on } \Gamma_2 \subset \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \sigma^0(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, & \text{on } \partial\Omega / (\Gamma_1 \cup \Gamma_2). \end{cases} \quad (3.10)$$

这里 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ 是一个有界的 Lipschitz 设计域, 其中 $(\Gamma_1 \cup \Gamma_2) \subseteq \partial\Omega$ 且 $(\Gamma_1 \cap \Gamma_2) = \emptyset$. 位移向量 \mathbf{u} 是一个状态变量, 不随时间的变化而变化. \mathcal{E} 代表应变张量, σ^0 代表柯西应力张量, \mathbf{s} 是加载在弹性体上的牵引力, \mathbf{D}^0 是四阶刚度张量, 反映了应力和应变之间的关系, 张量 \mathbf{D}^0 的每个分量可以记作:

$$\mathbf{D}_{ijmn}^0 = \frac{E}{1+\nu} \left(\delta_{im} \delta_{jn} + \frac{\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \delta_{mn} \right), \quad (3.11)$$

其中 E 和 ν 分别是弹性模量和泊松比, δ 是 Kronecker – δ 标记. 假设 Ω 被分成几个子区域, 其中包含空区域或不同种类的材料, 即 $\Omega = \bigcup \Omega_k, k = 1, \dots, N$. 特别地, 让 Ω_N 表示空白区域. 接下来, 我们引入相场函数来描述这些子域. 对于 $k = 1, \dots, N$,

$$\begin{cases} \phi_k(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \notin \Omega_k, \\ 0 < \phi_k(\mathbf{x}) < 1, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_k, \\ \phi_k(\mathbf{x}) = 1, & \mathbf{x} \in \Omega_k. \end{cases} \quad (3.12)$$

$\phi_k(\mathbf{x}) = 1$ 表示位置 \mathbf{x} 处的材料组分只包含第 k 种材料, $\phi_k(\mathbf{x}) = 0$ 表示 \mathbf{x} 处的材料组分不包含第 k 种材料. 为了简化, 我们定义向量 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)$ 表示 \mathbf{x} 处的材料组成, 并且假定所有材料具有相同的泊松比 ν . 此外, 我们还应该考虑扩散界面区域, 在这里是允许不同材料进行一定混合, 即 $0 < \phi_k < 1$. 但是, 在整个计算域 Ω 上, 应满足以下约束:

$$\sum_{k=1}^N \phi_k = 1, \quad 0 \leq \phi_k \leq 1, \quad k = 1, \dots, N. \quad (3.13)$$

我们定义符号 \mathbf{E} 为材料弹性模量, $\mathbf{E} = (E_1, E_2, \dots, E_N)$, 其中 $E_k (k = 1, 2, \dots, N)$ 是第 k 种材料的弹性模量, 定义符号 \mathbf{D}_k^0 为第 k 种材料的刚度张量, 扩散界面区域的刚度张量由 \mathbf{D}_k^0 的插值函数定义:

$$\mathbf{D}(\boldsymbol{\phi}) = \sum_{k=1}^N \phi_k^q \mathbf{D}_k^0. \quad (3.14)$$

这里 q 是一个惩罚因子, 我们选择 $q = 3$ 以确保解快速并准确地收敛到 0 和 1^[46]. 因此, 在 Ω 中的多相场系统的线弹性方程为:

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \quad \sigma(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{u}) = \mathbf{D}(\boldsymbol{\phi}) : \mathcal{E}(\mathbf{u}), \quad \nabla \cdot \sigma(\boldsymbol{\phi}, \mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

并采用相应的边界条件:

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{0}, & \text{on } \Gamma_1 \subset \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \sigma(\phi, \mathbf{u}) = \mathbf{s}, & \text{on } \Gamma_2 \subset \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \sigma(\phi, \mathbf{u}) = \mathbf{0}, & \text{on } \partial\Omega / (\Gamma_1 \cup \Gamma_2). \end{cases} \quad (3.16)$$

通过以多材料结构的最小柔度问题为目标建立相应的优化目标函数为

$$\mathcal{J}(\phi, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} W(\phi, \mathbf{u}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathcal{E}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\phi) : \mathcal{E}(\mathbf{u}) \, d\mathbf{x}, \quad (3.17)$$

其中材料密度函数始终满足约束方程 (3.13) 以及体积约束 $\int_{\Omega} \phi_k \, d\mathbf{x} = V_k^0$, 这里 $\sum_{k=1}^N V_k^0 = 1$, V_k^0 是 ϕ_k 的体积约束. 因此关于相 ϕ_k 的拓扑灵敏度可通过梯度流方法定义如下:

$$\frac{\partial \mathcal{J}(\phi, \mathbf{u})}{\partial \phi_k} = \int_{\Omega} \frac{\partial W(\phi, \mathbf{u})}{\partial \phi_k} \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathcal{E}(\mathbf{u}) : \left(\mathbf{q} \phi_k^{\mathbf{q}-1} \mathbf{D}_k^0 \right) : \mathcal{E}(\mathbf{u}) \, d\mathbf{x}. \quad (3.18)$$

在基于相场的多材料拓扑优化中, 我们采用一阶优化方法来寻找最佳布局. 目标函数 \mathcal{J} 将被转化为多相场弹性系统的能量函数. 相应地, ϕ 的最佳布局将被转化为某些偏微分方程的解. 接下来对基于相场的多材料拓扑优化模型进行说明. 首先构造一个修正后的能量函数, 包括原始目标函数 \mathcal{J} 及其约束:

$$\begin{aligned} E(\phi, \mathbf{u}) = & \sum_{k=1}^N \int_{\Omega} \left(F(\phi_k) + \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi_k|^2 \right) d\mathbf{x} + \eta \left(\int_{\Omega} W(\phi, \mathbf{u}) d\mathbf{x} - \int_{\Gamma_2} \mathbf{s} \cdot \mathbf{u} d\tau \right) \\ & + \frac{\beta}{2} \sum_{k=1}^N \left(\int_{\Omega} \phi_k \, d\mathbf{x} - V_k^0 \right)^2 + \frac{\alpha}{2} \left(\sum_{k=1}^N \phi_k - 1 \right)^2 + \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} |\min(0, \phi_k)|^2 \, d\mathbf{x} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\max(0, \phi_k - 1)|^2 \, d\mathbf{x} \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

这里 N 阵势能表示为 $\sum_{k=1}^N F(\phi_k) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{4} \phi_k^2 (1 - \phi_k)^2$. 扩散界面的厚度满足 $\epsilon \ll 1$, 其余参数 η , β 和 α 都是非负数. 此处采用 Moreau-Yosida 正则化方法^[72] 来控制设计变量的值范围.

然后考虑在 L^2 空间中通过梯度变分的方式推导相应的控制方程. 对于 $k = 1, \dots, N$, 有如下控制方程:

$$\frac{d\phi_k}{dt} = -F'(\phi_k) + \epsilon^2 \Delta \phi_k - \eta \omega(\phi_k, \mathbf{u}) - \beta \left(A(\phi_k) - V_k^0 \right) - \alpha \left(\sum_{i=1}^N \phi_i - 1 \right) - \Upsilon(\phi_k). \quad (3.20)$$

这里, $\omega(\phi_k, \mathbf{u}) = \partial W(\phi, \mathbf{u}) / \partial \phi_k$, $A(\phi_k) = \int_{\Omega_k} \phi_k \, d\mathbf{x}$, $\Upsilon(\phi_k) = \min(0, \phi_k) + \max(0, \phi_k - 1)$. 方程 (3.20) 中的状态变量 \mathbf{u} 仍满足方程 (3.15) 和 (3.16). 为了验证所提出的多材料拓扑优化算法的鲁棒性, 将根据真实 CT 数据采用章节 2.2 中的切片数据重构方法重构出来的人体髌骨模型, 并耦合上章节 §3.1.1 中的多尺度拓扑优化方法, 通过应用 Schwarz-P 类型的 TPMS 单元结构, 为人体髌骨设计了孔隙率梯度变化的多尺度自适应支撑结构, 结果如图 9 所示. 在该示意图中, 不同颜色区域代表使用了不同尺寸和孔隙率的单元结构. 黑框中所示的内容是该多孔支撑结构的放大图像. 从图中可以看出, 非均匀孔隙率和孔径尺寸可以局部控制人工骨骼的渗透率和刚度以满足实际需求. 这一创新方法充分考虑了天然骨骼的结构特点, 为人工骨骼的设计提供了可行的解决方案, 不仅满足了材料连通性的要求, 还保证了整体结构的机械性能.

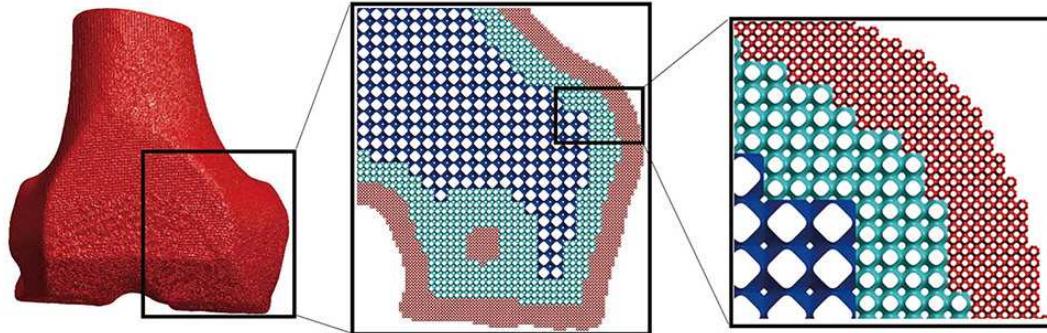


图 9 人体髌骨模型中轻量化复合结构的自适应设计. 考虑特定区域要求, 通过多材料拓扑优化算法划分模型中不同区域. 考虑人体骨骼中致密度分布特点, 利用多尺度拓扑优化方法进行自适应孔隙率调整和支撑结构设计

3.2. 流 - 固 - 热耦合的拓扑优化研究

热流体拓扑优化是在热力学约束下对流体拓扑优化问题的研究, 广泛应用于燃气轮机生产, 散热器制造和 3D 打印等热工应用领域^[73]. 关于热流体拓扑优化的问题分类如下: 动量方程的流体运动问题^[74], 热传导与对流问题^[75], 以及涉及两者耦合的问题. 早期的工作由 Borrvall 和 Petersson^[77] 引入了带有边缘惩罚项的目标能量函数, 通过最小化流体的耗散能得到优化形状. 热流体拓扑优化在研究复合材料结构设计中发挥着关键作用, 为各种具体应用提供了创新型解决方案^[76]. 其主要目的是解决目标泛函在不可压缩 Stokes 方程和对流热传导方程的约束下寻找最小值的问题. 假设设计域为一个固定的 Lipschitz 域 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^m (m = 2, 3)$. 设 $\partial\Omega$ 为其边界, Ω 的外法向量为 \mathbf{n} . 引入 $\phi \in L^1(\Omega)$ 作为 Ω 中的有界变差的特征函数, 使用 $V(\Omega, \{0, 1\})$ 表示 Ω 中的有界变差函数空间, 具体为 $\phi = 1 (\mathbf{x} \in \Omega_f)$ 和 $\phi = 0 (\mathbf{x} \in \Omega_s)$. 引入 $\phi := \chi_E \in V(\Omega, \{0, 1\})$ 的 Caccioppoli 集合 $E \subset \Omega$, 使用 $\Omega_f := \{\phi = 1\}$ 来定义流体子域. 此外, 将实体子域表示为 $\Omega_s = \Omega \setminus \Omega_f$. 形状优化的原始模型可以定义为以下函数的最小化:

$$\min_{\Omega} J_{\text{ori}} (\mathbf{u}, T) = \int_{\Omega_f} \left(\frac{\mu}{2} |\nabla \mathbf{u}|^2 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{2} T^2 d\mathbf{x} + \gamma \Gamma(\Omega_f), \quad (3.21)$$

$$\begin{cases} \nabla p - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{f} & \text{in } \Omega_f, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{in } \Omega_f, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla p = 0 & \text{on } \partial\Omega_f, \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{in } \Omega_s, \\ \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega_f, \\ \mathbf{u} = \mathbf{g} & \text{on } \partial\Omega_s, \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\begin{cases} \rho C_p T_t = \nabla \cdot (K \nabla T) - \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T & \text{in } \Omega, \\ \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.23)$$

流体拓扑优化方程 (3.21) 的目标泛函由以下部分组成: 第一项为 Stokes 流的柔度能量, 其中 μ 为流体的黏度场, \mathbf{u} 为速度场, \mathbf{f} 为作用于整个 Ω 的外力. 第二项是热能, T 是温度场. 最后一项是周长的惩罚项, 其中 γ 是正的惩罚参数, $\Gamma(\Omega_f)$ 是 Ω_f 的周长. 约束条件中各符号含义

如下: p 为流体的压力场. K , C_p 和 ρ 分别是导热系数, 流体的热容量和密度. 在该优化问题中, 速度场定义在整个 Ω 上, 但是需要分区域进行约束, 即在 Ω_f 上, 速度场受 Stokes 方程的约束, 在 Ω_s 上, 令 $\mathbf{u} = \mathbf{0}$. 但这种区域优化问题在求解上难度大, 并且可能存在多个局部最优解. 基于优化算法找到全局最优解难度大. 为了避免这种情况, 我们将非流体区域看成渗透率较小的多孔介质^[77], 这种假设意味着可以将流体计算区域 Ω_f 扩展到整个计算区域 Ω . 固体区域(或低渗透率流体)与流体区域之间的尖锐界面被扩散界面取代. 基于上述假设, 我们考虑在 $H^1(\Omega)$ 空间中进行结构优化, 并用相场变量 ϕ 来区分结构优化区域或流体区域. 我们取不同的值分别表示流体域 ($\phi = 1$) 和固体域 ($\phi = 0$). 流体和固体之间的扩散界面用 $|\phi| \leq 1$ 表示. 因为 Ginzburg-Landau 能量是周长泛函的近似^[78], 因此, 可以使用 Ginzburg-Landau 能量^[79] 替换原目标泛函 (3.21) 中的周长约束 $\gamma\Gamma(\Omega_f)$,

$$\gamma E(\phi) = \gamma \int_{\Omega} \left(\frac{\epsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\epsilon} F(\phi) \right) d\mathbf{x}. \quad (3.24)$$

式中, $F(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2/4$ 为双阱势函数. γ 被认为是近似替换的加权参数, 迫使等式 (3.24) 随着 $\epsilon \rightarrow 0$ 收敛, 其中 ϵ 与界面厚度成正比. 由于使用了多孔介质代替固体域, 可将渗透率 $\alpha_\epsilon(\phi) : [0, 1] \rightarrow [0, \tilde{\alpha}_\epsilon]$ 定义为关于 ϕ 的光滑函数, 因此可将 Stokes 流转化为 Darcy 流:

$$\alpha_\epsilon(\phi)\mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) = \mathbf{u}. \quad (3.25)$$

式中, $\alpha_\epsilon(\phi)$ 是递减的, 满射和连续的. 其中 $(\tilde{\alpha}_\epsilon)^{-1}$ 是渗透率, 满足 $\tilde{\alpha}_\epsilon \geq 0$. 考虑到多孔介质系统的平滑性和均匀性, 可以推出 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\alpha}_\epsilon < \infty$ 和 $\tilde{\alpha}_\epsilon = o(\epsilon^{-\frac{2}{3}})$. 基于此, 在原始能量上添加一个惩罚项 $\int_{\Omega} \alpha_\epsilon(\phi)|\mathbf{u}|^2/2 d\mathbf{x}$, 使得 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbf{u} = \mathbf{0}$. 此外, 在修正的目标函数中考虑了体积约束来限制流通量. 这里用 $V(\phi) := \int_{\Omega} \phi d\mathbf{x}$ 表示流体区域的体积, 并将惩罚项 $\beta(V(\phi) - V_0)^2/2$ 添加到修改的目标函数中, 其中 V_0 是所需的体积. β 是一个正参数, 它限制了体积约束的影响, 可以根据实际应用选择相应的参数. 修正后的目标函数可以总结为:

$$\begin{aligned} \min_{\Omega} J(\phi, \mathbf{u}, T) = & \int_{\Omega} \left(\frac{\mu}{2} |\nabla \mathbf{u}|^2 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \right) d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Omega} \left(\frac{\epsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\epsilon} F(\phi) \right) d\mathbf{x} \\ & + \int_{\Omega} \frac{\alpha(\phi)}{2} |\mathbf{u}|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{2} T^2 d\mathbf{x} + \frac{\beta}{2} \left(\int_{\Omega} \phi d\mathbf{x} - V_0 \right)^2, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{cases} \nabla p - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \alpha_\epsilon(\phi)\mathbf{u} = \mathbf{f} & \text{in } \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{in } \Omega, \\ \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla p = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.27)$$

$$\begin{cases} \rho C_p T_t - \nabla \cdot (K \nabla T) + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = 0 & \text{in } \Omega, \\ \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.28)$$

采用该替代模型的优势可以总结如下: (1) 当使用多孔介质代替固体区域时, 不用再计算时区分固 - 液区域, 将原问题从分区域流固耦合优化问题转化为全局两相流体的约束优化问题. (ii) 与相场函数相关的参数 μ , K , ρ , C_p , 可以按照如下方式进行更新:

$$\begin{aligned} \mu(\phi) &= \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1)\phi, \quad K(\phi) = K_1 + (K_2 - K_1)\phi, \\ \rho(\phi) &= \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)\phi, \quad C_p(\phi) = C_1 + (C_2 - C_1)\phi. \end{aligned} \quad (3.29)$$

式中 μ_i, K_i, ρ_i, C_i ($i=1,2$) 分别表示两相的恒定黏度, 导热系数, 密度和热容量。另外, 为了简化计算, 假设 μ_i, K_i, ρ_i 和 C_i 都与温度无关。在变分微分的基础上, 采用梯度流方法。相场函数 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 的演化受以下约束:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta J}{\delta \phi} = -\frac{\gamma}{\epsilon} F'(\phi) + \gamma \epsilon \Delta \phi - \frac{\alpha'_\epsilon(\phi)}{2} |\mathbf{u}|^2 - \beta (V(\phi) - V_0). \quad (3.30)$$

通过针对上述模型进行计算, 我们可以针对任意形状的热流管道进行拓扑优化设计。为了说明我们算法的高效性和鲁棒性, 我们在图 10 中展示了三维扩散器的拓扑优化过程。在入流边界上选择一条流型, 圆心为 $(0, 5, 5)$ 。圆的半径是 2。选择出流边界上以圆心为 $(10, 2.5, 2.5), (10, 7.5, 2.5), (10, 2.5, 7.5)$ 和 $(10, 7.5, 7.5)$ 的四个流型。所有圆的半径都等于 1。图 10(a) 展示了归一化的原始能量非增, 曲线旁边的插图为优化结构在指定时间 $t = 0, 3, 6$ 和 10 的切片 ($x = 5, y = 5, z = 5$)。原始能量在 $t = 5$ 处达到稳定状态, 这也证实了所提方案是稳定的。从图 10(b) 中可以看出三维管道从初始形状到最优形状的转变过程。在图 10(c) 展示了多模态二维热流拓扑优化的结果。

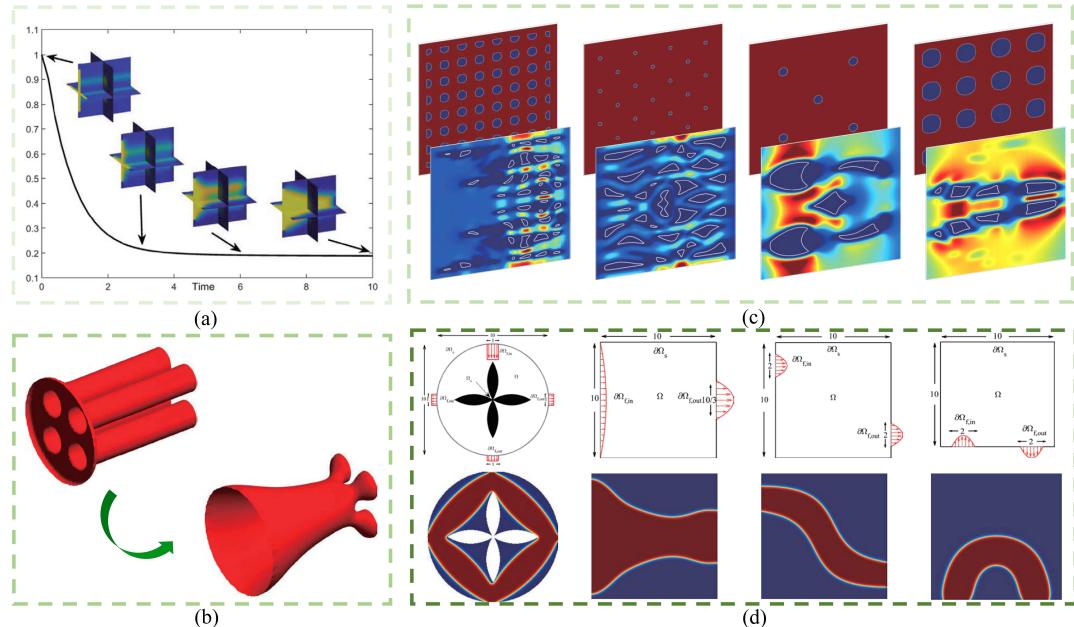


图 10 热流驱动的拓扑优化示意图。(a) 三维热流管道演化过程中能量随时间递减, 旁边的子图为某时刻对应的切片结果 ($x = 5, y = 5, z = 5$), 包括 $t = 0, 3, 6$ 和 10 时刻。在该演化图中, 原始能量已经进行了归一化处理。(b) 三维热流管道拓扑优化结果。(c) 多模态二维热流拓扑优化结果。第一行是初始模态, 第二行是基于初始模态进行热流拓扑优化后的最佳散热模态。彩色背景是温度分布云图。(d) 经典二维热流管道拓扑优化边界条件以及优化形状展示。从左至右, 分别是复杂区域管道优化, 扩散管道优化, 弯曲管道优化, 以及动脉旁路管道优化。

第一行是初始模态, 第二行是基于初始模态进行拓扑优化实现的最佳散热模态。底板的颜色代表的是流动引起的全区域中的热量分布。在图 10(d) 中展示的是经典二维热流管道拓

扑优化问题以及相应的优化形状展示, 从左至右展示的分别是复杂区域管道优化, 扩散管道优化, 弯曲管道优化, 以及动脉旁路管道优化. 从这些结果中可以看出, 优化后的结构是光滑的, 表明该方法能够很好地解决热流拓扑优化问题.

3.2.1. 基于 TPMS 的热交换器形状设计与优化

明确通道形状相之于传热的影响对散热器通道结构设计和优化至关重要^[80]. 拓扑优化方法能够利用传热^[81], 外部负载^[82], 形状变化^[83] 和流体流动^[95] 的特性来自适应设计通道形状, 以最大程度地提高散热效果, 增大流体通量并降低压强^[84]. 随着拓扑优化技术的迅速发展, 采用优化方法设计换热器结构的研究也应运而生. Wu 等人^[85] 建立了针对径向多孔结构的热流通道的优化模型, 通过增加接触表面积来提高换热能力. 为了最小化集成系统中的热阻并且最大化冷却区域的热防护, Soprani 等^[86] 提出了一种具有特定设计约束的热电模块集成拓扑优化方法. Ozdemir 等人的研究^[87] 表明, 与简单的立方堆积结构相比, TPMS 的多孔结构具有更高的传热传质性能和更低的流动阻力. 基于 TPMS 结构的通道形状拓扑优化研究目前仍处于起步阶段, 主要集中在研究基础设施特征. Modrek 等人^[88] 提出了一种基于固体各向同性惩罚法的多目标拓扑优化系统, 对热目标函数和结构目标函数进行优化, 得到了散热性能好, 结构完整性好的优化结构. 虽然优化后的结构具有更好的导热性, 但他们并未详细讨论结构差异对传热和刚度的影响. Al-ketan 等^[89] 建立了基于 TPMS 结构的均匀散热器和拓扑形状变化的散热器的三维流体动力学模型, 比较了它们在对流问题中的散热能力. 他们还考虑了结构孔隙度的梯度变化, 为基于 TPMS 结构的热流拓扑优化提供了新的方向.

作者在章节 2.4 中建立了以 TPMS 结构为初始形态的修正的 Allen-Cahn 模型

$$\phi_t = |\nabla \phi|(\kappa(\phi) - \lambda) = -\frac{F'(\phi)}{\epsilon^2} + \Delta \phi - \lambda \frac{\phi(1-\phi)}{\sqrt{2}\epsilon}, \quad (3.31)$$

式中, $\kappa(\phi)$ 是平均曲率, λ 是平均曲率的平均值. 此外, 还在方程中引入了一项 Lagrange 惩罚项^[90, 91], 以迫使优化后的相场满足 $\kappa = \lambda$, 从而不发生剧烈的拓扑变化:

$$\mathcal{L}(\phi) = \int_{\Omega} \frac{\beta}{2} (\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}, \quad (3.32)$$

式中, β 是一个取值为正的 Lagrange 乘子, $\psi(\mathbf{x})$ 是基于 TPMS 的参考结构. 需要说明的是 $\psi \in \{0, 1\}$ 不是时间相关的, 并且作为各种 TPMS 结构的组合在初始状态时给定. 通道的内部设置为 $\{\mathbf{x} : \psi(\mathbf{x}) = 1\}$, 通道的外部设置为 $\{\mathbf{x} : \psi(\mathbf{x}) = 0\}$. 因此, 基于 TPMS 的对流传热和复合材料设计的拓扑优化问题可以转化为优化如下方程^[92]:

$$\begin{aligned} \min_{\Omega} \mathcal{J}_{\text{mod}}(\phi, \mathbf{u}, T) = & \int_{\Omega} \left(\frac{\eta(T)}{2} |\nabla \mathbf{u}|^2 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\alpha_{\epsilon}(\phi)}{2} |\mathbf{u}|^2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{k(T)}{2} |T|^2 d\mathbf{x} \\ & + \gamma \int_{\Omega} \left(\frac{F(\phi)}{\epsilon^2} + \frac{|\nabla \phi|^2}{2} + \lambda \frac{g(\phi)}{\sqrt{2}\epsilon} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\beta}{2} (\psi - \phi)^2 d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

相应的约束条件为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\gamma \left(\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\epsilon^2} - \Delta \phi(\mathbf{x}, t) + \lambda \frac{\phi(1 - \phi)}{\sqrt{2}\epsilon} \right) \\ &\quad + \beta (\psi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{x}, t)) - \frac{\alpha'_\epsilon(\phi)}{2} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2, \end{aligned} \quad (3.34a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot (\eta(T) \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) - \alpha_\epsilon(\phi) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (3.34b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (3.34c)$$

$$\frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla T(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot (k(T) \nabla T(\mathbf{x}, t)). \quad (3.34d)$$

为了考虑温度梯度对动量和热传导的影响, 我们根据 Sutherland 定律, 假设粘度和导热系数都与温度有关, 其求解形式如下:

$$\eta(T) = \eta_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{T_0 + 110.4}{T + 110.4}, \quad k(T) = \frac{\eta(T)\omega}{(\omega - 1)Pr}, \quad (3.35)$$

式中 η_0 为动态粘度常数, T_0 为环境温度, ω 为绝热指数, Pr 为 Prandtl 常量.

为了验证所提出的方法的通用性和鲁棒性, 我们首先采用两种类型的 TPMS 结构进行通道优化. 对于相场函数 ϕ , 速度场 \mathbf{u} , 压力场 p 和温度场 T , 采用垂直于流动方向的 Neuman 边界条件. 其入口和出口的通道采用 Dirichlet 边界条件. 如图 11(a) 所示, 考虑两个相邻的立方体和共享公共边缘的周期性 TPMS 结构, 并以连续和平滑的方式无缝集成 Schwarz-P 结构和 Schwarz-G 结构. 通过使用所提方法, 可以得到光滑的优化结构, 除此之外, 所提方法在 Stokes 方程的影响下平滑了流体通道界面, 避免了尖锐的角落和粗糙的表面. 为了演示复合结构中的流通性, 我们绘制了速度流线图, 如图 11(a) 中的第三张子图所示. 流线的数量表示流体动力学中的通量, 而流线的颜色特征则表达了热值. 从结果中可以看出, 流体从入口直接穿过 Schwarz-P 结构, 在 Schwarz-G 结构中形成了涡流, 减缓了流体流动并促进了热通量的扩散. 通过这些数值结果得出以下结论:(i) 与入口处的流速相比, 出口处的流速显著降低, 因为在 G 结构中出现了涡流和碰撞. (ii) 根据所提方法设计的通道确实是连通的, 可以保证流体流量的守恒. (iii) 所提出的方法是通用的, 不受 TPMS 结构类型的限制. 另外, 我们也尝试用基于 D 结构的基础单元设计大规模热流管道, 如图 11(b) 所示. 为了验证我们所提出的模型在多种复合场景下的适用性, 我们在二维场景下进行多种类型 TPMS 基础单元结构的散热流道设计, 如图 11(c), 从左至右面向的设计场景分别是多尺寸结构, 多类型结构, 多孔隙率结构. 从优化结果中可以看出我们的算法针对复杂场景可以进行自适应调整和优化. 除此之外, 我们针对不同尺寸的 TPMS 结构进行详细对比, 如图 11(d) 所示, 我们展示了多尺度三维散热管道机构优化设计结果, 第一行是不同尺寸 Schwarz-P 单元结构的优化管道对比效果, 第二行是不同尺寸 Schwarz-D 单元结构的优化管道对比效果. 通过对比结果可以看出, 改变基础结构单元尺寸并进行自适应优化设计, 可以提升流道的散热效果.

3.2.2. 传输网络结构设计的建模与计算

高效而稳健的网络结构在工业系统中扮演着至关重要的角色, 特别是在多种运输介质的传递中, 例如信号^[93], 营养物质^[94] 和流体^[95]. 这种网络结构对于协调大规模系统中多个任务具有重要意义. 在依赖多细胞尺度系统的生物体中, 生物运输网络对于连接不同器官或组

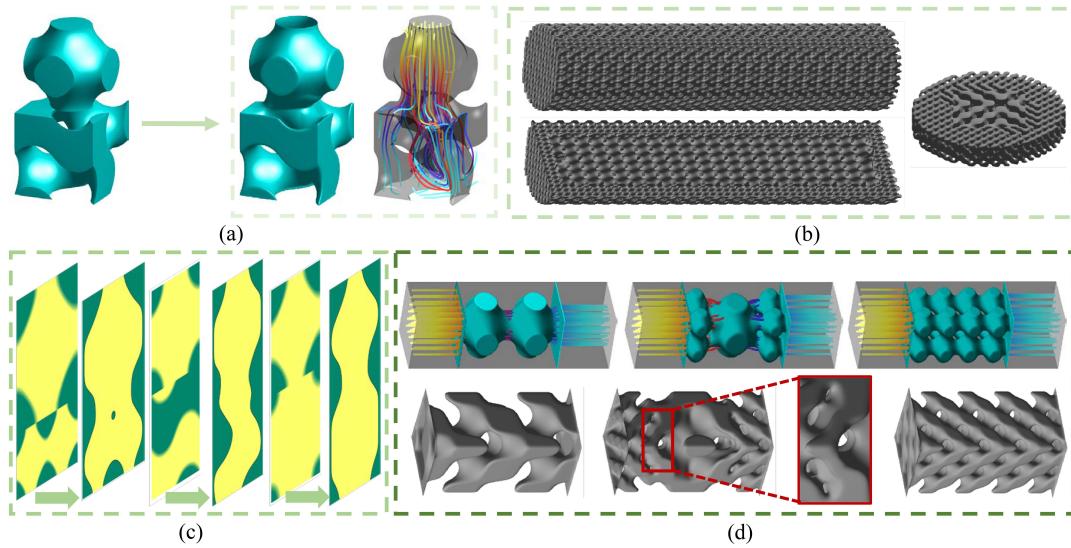


图11 基于TPMS基础单元结构的复杂管道拓扑优化设计. (a) Schwarz-P结构与Schwarz-G结构复合进行复杂流道设计. 从左至右分别是参考结构, 优化结构和优化通道内的流速流线效果展示. (b) 基于D基础单元结构的大规模热流管道设计效果. (c) 二维场景下多种TPMS复合场景的散热流道设计. (d) 多尺度三维散热管道结构优化设计

组织至关重要, 例如在血管网络中, 通过分支网络输送血液, 携带能量和营养物质, 并通过分枝网络移除代谢产物^[96]. 生物系统通常具有复杂的树状分层结构, 通过这种结构可以为系统减少血流耗散^[97]. 循环冗余的树状结构提供了对防止损坏或减少波动的稳健性^[98]. 通过对生物传输网络进行设计和建模计算, 有助于应用在各种仿生设计当中, 可以将其应用与3D打印领域, 设计出更高效、更复杂的输送网络结构, 用于打印生物组织工程^[99]. 通过采用生物相容性材料, 例如生物陶瓷, 生物降解物, 生物凝胶剂等, 可以制造出具有适当力学性能和生物活性的人工关节, 牙齿种植体等器官. 生物传输网络往往具有复杂的微观结构, 如多级分支、多孔结构, 通过计算模拟和优化设计, 可以在3D打印领域中实现这些复杂的微细结构, 提高打印件的功能性. 除此之外, 通过对生物传输网络的计算模拟, 可以进行各种条件下的仿真测试, 评估相关设计在不同环境下的输送效率、稳定性和可靠性, 有助于提高生物打印件的性能. Hu和Cai^[100]提出了一种驱动生物运输网络形成的优化原则, 考虑了物质和代谢消耗与运输能量成本之间的竞争关系. 让我们从原始能量泛函出发 \mathcal{E}_M :

$$\mathcal{E}_M = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(K|\nabla \mathbf{m}|^2 + \frac{\alpha}{\gamma} |\mathbf{m}|^{2\gamma} + C|\mathbf{m} \cdot \nabla p|^2 + Cr|\nabla p|^2 \right) dx \quad (3.36)$$

其中第一项 $K|\nabla \mathbf{m}|^2$ 是负责主动传输的熵成本, 第二项 $\alpha|\mathbf{m}|^{2\gamma}/\gamma$ 代表维持主动传输或构建传输网络边缘的材料和代谢能量成本, 最后一项 $(C|\mathbf{m} \cdot \nabla p|^2 + Cr|\nabla p|^2)$ 是所有不同状态的波动通量的平均能量成本. 这里我们将电导率向量表示为 $\mathbf{m}(t, \mathbf{x}) \in \Omega$, 其中计算域 Ω 是一个有界域, $\partial\Omega$ 为其光滑边界. 向量 \mathbf{m} 的方向表示主动传输的方向, 振幅 $|\mathbf{m}|$ 代表传输强度. 变量 $p(\mathbf{x}, t)$ 为激素流动产生的压力, $K \geq 0$ 为扩散系数, $C \geq 0$ 为驱动网络适应的激活参数, $\alpha \geq 0$ 为代谢常数, 根据 Murray定律^[101] 假设 $\gamma \in [1/2, 1]$ 为生物有机体的代谢率. 该模型通过耦合激素传输和适应过程来促进传输管道的形状优化^[102].

基于广义 Onsager 原理^[103] 以及针对叶脉分布进行分析^[104], 我们通过梯度变分原理提出了相应的反应扩散模型, 它自然地集中了生长素梯度特性, 为该传输网络提供足够信息以确定其生成过程. 通过引入 Ginzburg-Landau 能量到原始能量函数中, 综合考量了生长素的梯度属性, 我们将原始的控制方程修正为基于相场方法的能量耗散传输网络模型. 如下为 Ginzburg-Landau 能量:

$$\mathcal{E}_\phi = \int_{\Omega} \left(\frac{F(\phi)}{\epsilon^2} + \frac{|\nabla\phi|^2}{2} \right) d\mathbf{x}, \quad (3.37)$$

其中 $F(\phi) = 0.25\phi^2(1-\phi)^2$, 参数 $\epsilon > 0$ 是叶脉和养分之间的超表面的有限层厚. 相场函数 ϕ 在 $[0, 1]$ 范围内取值, 而不仅仅是 0 或 1. 为了确保由养分流动形成的拓扑形状可以在电导率的指导下得以表征, 我们将针对能量函数添加对流项: $\mathcal{E}_C = \int_{\Omega} |\mathbf{m} \cdot \nabla\phi|^2 / 2 d\mathbf{x}$. 通过将代谢成本能量与 Ginzburg-Landau 能量结合, 我们可以得到如下修正后的总能量:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_N &= \mathcal{E}_M + \mathcal{E}_\phi + \mathcal{E}_C \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(K|\nabla\mathbf{m}|^2 + \frac{\alpha}{\gamma}|\mathbf{m}|^{2\gamma} + C|\mathbf{m} \cdot \nabla p|^2 + Cr|\nabla p|^2 \right) d\mathbf{x} \\ &\quad + \beta \int_{\Omega} \left(\frac{F(\phi)}{\epsilon^2} + \frac{|\nabla\phi|^2}{2} \right) d\mathbf{x} + \zeta \int_{\Omega} \frac{|\mathbf{m} \cdot \nabla\phi|^2}{2} d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

式中 β 为一个正的惩罚参数, $\zeta > 0$ 用来控制对电导率的对流效应. 通过对能量方程 (3.38) 进行梯度变分, 可以推导出修正的 AC 类型的方程:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = -\beta \left(\frac{F'(\phi(\mathbf{x}, t))}{\epsilon^2} - \Delta\phi(\mathbf{x}, t) \right) + \zeta \nabla \cdot \left((\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) \otimes \mathbf{m}(\mathbf{x}, t)) \nabla\phi(\mathbf{x}, t) \right), \quad (3.39a)$$

$$-\nabla \cdot \left((r(\mathbf{x})\mathbf{I} + \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) \otimes \mathbf{m}(\mathbf{x}, t)) \nabla p(\mathbf{x}, t) \right) = S(\mathbf{x}), \quad (3.39b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= K\Delta\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) + C \left(\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla p(\mathbf{x}, t) \right) \nabla p(\mathbf{x}, t) \\ &\quad - \alpha |\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)|^{2(\gamma-1)} \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) + \zeta \left(\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}, t) \right) \nabla\phi(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.39c)$$

其中方程 (3.39b) 中 r 为渗透率, I 为单位矩阵, $S(\mathbf{x})$ 为组织中产生的激素源分布. 需要说明的是, 在方程 (3.38) 中引入的能量成本函数直接抑制了垂直于相界面的输运. 此外, 所提出的能量成本函数有助于稳定不同相 (脉络相和组织相) 之间的边界, 并提高数值方法的稳定性. 为了验证所提出的模型依然满足能量递减定律, 图 12(a) 展示了能量 $\mathcal{E}_d(\phi^n)/\mathcal{E}_d(\phi^0)$ 随时间进行演变的结果, 该过程一直持续到 $T = 100$. 其中展示的子图显示了指定时间 $t = 0, 12.5, 25, 50$ 和 100 时的相场形态. 修正后的总能量已通过初始能量进行了归一化. 图 12(a) 中的结果表明, 离散总能量无条件递减. 从生成过程的演变中可以看出, 在电导率扩散的影响下, 叶片形状在营养液对流状态下形成. 从树干中长出了类似树枝的生物网络, 从树干形成了分支, 并且在分支之间的组织上出现了剥蚀. 值得注意的是, 图 12(a) 中的子图展示了生物网络的稳态结果, 在不同演化时刻保持了该结构. 图 12(b), (c) 和 (d) 绘制了相关物理量的轮廓图, 展示了不同物理量的 L_2 范数, 例如导电向量 \mathbf{m} , 以 \log 为底的流体速度 \mathbf{v} 和压力梯度 ∇p . 在控制方程中引入耦合项 $(\mathbf{m} \cdot \nabla\phi)\nabla\phi$, 有助于稳定静脉相与组织相之间的边界, 并提高数值方法的稳定性. 从图 12(b) 可以看出, 随着营养液的流动, 叶脉的生长逐渐形成树状结构. 通过观察图 12(c), 可以看到静脉相的速度值大于组织相的速度值, 这表明静脉相的速度受相界面上

渗透压的影响。如图12(d)所示,耦合项直接抑制了其在相界面法线方向上的传输,对内部传输的影响较小。

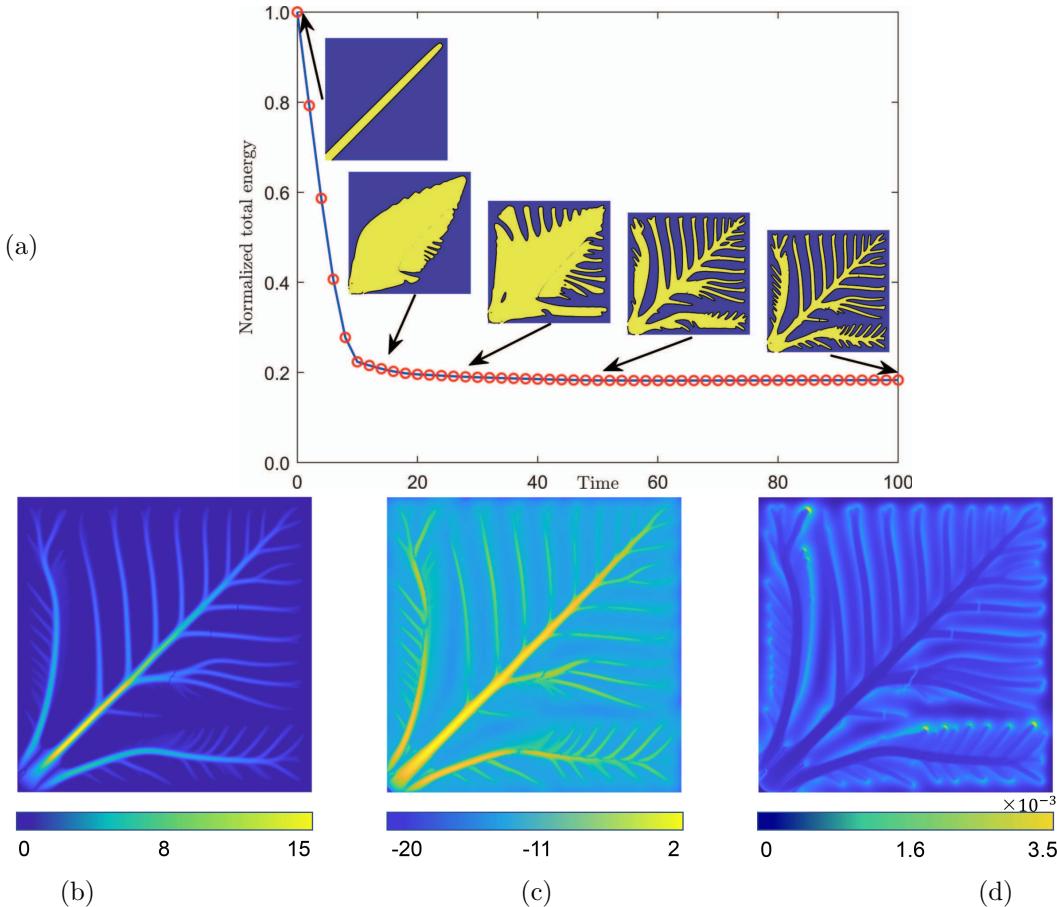


图12 传输网络结构优化设计。(a) 所提出的数值模型其能量随时间的演变曲线。子图显示了特定时刻 $t = 0, 12.5, 25, 50$ 和 100 相场 ϕ 在 L_2 空间中的形态。从 (b) 到 (d), 结果分别是导电向量 \mathbf{m} 的 L_2 范数, 流体速度 \mathbf{v} 的以 \log 为底的 L_2 范数, 以及压力梯度 ∇p 的 L_2 范数

4. 工艺仿真 (“仿真化”)

近年来,对3D打印过程进行数值模拟仿真已成为重要研究方向^[105]。3D打印具有高温,高压,耗材量大和高成本的特性,其对于轨道不均匀性,材料球化效应,轨间空隙等多种特性的准确预测仍然面临严峻挑战^[106]。除此之外,针对3D打印的数值计算需要设计高性能计算框架主要面向欧式空间的多物理场耦合计算^[107]、非欧空间的流形计算等多种计算难题^[108, 109]。Yan和Liu等人最近开展了一系列基于电子束和衬底相互作用的多尺度模型研究^[110]。Liu等人提出了基于粒子的选择性激光熔化AM方法,该方法将有限体积法和有限元方法相结合,成功克服了非连续性计算难题^[111]。在多个长度尺度和时间尺度上,Markl和Korner对粉末床融合过程进行了数值模拟^[13]。尽管这些方法在多尺度建模方面取得了显著进展,但为适应

真实的 AM 工艺参数设计, 建立相应的物理模型仍然面临诸多问题, 包括多种真实工艺参数与模型的耦合研究. 这项研究面临的挑战可以概括为:(i) 在 3D 打印过程中, 温度剧烈变化, 其空间和时间尺度远远大于相场的变化^[112]. (ii) 建立的模型需要平衡多个尺度之间的关系, 从而带来了巨大的计算负担^[113]. (iii) 模型参数与制造参数之间的有效关系直接影响模型的准确性, 以及是否能够对 AM 工艺进行准确预测和反馈^[114].

4.1. 基于熔融沉积技术的 3D 打印多尺度建模与仿真

熔融沉积技术是由高温驱动的熔化挤压 3D 打印工艺, 它提供了具有生产复杂几何零件能力的解决方案^[115]. 在打印制造之前, 通常需要采用专门的 3D 建模软件 (如 Blender、AutoCAD、SolidWorks 等) 来设计模型, 并使用切片软件 (如 Cura、Simplify3D 等) 将模型转换为适合打印的 G- 代码. 在 3D 打印中, G- 代码是一种常用的指令语言, 用于控制 3D 打印机执行各种操作. 它是一种机器语言, 用来描述打印机在三维空间内如何移动、旋转以及执行其他动作. 打印机喷嘴沿着 G- 代码设置的路径以给定的速度移动, 并将灯丝沉积在已经凝固的材料上. 凝固过程中存在各向异性结晶现象. 该技术因其工艺简单, 成本低, 材料多样 (金属, 陶瓷, 聚乳酸塑料等), 被应用在众多领域. Nasirov 等人^[116] 通过耦合压板理论 (laminate theory) 和渐近均质化方法 (asymptotic homogenization) 来探索热熔融工艺中定制细丝的粘性力学特性. Sanchez-Balanzar 等人^[117] 通过简化代表性体积单元模型, 提出了一种多尺度均质化方法用于生成纵横交叉的细丝结构. 然而, 目前还没有对热熔融沉积技术进行多尺度建模以及仿真的参考案例. 为了揭示 3D 打印过程中各种缺陷的形成机制, 刻画熔化, 热力学流动, 结晶, 凝固等一系列复杂的物理现象, 我们需要综合考虑各种物理特征建立多尺度的数学模型. 首先从 Lyapunov 能量泛函出发,

$$\mathcal{E}(\phi) = \int_{\Omega} \frac{|\nabla \phi|^2}{2} + \frac{F(\phi)}{\varepsilon^2} + \frac{1}{\varepsilon^2} \lambda \theta \left(\phi - \frac{2\phi^3}{3} + \frac{\phi^5}{5} \right) d\mathbf{x},$$

其中 $\phi(x, y, z, t) \in \Omega$ 表示密度场, $\Omega \subset \mathbb{R}^{\text{dim}}$, ($\text{dim} = 2, 3$) 是计算域. $F(\phi) = (\phi^2 - 1)^2 / 4$ 表示双阱势函数. 正参数 ε 与温度有关, 用于控制扩散界面的宽度. λ 是一个无量纲参数, 表示相场和导电温度场之间耦合的强度. θ 是无量纲温度, 为凝固提供热能并促进晶体生长. 通过对自由能施加变分导数, 可以得到如下泛函:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \phi} = \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon^2} (\phi - \lambda \theta (1 - \phi^2)) (1 - \phi^2).$$

考虑到 3D 打印过程是随着喷嘴的运动向系统中添加材料并通过热扩散逐渐冷却的过程, 相变方程与热量传递高度耦合, 因此建立如下宏观控制方程:

$$\varepsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta \phi + (\phi - \lambda \theta (1 - \phi^2)) (1 - \phi^2) + S, \quad (4.3a)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho C_p} \nabla T \right) + \frac{q(x, y, z, t)}{\rho C_p} = \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}_p \cdot \nabla T, \quad (4.3b)$$

其中 $\phi = 1$ 和 $\phi = -1$ 分别为凝固系统的本体固相和熔融相. 这里 T 是物体上的瞬态温度, 其无量纲表达式为,

$$\theta = C_p(T - T_M)/L, \quad (4.4)$$

其中 T_M 为环境温度, L 为聚变潜热系数, C_p 为比热系数。由于热熔融技术涉及复杂的物理现象, 如高温下的熔化过程, 热扩散下的凝固过程和结晶下的化学反应, 我们使用晶体生长方程 (4.3a) 来重现 AM 过程中的物理现象。应该注意的是, 喷嘴以给定的速度按照标定好的 G-代码移动, 它可以控制挤出速率, 移动路径, 移动速度和位置。因此, 体积源可以被视为位于 \mathbf{x}_S 的一个具有恒定体积的球体。假设沉积的丝的标称直径 $D = \sqrt{4Q / (\mathbf{v}_s \pi)}$, 其中 Q 是进给速率, \mathbf{v}_s 是聚合物熔体离开喷嘴的速度。由于系统的热量主要来自于喷嘴在移动过程中挤出的灯丝所释放的, 我们需要在热扩散方程中引入对流项 $\mathbf{v}_p \cdot \nabla T$, 来考虑从喷嘴中抽出细丝所带来的影响, 其中 \mathbf{v}_p 是带有移动热源的打印机喷嘴的扫描速度。此外, 在方程 (4.3b) 中需要考虑热熔聚合物 q 对于系统的影响, 它可以定义为

$$q = \rho C_p T_{\text{inj}} S \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_S). \quad (4.5)$$

这里, T_{inj} 是由喷嘴吐丝引起的注射温度。这里考虑使用一个动态控制策略来描述喷嘴温度 T_{inj} 和移动速度 \mathbf{v}_p 之间的关系, 即,

$$[T_{\text{inj}}] = [\mathbf{v}_p] \frac{\partial T_{\text{inj}}}{\partial \mathbf{v}_p}, \quad (4.6)$$

其中 $[T_{\text{inj}}]$ 为 T_{inj} 的最大值与目标温度值之间的偏差, $[\mathbf{v}_p]$ 是喷嘴扫描速度的调整差值。我们参考文献 [118] 建立映射函数:

$$T_{\text{inj}} = A_s \exp\left(-\frac{\mathbf{v}_p}{B_s}\right) + C_s, \quad (4.7)$$

其中 A_s , B_s 和 C_s 是与融合区域相关且依赖于制造方式的系数。该项考虑了材料从喷嘴挤出后在物理空间中发生形态转变所释放的热量。该过程不同的材料密度 ρ , 材料的比热容 c , 以及整个系统的导热系数 k 会随着 ϕ 的变化而变化, 这些物理量依次定义为:

$$\rho(\phi) = \frac{1}{2}(\rho_1(1 + \phi) + \rho_2(1 - \phi)), \quad (4.8a)$$

$$C_p(\phi) = \frac{1}{2}(C_{p1}(1 + \phi) + C_{p2}(1 - \phi)), \quad (4.8b)$$

$$k(\phi) = \frac{1}{2}(k_1(1 + \phi) + k_2(1 - \phi)), \quad (4.8c)$$

其中 ρ_1 和 ρ_2 表示聚合物和空气的密度, C_{p1} 和 C_{p2} 分别表示聚合物和空气的比热系数, k_1 和 k_2 分别表示聚合物和空气的导热系数。材料的密度和热容量与温度无关, 而介观尺度的导热系数 k 不再只与材料有关, 还与打印细丝的直径和界面的接触面积有关。在介观尺度上讨论的目的是通过修正热导率来弥补对流换热中丢失的热量^[119]。当采用如下电导率模拟热熔丝沉积时, 假定热量可以不受阻碍地穿过缝隙进行扩散:

$$k_{\text{meso}} = \frac{4H_{\text{flux}}}{\pi D \times T_{\text{grad}}}, \quad (4.9)$$

其中 T_{grad} 为温度梯度, H_{flux} 为 T_{grad} 引起的总热流密度。由于所提出的模型只考虑单一材料, 因此接触面两侧对称, 导热系数相同。

从微观尺度来看, 我们在宏观尺度模型 (4.3) 的基础上考虑各向异性特性。在原始方程 (4.3), 用各向异性函数 $\varepsilon(\varphi)$ 替换常数 ε 得到如下控制方程:

$$\begin{aligned} \varepsilon^2(\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \nabla \cdot (\varepsilon^2(\varphi) \nabla \varphi) + (\varphi - \lambda \theta (1 - \varphi^2)) (1 - \varphi^2) + \tilde{S} \\ &+ \left(|\nabla \varphi|^2 \varepsilon(\varphi) \frac{\partial \varepsilon(\varphi)}{\partial \varphi_x} \right)_x + \left(|\nabla \varphi|^2 \varepsilon(\varphi) \frac{\partial \varepsilon(\varphi)}{\partial \varphi_y} \right)_y + \left(|\nabla \varphi|^2 \varepsilon(\varphi) \frac{\partial \varepsilon(\varphi)}{\partial \varphi_z} \right)_z, \end{aligned} \quad (4.10a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho C_p} \nabla T \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (4.10b)$$

其中 $\varphi(x, y, z)$ 为微观尺度下的相场变量, $\tilde{S} = 6S/\pi D^3$ 为材料在微观状态下的动态增长。以四个方向的各向异性情况为例, 各向异性函数表示为:

$$\varepsilon(\varphi) = (1 - 3\tilde{\varepsilon}) \left(1 + \frac{4\tilde{\varepsilon}}{1 - 3\tilde{\varepsilon}} \frac{\varphi_x^4 + \varphi_y^4 + \varphi_z^4}{|\nabla \varphi|^4} \right), \quad (4.11)$$

式中 $\tilde{\varepsilon}$ 为各向异性强度参数, $\varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ 分别为沿 x, y, z 方向的偏导数。为了通过修正热导率来补偿丢失的热量, 理论上通过忽略材料表面辐射来近似有效热导率的影响。表面辐射的热量可以用下式表征,

$$H_{\text{flux}} = \pi D^2 \sigma (T_2^4 - T_1^4) / 2, \quad (4.12)$$

其中 σ 是 Stefan-Boltzmann 常数^[110]。 T_1 和 $T_2 (T_1 \leq T_2)$ 用来表示相邻丝的温度。针对微观尺度模型 (4.10), 采用 Invariant energy quadratization 方法^[120, 121], 引入了两个辅助变量 $M(\varphi)$ 和 $Z(\varphi)$ 用于辅助计算。值得注意的是, 通过引入两个中间辅助变量, 可将非线性控制系统转换为线性系统, 并将自由能转换为二次型, 从而可以半显式地处理非线性势能。如下为微观尺度的控制方程:

$$\varepsilon^2(\varphi) \varphi_t = -Z(\varphi) M(\varphi) - \frac{\lambda}{\varepsilon(\varphi)} \theta (1 - \varphi^2)^2 + \tilde{S}, \quad (4.13a)$$

$$M_t(\varphi) = \frac{1}{2} Z(\varphi) \varphi_t, \quad (4.13b)$$

$$T_t = \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho C_p} \nabla T \right) + \varepsilon(\varphi) (1 - \varphi^2)^2 \varphi_t, \quad (4.13c)$$

其中

$$Z(\varphi) = \frac{-\nabla \cdot (\varepsilon^2(\varphi) \nabla \varphi + \varepsilon(\varphi) |\nabla \varphi|^2 \mathbf{H}(\varphi)) + f(\varphi)/\varepsilon^2(\varphi)}{\sqrt{|\varepsilon(\varphi) \nabla \varphi|^2/2 + F(\varphi)/\varepsilon^2(\varphi) + B}}, \quad (4.14a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\varphi) &= \frac{16\tilde{\varepsilon}}{|\nabla \varphi|^6} (\varphi_x (\varphi_x^2 \varphi_y^2 + \varphi_x^2 \varphi_z^2 - \varphi_y^4 - \varphi_z^4), \\ &\quad \varphi_y (\varphi_y^2 \varphi_z^2 + \varphi_x^2 \varphi_y^2 - \varphi_x^4 - \varphi_z^4), \\ &\quad \varphi_z (\varphi_x^2 \varphi_z^2 + \varphi_y^2 \varphi_z^2 - \varphi_x^4 - \varphi_y^4)), \end{aligned} \quad (4.14b)$$

$$M(\varphi) = \sqrt{|\varepsilon(\varphi) \nabla \varphi|^2/2 + F(\varphi)/\varepsilon^2(\varphi) + B}. \quad (4.14c)$$

式中 B 是一个非负常数。需要指出的是, 宏观尺度方程与微观尺度方程的时间尺度并不一致, 就像宏观体系的温度波动主要由细丝形变引起, 微观尺度结晶引起的温度扰动效应微乎其微。我们选择了以下参数进行3D打印仿真: $Q = 9.62 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$, $\mathbf{v}_s = 0.1 \text{ m/s}$, $A_s = 113$, $B_s = 3440$, $C_s = 203$, $T_M = 293.15 \text{ K}$, $\rho_1 = 1240 \text{ kg/m}^3$, $\rho_2 = 0.9 \text{ kg/m}^3$, $C_{p1} = 2000 \text{ J/kgK}$, $C_{p2} = 1000 \text{ J/kgK}$, $k_1 = 0.195 \text{ W/mK}$, $k_2 = 0.034 \text{ W/mK}$, $\lambda = 0.1$, $\epsilon = h$ 。图13(a)中展示了所提出的多尺度模型的仿真流程。

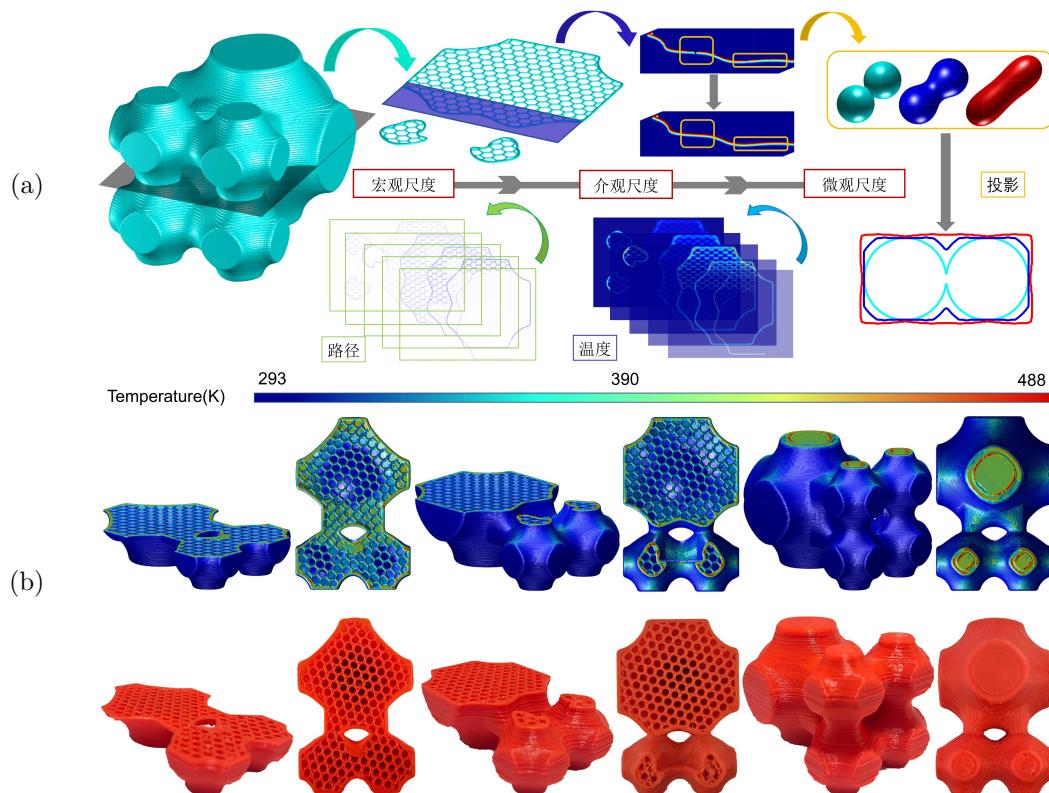


图13 基于熔融沉积技术的多尺度建模与仿真框架。(a) 所提出的热熔融技术多尺度框架示意图。(b) 数值模拟和3D打印不同阶段的对比结果。第一排是表面温度分布的数字模型。第二排是采用PLA材料的3D打印结果

该算例所研究的模型是一个改进的TPMS模型, 可以从^[68]得到。首先使用G-代码生成算法^[122]来设计打印机喷嘴的运动轨迹。从左到右, 这些结果分别展示了所提模型在宏观、介观和微观尺度上通过数值计算得到的三维结构。对于更小尺度的仿真, 我们选择了数值模型的中间切片。在介观尺度上, 我们展示了路径和温度场的演化过程。为了研究喷丝过程中微观结构的性能, 通过模拟聚合物从喷嘴挤出的过程, 比较了聚合物的相变行为。最后, 从微观角度探讨了材料融合的过程。为了验证所提模型可以很好地捕捉真实加工过程中的物理现象, 我们将数值结果与3D打印过程中的不同阶段进行了比较, 如图13(b)所示。第一行展示的是表面温度分布的数字模型。第二行是使用PLA材料进行真实加工的结果。通过高分辨率相机(2591×1944 像素)以2fps的帧率记录所制造结构的3D形状。在这组对比实验中我们采用

的制备件尺寸为 $40\text{mm} \times 60\text{mm} \times 40\text{mm}$, 并且考虑微观尺寸为 $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$. 在数值计算中, 采用宏观网格大小为 $512 \times 768 \times 512$, 微观网格大小为 $200 \times 200 \times 200$. 这里综合考虑了宏观温度场和运动热源的影响. 该仿真计算在配备 Intel Core i9-10850K CPU 和 32GB 内存的计算机上运行, 并且采用 NVIDIA GeForce GTX 1080 Ti 的 GPU 进行并行计算, 显存为 16GB, 计算时间为 5.12 小时. 使用并行算法可以将计算时间缩短 75%. 该仿真模型使用了上亿网格单元, 远远超过计算机内存, 因此只能采用分步计算的方式进行计算. 观察到的结果可以总结如下: (i) 由于拐点是喷嘴轨迹和沿细丝扩散的热量的交点, 因此热量集中在连接点或拐点处. (ii) 考虑单层温度场时, 热场分布与喷管轨迹强相关. 但从宏观角度看, 热量会散去, 温度会接近环境温度. (iii) 当前层的温度模拟不仅受到移动热源的影响, 还受到下层热量扩散的影响. 由此可见, 所提出系统的数字模型与 3D 打印结果相匹配. 综上所述, 在所提模型中同时考虑 3D 打印过程中的温度梯度, 结晶现象, 工艺参数等因素, 从全局角度对高温熔融沉积的全过程进行了数值模拟. 基于该模型, 可以在宏观尺度上模拟制备零件的温度分布和形状变化, 在介观尺度上模拟细丝的制备, 在微观尺度上探究材料与结晶之间的热应变.

4.2. 基于选择性激光熔化工艺的多物理场耦合建模仿真

选择性激光熔化 (Selective laser melting, SLM) 利用高功率激光束充分熔化和结合金属粉末, 形成复杂形状的高密度组件^[123], 广泛应用于航空航天, 汽车, 能源等行业^[124]. 然而, 由于 SLM 过程涉及多种物理现象, 包括高温相变, 多物理耦合和熔池流动, 模拟和计算 SLM 过程面临重大挑战. 激光束对金属粉末的熔化所引起的剧烈梯度变化对零件的显微组织和力学性能^[125] 会产生显著影响. 此外, 不同物理场之间存在复杂的耦合关系, 如温度, 流场和电磁场, 可能会影响熔池的形状和稳定性^[111]. 为了更好地刻画和预测 SLM 过程中的物理现象, 建立有效的数值模拟方法至关重要. 研究人员采用各种模型来模拟和预测复杂物理现象^[126]. Lattice Boltzmann 方法是一种基于微观粒子的方法, 擅长模拟与 SLM 相关的复杂流动和传热现象. 然而, 该方法需要大量的存储空间, 计算成本很大. 光滑粒子法 (Smoothed particle hydrodynamics) 是一种无网格方法, 适用于研究 SLM 过程中熔池的形态^[127], 但该方法的数值稳定性和精度有待提高. 浸入边界法 (Immersed Boundary Method) 结合了 Euler 网格和 Lagrange 网格的优点, 为模拟固液两相耦合流动提供了一种可行的方法^[128]. 然而, 该方法在处理强交互和快速变化的流动问题存在局限性. 为了优化 SLM 过程的参数以确保部件质量, 准确捕捉和模拟热力学过程是至关重要的^[129]. 为了建立 SLM 工艺模拟真实 3D 打印过程的模型, 确保其对微结构演化和工艺参数优化的准确性和可靠性, 我们基于相场模型开展了 SLM 加工工艺的建模与仿真研究.

我们考虑计算域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 中的相场模型, 包含固体, 液体和气体三种组分. 其中, 固体相包含可以受到高温熔化的金属粉尘以及不会发生相变的衬底, 液体是由金属粉尘熔化产生的具有动力学行为的熔池, 气体是其余空间中的惰性气体氩气. 我们使用 $\phi \in [-1, 1]$ 作为非守恒相场变量来描述金属粉尘的固 - 液相变过程, 其中 $\phi = -1$ 表示液相, $\phi = 1$ 表示非液态相. 定义 $\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_3) \in \Omega$ 为第二类相变量, 这里用 $\psi_1 \in [0, 1]$, $\psi_2 \in [0, 1]$ 和 $\psi_3 \in [0, 1]$ 分别表示氩气, 金属粉末和衬底的摩尔分数. 因此我们可以总结如下: 当 $\phi = -1$ 时候, 描述的是系统中的金属熔化后的液态相, 当 $\phi = 1$ 时候需要针对非液态相根据 Ψ 进行区分来描述计算域中的剩余组分. 总摩尔分数应始终保持守恒, 即 $\sum_{l=1}^3 \psi_l = 1$, 并且属于吉布斯三元组分 $\mathcal{G} := \left\{ \Phi \in \mathbb{R}^3 \mid \sum_{l=1}^N \phi_l = 1, 0 \leq \phi_l \leq 1 \right\}$. 通过考虑系统质量守恒以及熵与相变之间的关系,

我们可以建立如下控制方程:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left(\frac{\partial s(e, \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3)}{\partial \phi} + \xi_\phi^2 \Delta \phi \right), \quad (4.15a)$$

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(M_{\psi_l} \nabla \left(\frac{\partial s(e, \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3)}{\partial \psi_l} + \xi_{\psi_l}^2 \Delta \psi_l \right) \right). \quad (4.15b)$$

其中 s 是局部熵密度, 是内部能量密度 e 和相应相位变量 ϕ 和 $\psi_l (l = 1, 2, 3)$ 的函数。上述方程涉及的无量纲参数为: M_ϕ 和 M_{ψ_l} 为不同组分之间界面的恒定迁移率, ξ_ϕ 和 ξ_{ψ_l} 是扩散系数, 取决于表观厚度和迁移率。反应扩散方程方程 (4.15a) 和方程 (4.15b) 可以通过对总体熵进行变分得到:

$$\mathcal{S} = \int_{\Omega} \left(s(e, \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3) - \frac{1}{2} \xi_\phi^2 |\nabla \phi|^2 - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^3 \xi_{\psi_l}^2 |\nabla \psi_l|^2 \right) d\mathbf{x}. \quad (4.16)$$

这里我们参考 [130] 中的研究, 并融入了一个自由能公式, 该公式能够考虑到不同组分在连续界面处混合时的焓效应。此外, 我们将基于质量守恒施加一个额外约束, 具体形式为:

$$G_{total} = \sum_{l=1}^3 \psi_l G_l + T \sum_{l=1}^3 g_{\psi_l} F_{\psi_l}(\psi_l), \quad (4.17)$$

式中 G_l 对应纯相的自由能, $F_{\psi_l}(\psi_l) = \psi_l^2 (1 - \psi_l)^2$ 是 ψ_l 的双阱自由能密度函数, 右边的第二项包含双阱型混合焓。此外, 右边的最后一项是来自熵泛函的约束。因此热驱动的相变动力学方程, 包括熔化和凝固过程^[131], 可以描述为如下形式:

$$G_2 = M_\phi T \left(- \int_{T_M}^T \frac{e_2(\tau, \phi)}{\tau^2} d\tau + g_\phi F_\phi(\phi) \right). \quad (4.18)$$

其中 T_M 表示金属粉末的平衡熔化温度。四次齐次自由能密度函数记为 $F_\phi(\phi) = (1 - \phi^2)^2 / 4$, 与 ϕ 相关联, 同时利用插值函数 $P(\phi) = 1/2 - (1/16)(3\phi^5 - 10\phi^3 + 15\phi)$, 结合潜热 L_a , 定义了金属材料中固液相共存的内能 e_2 , 最后 g_ϕ 表示固相和液相之间的能量。由于 Helmholtz 自由能密度可以表示为 $G_{total}(T, \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3) = e - Ts$, 从而可以导出如下等式:

$$df = d(e - Ts) = -sdT + \frac{\partial e}{\partial \varphi} d\varphi + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial e}{\partial \phi_l} d\phi_l. \quad (4.19)$$

因此, 我们可以简单地得到下方程:

$$\frac{\partial s}{\partial \omega} = -\frac{1}{T} \frac{\partial G_{total}}{\partial \omega}, \quad \text{以及} \quad \omega = \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3. \quad (4.20)$$

考虑固 - 液相相变, 建立如下控制方程:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left(\xi_\phi^2 \nabla^2 \phi - \psi_2 P'(\phi) L_a \frac{T - T_M}{T_M} - \psi_2 T g_\phi F'(\phi) \right). \quad (4.21)$$

式中 P' 表示插值函数 P 相对于 ϕ 的导数。上式暗示了相场变量 ϕ 的动态演化主要受热驱动力控制, 该驱动力依赖于局部温度, 并假定潜热与温度无关。相场变量 ϕ 也会受到扩散效应

(右手边第一项) 和双阱势相分离现象 (右手边第三项) 的相互作用的影响, 促进了狭窄且光滑的界面的产生和演化. 第二类相场方程可以定义为:

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial t} = \nabla \cdot (M_l \nabla \mu_l), \quad (4.22)$$

$$\mu_l = T F'_{\psi_l}(\psi_l) - \xi_{\psi_l}^2 \nabla^2 \psi_l + G_l, \quad (4.23)$$

其中 μ_l 是化学势, 可以通过梯度流方式推导得到. 对熵密度进行变分求导, 可以得到如下能量方程:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(M_e \nabla \frac{\partial s(e, \phi, \psi_1, \psi_2, \psi_3)}{\partial e} \right), \quad (4.24)$$

其中, 迁移率可以定义为 $M_e = k(T)T^2$, $k(T)$ 是随温度变化的热导率. 由于 $e_2 = e_{2_s} + P(\phi)L_a \approx P(\phi)L_a$ 和以下等式:

$$ds = \frac{1}{T} de - \frac{1}{T} \frac{\partial e}{\partial \phi} d\phi - \frac{1}{T} \sum_{l=1}^3 \frac{\partial e}{\partial \psi_l} d\psi_l, \quad (4.25a)$$

$$f(T, \varphi, \phi_1, \phi_2, \phi_3) = e - Ts, \quad (4.25b)$$

我们可以重新构造如下能量方程 (4.24):

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = k \Delta T - M_\phi \psi_2 \left(\frac{P(\phi)L_a}{T_M} + g_\phi F_\phi(\phi) \right) - \sum_{l=1}^3 g_{\psi_l} F_{\psi_l}(\psi_l), \quad (4.26)$$

该方程也同时考虑了热毛细效应. 通过考虑动力学行为, 我们在修正后的等式 (4.21) 上增加表面张力可以得到如下的热流体动力系统:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left(\xi_\phi^2 \Delta \phi - \psi_2 P'(\phi) L_a \frac{T_M - T}{T_M} - \psi_2 T g_\phi F'_\phi(\phi) \right), \quad (4.27a)$$

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi_l \mathbf{u}) = \nabla \cdot (M_{\psi_l} \nabla \mu_l), \quad (4.27b)$$

$$\mu_l = T g_{\psi_l} F'_{\psi_l}(\psi_l) - \xi_{\psi_l}^2 \Delta \psi_l + G_l, \quad (4.27c)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \sum_{l=1}^3 \psi_l \nabla \mu_l + \mu_T \nabla T, \quad (4.27d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.27e)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T = -M_T \mu_T + Q_r + Q_{ir}, \quad (4.27f)$$

$$\mu_T = -k \Delta T + M_\phi \psi_2 \left(\frac{P(\phi)L_a}{T_M} + g_\phi F_\phi(\phi) \right) + \sum_{l=1}^3 g_{\psi_l} F_{\psi_l}(\psi_l), \quad (4.27g)$$

$$\begin{cases} Q_r = -\beta \sigma (T^4 - T_M^4) / \epsilon, & Q_{ir} = -\alpha \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} / \epsilon, \\ \mathbf{H} = \frac{1}{r} \sqrt{2/\pi} \bar{Q} \exp \left(-\frac{2(x - x_c - Ut)^2}{r^2} \right) \mathbf{e}_y. \end{cases} \quad (4.27h)$$

方程 (4.27d) 可以重新写成如下等式:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\nabla p + \nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \sum_{l=1}^3 \psi_l \nabla \mu_l - \frac{1}{M_T} \left(\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) \nabla T \\ &= -\nabla p + \nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) - \sum_{l=1}^3 \psi_l \nabla \mu_l - \frac{\rho}{M_T} \dot{T} \cdot \nabla T, \end{aligned} \quad (4.28)$$

其中, $\dot{T} = \partial T / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla T$. $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))$. 密度 ρ , 粘度 η , 迁移率 M_{ψ_l} , 迁移率 M_ϕ , 扩散系数 ξ_{ψ_l} , ξ_ϕ , g_{ψ_l} , g_ϕ , 导热系数 k , 截断温度 T_M 都是常量. 在计算过程中, 采用如下 Neumann 边界条件:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = \mathbf{n} \cdot \nabla \psi_l = \mathbf{n} \cdot \nabla u = \mathbf{n} \cdot \nabla v = \mathbf{n} \cdot \nabla p = \mathbf{n} \cdot \nabla T = 0. \quad (4.29)$$

为了更好的理解上述系统, 我们需要进行如下说明: (i) 系统中包含了与物理机制相对应的数学模型, 而附加条件则需要自适应调节项, 如辐射损失 Q_r 和激光照射 Q_{ir} 组成的热源需要自适应的选取. (ii) 在不考虑引入外界热源的情况下, 也就是在方程中不考虑 Q_r 以及 Q_{ir} , 我们的系统可以被证明满足基于热力学第二定律的无条件能量稳定定律. (iii) 所建系统忽略了密度变化. 熔池被看做是散度为零的准不可压缩牛顿流体. 所以基于 Boussinesq 近似, 由热膨胀引起的密度差仅在浮力项中出现. (iv) 本系统未考虑由表面张力梯度差引起的热 Marangoni 效应. 热毛细流动只出现在流体中, 而在固体和气体中都不存在. 局部出现的由温度梯度产生的流动将影响能量的稳定性.

我们以垂直于衬底水平移动的激光束照射下, 金属粉末在基底上的界面动力学反馈为例对所建模型进行说明. 假设喷嘴水平向右移动, 基板上均匀分布着金属粉尘. 基底不受高温激光照射的影响, 周围环境是理想的氩气. 图 14(a) 展示了二维空间中激光照射下熔池的形成. 图 14(b) 展示了固体粉末在基板上随激光移动发生的形态演化结果, 依次为 $t = 0.1, 1.5$ 和 3 时刻捕获的结果. 为了清晰地表示固体, 流体和气体之间的组成关系, 我们用黄色, 蓝色和青色对相应区域进行了着色.

红色实线表示固体界面, 黑色实线表示基板界面. 右侧的图展示了温度场随时间演化的结果, 其中温度的值通过 $\tilde{T} = (T - T_M) / \Delta T$ 进行缩放. 在高温激光照射下, 金属粉尘表面发生熔融现象, 形成液态金属. 熔融金属的流动受喷嘴运动方向的影响, 该影响可以在 $t = 0.1$ 时刻观察到. 金属的熔化不是瞬间的, 除了直接激光照射产生的热能外, 剩余热量提供额外的能量会进一步促进金属粉尘的熔化. 由于熔融粉末的表面张力和润湿条件较差, 导致了凝固后的金属轨迹的分裂, 可以从 $t = 1.5$ 时刻的结果中观察到. 同时, 随着衬底左侧温度的逐渐降低, 分裂的液滴发生凝固. 由于我们假设氩气不参与辐射传热, 因此这种凝固现象也发生在熔融金属与氩气的界面处. 在 $t = 3$ 时刻, 可以观察到基板上的金属粉末粉尘发生了固 - 液相变, 形成了一个明显的熔融金属轨迹. 图 14(b) 下方展示了随激光束移动形成的单层打印的仿真结果, 可以看出所提方法可以很好地用于捕捉假设的固体粉末在激光照射下的运动喷嘴下的动力学行为. 在实际 SLM 制造中, 激光束根据 STL 文件的设计数据扫描粉末层, 并在控制条件下选择性地熔化粉末. 图 14(c) 展示了在三维空间中针对齿轮模型逐层打印的仿真演化结果. 在这组数值实验中, 我们采用的制备件尺寸为 $50mm \times 50mm \times 64mm$, 采用的网格尺寸为 $256 \times 256 \times 328$. 该仿真计算在配备 Intel Core i7-7700 CPU 和 16GB 内存的计算机上运行, 并且采用 NVIDIA GeForce GT 730 的 GPU 进行并行计算, 计算时间约为 5.62 小时. 使

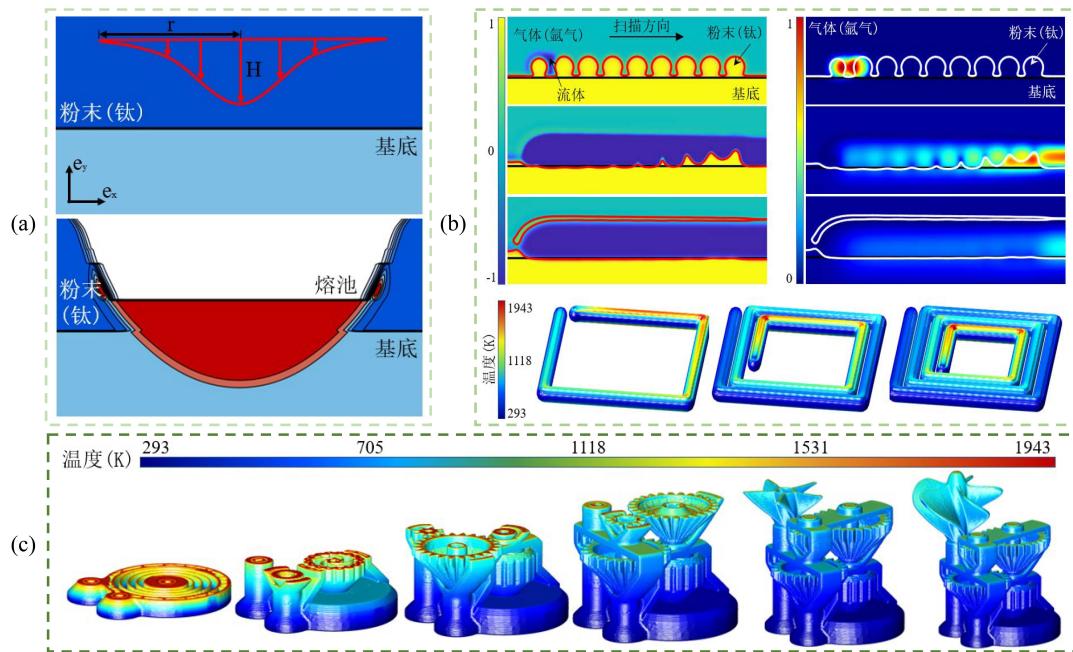


图 14 基于选择性激光烧结技术的仿真示意图. (a) 二维空间中激光照射下熔池的形成. (b) 固体粉末受打印喷头影响在基板上的相态演化图. 左侧是相场界面变化, 右侧是全局的温度变化. 捕获的结果依次对应如下时刻: $t = 0.1, 1.5, \text{ 和 } 3$. 第四行是随激光束移动形成的单层仿真结果. (c) 齿轮模型逐层打印的演化仿真效果

用并行算法可以将计算时间缩短 75%. 我们通过读取三维模型的 G- 代码进行分析, 生成点云连接矩阵, 设计激光束的运动轨迹, 并模拟在特定 SLM 工艺参数下金属粉末逐层熔化又凝固最终生成制备件的过程.

5. 总 结

3D 打印技术呈现多学科强交叉特性. 目前逐步建立了覆盖实物化设计概念, 数字化三维实体和程序化加工过程的创新体系. 该体系从制备件原型设计到面向特定需求的拓扑结构优化, 再到最后进行大尺寸模型增材减材一体化仿真, 涵盖了其完整环节, 用来全面理解和解决其中的复杂问题. 通过建立集成的 3D 打印系统, 提高制造的可靠性和稳定性, 降低资源浪费, 成为普及 3D 打印技术的关键. 相场模型通过众多优势成为串联各个模块的媒介. 本文进一步回顾了相场模型在建立设计 - 优化 - 仿真框架中的发展态势, 强调了相场模型对于解决 3D 打印中的各个环节问题的支持作用. 本文首先回顾了针对常见的数据类型进行三维重构的技术, 对重构模型的修补以及基于 TPMS 的轻量化支撑结构设计模型. 之后本文针对特定的场景需求, 回顾了拓扑优化模型建立的整体思路. 最后本文针对特定制造工艺回顾了相关孪生仿真模型的构建. 基于相场方法, 建立了统一的模型和算法, 为 3D 打印技术的全流程提供了理论和方法支持, 为未来的研究和应用奠定了基础. 本文的主要贡献如下: (1) 针对搭建的设计 - 优化 - 仿真框架中的各个模块, 梳理了发展至今为止的研究路线, 为研究者以及初学者提供参考依据. (2) 针对各个模块的研究目标, 分别介绍了基于相场方法的研究框架, 并进行了

详细的模型推导和分析, 同时分析了相关算法的模拟结果和使用场景, 加深对相关算法的理解。 (3) 对该框架搭建过程以及过程中的核心痛点进行剖析, 为后续研究提供方向性的指引。

6. 展望

目前关于3D打印的设计-优化-仿真一体化模型的研究正在开展中。面对“设计出来但是加工不出来”的问题, 需要完全打通不同模块儿之间的信息传递, 在设计的时候考虑制造需求以及工艺参数, 并且建立设计与管控的反馈机制。目前我们基于相场方法, 将常用的数据传输格式转化为体素数据, 已经实现了基于真实点云数据和CT切片数据的逆向重构设计, 以及基于体素数据的曲面光滑和轻量化支撑结构设计功能。同时, 由于我们的算法都是基于体素数据的, 各个模块儿之间的数据可以直接交互。然而解决“设计出来但是加工不出来”的问题需要设计和加工之间的完全连接, 这中间还涉及到诸多问题。我们需要建立CAD/CAE/CAM一体化无缝衔接技术, 制定标准化的设计与制造流程, 明确各个环节的责任和要求, 并建立统一的数据交换标准, 以确保设计与制造之间的协同工作。最后, 我们需要建立过程管控与模型设计的反馈机制, 确保可以将实际制造中收集到的真实数据反馈到模型设计中, 对原始模型进行调整和优化, 以提高产品质量、降低成本并提高生产效率。通过这种方式, 我们能够实现制造过程的持续改进, 使设计与制造之间的协同更加紧密和有效。面对“加工出来但是质量不确定”的问题, 需要建立准确且复杂的多尺度、多物理场耦合模型, 并且需要建立仿真与过程管控之间的信息交互通道。目前我们针对FDM工艺建立了跨宏观-微观尺度之间的仿真模型, 针对SLM工艺建立耦合固-液-气-热多物理场景的耦合模型, 初步实现了过程控制可模拟, 物理状态可预测, 制造过程可调控。然而关于仿真与管控之间的反馈机制仍在探索当中, 这也是未来需要关注的重点之一。

参考文献

- [1] Michopoulos J G, Iliopoulos A P, Steuben J C, Birnbaum A J, Lambrakos S G. On the multi-physics modeling challenges for metal additive manufacturing processes[J]. *Addit. Manuf.*, 2018, 22: 784–799.
- [2] Lu B. Additive Manufacturing Technology: Present and Future[J]. *China Mech. Eng.*, 2020, 31(01): 19. “in Chinese”.
- [3] Liou F, Newkirk J, Fan Z, Sparks T, Chen X, Fletcher K, Zhang J, Zhang Y, Kumar K S, Karnati S. Multiscale and multiphysics modeling of additive manufacturing of advanced materials, 2015.
- [4] Hoppe H, DeRose T, Duchamp T, McDonald J, Stuetzle W. Surface reconstruction from unorganized points. *Proc. 19th Annu. Conf. Comput. Graph. Interact. Tech.*, 1992: 71–78.
- [5] Wang Y. Periodic surface modeling for computer aided nano design[J]. *Comput.-Aided Design*, 2007, 39(3): 179–189.
- [6] Osher S, Fedkiw R, Piechor K. Level set methods and dynamic implicit surfaces[J]. *Appl. Mech. Rev.*, 2004, 57(3): B15–B15.
- [7] Bendsøe M P, Kikuchi N. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1988, 71(2): 197–224.
- [8] Takezawa A, Nishiwaki S, Kitamura M. Shape and topology optimization based on the phase field method and sensitivity analysis[J]. *J. Comput. Phys.*, 2010, 229(7): 2697–2718.

- [9] Yu Q, Xia Q, Li Y B. A phase field-based systematic multiscale topology optimization method for porous structures design[J]. *J. Comput. Phys.*, 2022, 466: 111383.
- [10] Seong H K, Kim C W, Yoo J, Lee, J. Multiphase topology optimization with a single variable using the phase-field design method[J]. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 2019, 119(5): 334–360.
- [11] Zheng Y, Luo Z, Wang Y, Li Z, Qu J, Zhang C. Optimized high thermal insulation by the topological design of hierarchical structures[J]. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2022, 186: 122448.
- [12] Nelaturi S, Kim W, Kurtoglu T. Manufacturability feedback and model correction for additive manufacturing[J]. *J. Manuf. Sci. Eng.*, 2015, 137(2): 021015.
- [13] Markl M, Körner C. Multiscale modeling of powder bed-based additive manufacturing[J]. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2016, 46: 93–123.
- [14] Vyawahare S, Teraiya S, Panghal D, Kumar S. Fused deposition modelling: a review[J]. *Rapid Prototyping J.*, 2020, 26(1): 176–201.
- [15] Xia Q, Sun G, Kim J, Li Y B. Multi-scale modeling and simulation of additive manufacturing based on fused deposition technique[J] *Phys. Fluids*, 2023, 35: 034116.
- [16] Gürtler F J, Karg M, Leitz K H, Schmidt M. Simulation of laser beam melting of steel powders using the three-dimensional volume of fluid method[J]. *Phys. Procedia*, 2013, 41: 881–886.
- [17] Langer J S. Models of pattern formation in first-order phase transitions[J]. *Directions in Condensed Matter Phys.*, 1986: 165–186.
- [18] Geng R, Du J, Wei Z Y, Wei P. Research progress of microstructure phase field simulation in metal additive manufacturing[J]. *Mater. Rev.*, 2018, 32(7): 1145–1150. "in Chinese".
- [19] Liang J, Park F, Zhao H. Robust and efficient implicit surface reconstruction for point clouds based on convexified image segmentation[J] *J. Sci. Comput.*, 2013, 54(2–3): 577–602.
- [20] Boissonnat J D. Geometric structures for three-dimensional shape representation[J]. *ACM Trans. Graph.*, 1984, 3(4): 266–286.
- [21] Ye J, Yanovsky I, Dong B, Gandlin R, Brandt A, Osher S. Multigrid narrow band surface reconstruction via level set functions[J]. *Adv. Visual Comput.*, 2012: 61–70.
- [22] Li Y B, Zhang L, Xia Q, Yu Q, Kim J. An unconditionally energy-stable second-order time-accurate numerical scheme for the coupled Cahn-Hilliard system in copolymer/homopolymer mixtures[J]. *Comp. Mater. Sci.*, 2021, 200: 110809.
- [23] Li Y B, Xia Q, Lee C, Kim S, Kim J. A robust and efficient fingerprint image restoration method based on a phase-field model[J]. *Pattern. Recogn.*, 2022, 123: 108405.
- [24] Li Y, Lee D, Lee C, Lee J, Lee S, Kim J, Ahn S, Kim J. Surface embedding narrow volume reconstruction from unorganized points[J]. *Comput. Vision Image Understand.*, 2014, 121: 100–107.
- [25] Guo J F, Cai Y L, Wang Y P. Morphology-based interpolation for 3D medical image reconstruction[J]. *Comput. Med. Imaging Graphics*, 1995, 19(3): 267–279.
- [26] Deng S, Li Y, Jiang L, Cao Y, Zhang J. Surface Reconstruction from Sparse & Arbitrarily Oriented Contours in Freehand 3D Ultrasound[J]. *J. Comput.*, 2013, 8(5): 1279–1285.
- [27] Sharma O, Agarwal N. Signed distance based 3D surface reconstruction from unorganized planar cross-sections[J]. *Comput. Graphics*, 2017, 62: 67–76.
- [28] Bretin E, Dayrens F, Masnou S. Volume reconstruction from slices[J]. *SIAM J. Imaging Sci.*, 2017, 10(4): 2326–2358.
- [29] Huang Z, Zou M, Carr N, Ju T. Topology-controlled reconstruction of multi-labelled domains from cross-sections[J]. *ACM Trans. Graph.*, 2017, 36(4): 1–12.

- [30] Pfister H, Lorensen B, Bajaj C, Kindlmann G, Schroeder W, Avila L S, Raghu K M, Machiraju R, Lee J. The transfer function bake-off[J]. *IEEE Comput. Graph. Appl.*, 2001, 21(3): 16–22.
- [31] Ilmanen T. Convergence of the Allen-Cahn equation to Brakke's motion by mean curvature[J]. *J. Differ. Geom.*, 1993, 38(2): 417–461.
- [32] Pan H, Choi Y K, Liu Y, Hu W, Du Q, Polthier K, Zhang C, Wang W. Robust modeling of constant mean curvature surfaces[J]. *ACM Trans. Graph.*, 2012, 31(4): 1–11.
- [33] Qi C, Wang Y. Feature-based crystal construction in computer-aided nano-design[J]. *Comput.-Aided Design*, 2009, 41(11): 792–800.
- [34] Jung Y, Chu K T, Torquato S. A variational level set approach for surface area minimization of triply-periodic surfaces[J]. *J. Comput. Phys.*, 2007, 223(2): 711–730.
- [35] Osher S J, Santosa F. Level set methods for optimization problems involving geometry and constraints: I. Frequencies of a two-density inhomogeneous drum[J]. *J. Comput. Phys.*, 2001, 171(1): 272–288.
- [36] Yang S D, Lee H G, Kim J. A phase-field approach for minimizing the area of triply periodic surfaces with volume constraint[J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2010, 181(6): 1037–1046.
- [37] Li Y, Jeong D, Shin J, Kim J. A conservative numerical method for the Cahn-Hilliard equation with Dirichlet boundary conditions in complex domains[J]. *Comput. Math. Appl.*, 2013, 65(1): 102–115.
- [38] Zhang J, Du Q. Numerical studies of discrete approximations to the Allen-Cahn equation in the sharp interface limit[J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2009, 31(4): 3042–3063.
- [39] Ilmanen T. Convergence of the Allen-Cahn equation to Brakke's motion by mean curvature[J]. *J. Differ. Geom.*, 1993, 38(2): 417–461.
- [40] Evans L C, Soner H M, Souganidis P E. Phase transitions and generalized motion by mean curvature[J]. *Commun. Pure Appl. Math.*, 1992, 45(9): 1097–1123.
- [41] Lee H G, Kim J. Regularized Dirac delta functions for phase field models[J]. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 2012, 91(3): 269–288.
- [42] Li D, Kim I Y. Multi-material topology optimization for practical lightweight design[J]. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 2018, 58: 1081–1094.
- [43] Dugast F, Favennec Y, Josset C. Reactive fluid flow topology optimization with the multi-relaxation time lattice Boltzmann method and a level-set function[J]. *J. Comput. Phys.*, 2020, 409: 109252.
- [44] Alacoque L, Watkins R T, Tamjani A Y. Stress-based and robust topology optimization for thermoelastic multi-material periodic microstructures[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2021, 379: 113749.
- [45] Sanogo S, Messine F. Topology optimization in electromagnetism using SIMP method: Issues of material interpolation schemes[J]. *COMPEL*, 2018, 37(6): 2138–2157.
- [46] Bendsøe M P, Sigmund O. Material interpolation schemes in topology optimization[J]. *Arch. Appl. Mech.*, 1999, 69: 635–654.
- [47] Querin O M, Steven G P, Xie Y M. Evolutionary structural optimisation (ESO) using a bidirectional algorithm[J]. *Eng. Comput.*, 1998, 15(8): 1031–1048.
- [48] Van Dijk N P, Maute K, Langelaar M, Van Keulen F. Level-set methods for structural topology optimization: a review[J]. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 2013, 48: 437–472.
- [49] Xie W, Xia Q, Yu Q, Li Y B. An effective phase field method for topology optimization without the curvature effects[J]. *Comput. Math. Appl.*, 2023, 146: 200–212.

- [50] Geoffroy-Donders P, Allaire G, Pantz O. 3-d topology optimization of modulated and oriented periodic microstructures by the homogenization method[J]. *J. Comput. Phys.*, 2020, 401: 108994.
- [51] Hutmacher D W. Scaffolds in tissue engineering bone and cartilage[J]. *Biomaterials*, 2000, 21(24): 2529–2543.
- [52] Cheah C M, Chua C K, Leong K F, Chua S W. Development of a tissue engineering scaffold structure library for rapid prototyping. Part 1: investigation and classification[J]. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, 2003, 21: 291–301.
- [53] Puppi D, Mota C, Gazzarri M, Dinucci D, Gloria A, Myrzabekova M, Ambrosio L, Chiellini F. Additive manufacturing of wet-spun polymeric scaffolds for bone tissue engineering[J]. *Biomed. Microdevices*, 2012, 14: 1115–1127.
- [54] Wein F, Chen N, Iqbal N, Stengl M, Avila M. Topology optimization of unsaturated flows in multi-material porous media: Application to a simple diaper model[J]. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2019, 78: 104871.
- [55] Han S C, Lee J W, Kang K. A new type of low density material: Shellular[J]. *Adv. Mater.*, 2015, 27(37): 5506–5511.
- [56] Gao J, Luo Z, Li H, Li P, Gao L. Dynamic multiscale topology optimization for multi-regional micro-structured cellular composites[J]. *Composite Struct.*, 2019, 211: 401–417.
- [57] Da D, Cui X, Long K, Cai Y, Li G. Multiscale concurrent topology optimization of structures and microscopic multi-phase materials for thermal conductivity[J]. *Eng. Comput.*, 2019, 36(1): 126–146.
- [58] Long K, Han D, Gu X. Concurrent topology optimization of composite macrostructure and microstructure constructed by constituent phases of distinct Poisson's ratios for maximum frequency[J]. *Comput. Mater. Sci.*, 2017, 129: 194–201.
- [59] Zhang Y, Xiao M, Gao L, Gao J, Li H. Multiscale topology optimization for minimizing frequency responses of cellular composites with connectable graded microstructures[J]. *Mech. Syst. Signal Process.*, 2020, 135: 106369.
- [60] Feng J, Fu J, Shang C, Lin Z, Li B. Porous scaffold design by solid T-splines and triply periodic minimal surfaces[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2018, 336: 333–352.
- [61] Liu F, Mao Z, Zhang P, Zhang D Z, Jiang J, Ma Z. Functionally graded porous scaffolds in multiple patterns: New design method, physical and mechanical properties[J]. *Mater. Des.*, 2018, 160: 849–860.
- [62] Melchels F P W, Barradas A M C, Van Blitterswijk C A, De Boer J, Feijen J, Grijpma D W. Effects of the architecture of tissue engineering scaffolds on cell seeding and culturing. *Acta Biomater.*, 2010, 6(11): 4208–4217.
- [63] Yang N, Quan Z, Zhang D, Tian Y. Multi-morphology transition hybridization CAD design of minimal surface porous structures for use in tissue engineering[J]. *Comput.-Aided Des.*, 2014, 56: 11–21.
- [64] Kapfer S C, Hyde S T, Mecke K, Arns C H, Schröder-Turk G E. Minimal surface scaffold designs for tissue engineering[J]. *Biomaterials*, 2011, 32(29): 6875–6882.
- [65] Guedes J M, Kikuchi N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1990, 83(2): 143–198.
- [66] Zhou M, Rozvany G I N. The COC algorithm, Part II: Topological, geometrical and generalized shape optimization[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1991, 89(1-3): 309–336.

- [67] Andreassen E, Clausen A, Schevenels M, Lazarov B S, Sigmund O. Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code[J]. Struct. Multidiscip. Optim., 2011, 43: 1–16.
- [68] Li Y B, Xia Q, Yoon S, Lee C, Lu B, Kim J. Simple and efficient volume merging method for triply periodic minimal structures[J]. Comput. Phys. Commun., 2021, 264: 107956.
- [69] Li Y B, Xia Q, Kang S, Kwak S, Kim J. A practical algorithm for the design of multiple-size porous scaffolds with triply periodic structures[J]. Math. Comput. Simul., 220 (2024) 481–495.
- [70] Garcke H. On Cahn — Hilliard systems with elasticity[J]. Proc. R. Soc. Edinb. Sect. A: Math., 2003, 133(2): 307–331.
- [71] Li Y, Liu R, Xia Q, He C, Li Z. First-and second-order unconditionally stable direct discretization methods for multi-component Cahn-Hilliard system on surfaces[J]. J. Comput. Appl. Math., 2022, 401: 113778.
- [72] Hintermüller M, Hinze M, Tber M H. An adaptive finite-element Moreau-Yosida-based solver for a non-smooth Cahn-Hilliard problem[J]. Optim. Methods Softw., 2011, 26(4-5): 777-811.
- [73] Haertel J H, Nellis G F. A fully developed flow thermofluid model for topology optimization of 3D-printed air-cooled heat exchangers[J]. Appl. Therm. Eng., 2017, 119: 10–24.
- [74] Xia Q, Yang J, Li Y B. On the conservative phase-field method with the N-component incompressible flows[J]. Phys. Fluids, 2023, 35: 012120.
- [75] Xia Q, Kim J, Li Y B. An unconditionally energy stable method for binary incompressible heat conductive fluids based on the phase-field model[J]. Comput. Math. Appl., 2022, 123: 26–39.
- [76] Li Y B, Wang K, Yu Q, Xia Q, Kim J. Unconditionally energy stable schemes for fluid-based topology optimization[J]. Commun. Nonlinear Sci., 2022, 111: 106433.
- [77] Borrvall T, Petersson J. Topology optimization of fluids in Stokes flow[J]. Int. J. Numer. Methods Fluids, 2003, 41(1): 77–107.
- [78] Modica L. The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion[J]. Arch. Ration. Mech. Anal., 1987, 98: 123–142.
- [79] Schmid A. A time dependent Ginzburg-Landau equation and its application to the problem of resistivity in the mixed state[J]. Physik der kondensierten Materie, 1966, 5(4): 302-317.
- [80] Deng H, To A C. A parametric level set method for topology optimization based on deep neural network[J]. J. Mech. Eng., 2021, 143(9): 091702.
- [81] Attarzadeh R, Rovira M, Duwig C. Design analysis of the “Schwartz D” based heat exchanger: A numerical study[J]. Int. J. Heat Mass Transf., 2021, 177: 121415.
- [82] Wallin M, Ristinmaa M. Finite strain topology optimization based on phase-field regularization[J]. Struct. Multidiscipl. Optim., 2015, 51: 305–317.
- [83] Lazarov B S, Wang F, Sigmund O. Length scale and manufacturability in density-based topology optimization[J]. Arch. Appl. Mech., 2016, 86: 189–218.
- [84] Dilgen S B, Dilgen C B, Fuhrman D R, Sigmund O, Lazarov B S. Density based topology optimization of turbulent flow heat transfer systems[J]. Struct. Multidiscipl. Optim., 2018, 57: 1905–1918.
- [85] Wu C Q, Yang C, Xiao Q, Ke H B, Xu H J. Topology optimization of porous solid structures for heat transfer and flow channels in reactors with fluid-solid reaction coupling[J]. Int. J. Therm. Sci., 2022, 181: 107771.
- [86] Soprani S, Haertel J H K, Lazarov B S, Sigmund O, Engelbrecht K. A design approach for integrating thermoelectric devices using topology optimization[J]. Appl. Energy, 2016, 176: 49–64.

- [87] Ozdemir M, Simsek U, Kiziltas G, Gayir C E, Celik A, Sendur P. A novel design framework for generating functionally graded multi-morphology lattices via hybrid optimization and blending methods[J]. *Addit. Manuf.*, 2023, 70: 103560.
- [88] Modrek M, Viswanath A, Khan K A, Ali M I H, Al-Rub R K A. Multi-objective topology optimization of passive heat sinks including self-weight based on triply periodic minimal surface lattices[J]. *Case Stud. Therm. Eng.*, 2023, 42: 102684.
- [89] Al-Ketan O, Ali M, Khalil M, Rowshan R, Khan K A, Abu Al-Rub R K. Forced convection computational fluid dynamics analysis of architected and three-dimensional printable heat sinks based on triply periodic minimal surfaces[J]. *J. Therm. Sci. Eng. Appl.*, 2021, 13(2): 021010.
- [90] Song X, Xia Q, Kim J, Li Y. An unconditional energy stable data assimilation scheme for Navier-Stokes-Cahn-Hilliard equations with local discretized observed data[J]. *Comput. Math. Appl.*, 2024, 164: 21–33.
- [91] You B, Xia Q. Continuous data assimilation algorithm for the two dimensional Cahn-Hilliard-Navier-Stokes system[J]. *Appl. Math. Optim.*, 2022, 85:5.
- [92] Xia Q, Zhu J, Yu Q, Li Y B. Triply periodic minimal surfaces based topology optimization for the hydrodynamic and convective heat transfer[J]. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2024, 131: 107819.
- [93] Park S H, Simeone O, Sahin O, Shitz S S. Fronthaul compression for cloud radio access networks: Signal processing advances inspired by network information theory[J]. *IEEE Signal Process. Mag.*, 2014, 31(6): 69–79.
- [94] Garnier J, Billen G, Hannon E, Fonbonne S, Videnina Y, Soulie M. Modelling the transfer and retention of nutrients in the drainage network of the Danube River[J]. *Estuarine, Coastal and Shelf Sci.*, 2002, 54(3): 285–308.
- [95] Xia Q, Sun G M, Yu Q, Kim J, Li Y B. Thermal-fluid topology optimization with unconditional energy stability and second-order accuracy via phase-field model[J]. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2023, 116: 106782.
- [96] Yancopoulos G D, Davis S, Gale N W, Rudge J S, Wiegand S J, Holash J. Vascular-specific growth factors and blood vessel formation[J]. *Nature*, 2000, 407(6801): 242–248.
- [97] Ronellenfitsch H, Katifori E. Global optimization, local adaptation, and the role of growth in distribution networks[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117(13): 138301.
- [98] Katifori E, Szöllösi G J, Magnasco M O. Damage and fluctuations induce loops in optimal transport networks[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 104(4): 048704.
- [99] Hansen A, Langdon T R, Mendrin L W, Peters K, Ramos J, Lent D D. Exploring the potential of 3D-printing in biological education: A review of the literature[J]. *integr. Comp. Biol.*, 2020, 60: 896–905.
- [100] Hu D, Cai D. An optimization principle for initiation and adaptation of biological transport networks[J]. *Commun. Math. Sci.*, 2019, 17(5): 1427–1436.
- [101] Murray C D. The physiological principle of minimum work: I. The vascular system and the cost of blood volume[J]. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 1926, 12(3): 207–214.
- [102] Xia Q, Jiang X, Li Y B. A modified and efficient phase field model for the biological transport network[J]. *J. Comput. Phys.*, 2023, 488: 112192.
- [103] Onsager L, Machlup S. Fluctuations and irreversible processes[J]. *Phys. Rev.*, 1953, 91(6): 1505.
- [104] Dimitrov P, Zucker S W. A constant production hypothesis guides leaf venation patterning[J]. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2006, 103(24): 9363–9368.

- [105] Michopoulos J G, Iliopoulos A P, Steuben J C, Birnbaum A J, Lambrakos S G. On the multi-physics modeling challenges for metal additive manufacturing processes[J]. *Addit. Manuf.*, 2018, 22: 784–799.
- [106] Xia H, Lu J, Tryggvason G. A numerical study of the effect of viscoelastic stresses in fused filament fabrication[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2019, 346: 242–259.
- [107] Xia Q, Kim J, Li Y B. Modeling and simulation of multi-component immiscible flows based on a modified Cahn-Hilliard equation[J]. *Eur. J. Mech. B Fluids*, 2022, 95: 194–204.
- [108] Xia Q, Yu Q, Li Y B. A second-order accurate, unconditionally energy stable numerical scheme for binary fluid flows on arbitrarily curved surfaces[J]. *Comput. Method Appl. M.*, 2021, 384: 113987.
- [109] Xia Q, Liu Y, Kim J, Li Y B. Binary thermal fluids computation over arbitrary surfaces with second-order accuracy and unconditional energy stability based on phase-field model[J]. *J. Comput. Appl. Math.*, 2023, 433: 115319.
- [110] Yan W, Ge W, Smith J, Lin S, Kafka O L, Lin F, Liu W K. Multi-scale modeling of electron beam melting of functionally graded materials[J]. *Acta Mater.*, 2016, 115: 403–412.
- [111] Wang Z, Yan W, Liu W K, Liu M. Powder-scale multi-physics modeling of multi-layer multi-track selective laser melting with sharp interface capturing method[J]. *Comput. Mech.*, 2019, 63: 649–661.
- [112] Wasti S, Adhikari S. Use of biomaterials for 3D printing by fused deposition modeling technique: a review[J]. *Front. Chem.*, 2020, 8: 315.
- [113] Huang H, Ma N, Chen J, Feng Z, Murakawa H. Toward large-scale simulation of residual stress and distortion in wire and arc additive manufacturing[J]. *Addit. Manuf.*, 2020, 34: 101248.
- [114] Wang D, Chen X. Closed-loop high-fidelity simulation integrating finite element modeling with feedback controls in additive manufacturing[J]. *J. Dyn. Syst. Meas. Control*, 2021, 143(2): 021006.
- [115] Mohamed O A, Masood S H, Bhowmik J L. Optimization of fused deposition modeling process parameters: a review of current research and future prospects[J]. *Adv. Manuf.*, 2015, 3: 42–53.
- [116] Nasirov A, Hasanov S, Fidan I. Prediction of mechanical properties of fused deposition modeling made parts using multiscale modeling and classical laminate theory, Proc. Int. Solid Freeform Fabrication Symp., University of Texas at Austin, 2019.
- [117] Sánchez-Balanzar L, Velázquez-Villegas F, Ruiz-Huerta L, Caballero-Ruiz A. A multiscale analysis approach to predict mechanical properties in fused deposition modeling parts[J]. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, 2021, 115(7-8): 2269–2279.
- [118] Huang X K, Tian X Y, Zhong Q, He S W, Huo C B, Cao Y, Tong Z Q, Li D C. Real-time process control of powder bed fusion by monitoring dynamic temperature field[J]. *Adv. Manuf.*, 2020, 8: 380–391.
- [119] Jamshidinia M, Kong F, Kovacevic R. Numerical modeling of heat distribution in the electron beam melting of Ti-6Al-4V[J]. *J. Manuf. Sci. Eng.*, 2013, 135(6): 061010.
- [120] Yang X F. Efficient linear, stabilized, second-order time marching schemes for an anisotropic phase field dendritic crystal growth model[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2019, 347: 316–339.
- [121] Li Y B, Qin K, Xia Q, Kim J. A second-order unconditionally stable method for the anisotropic dendritic crystal growth model with an orientation-field[J]. *Appl. Numer. Math.*, 2023, 184: 512–526.

- [122] Brown A C, De Beer D. Development of a stereolithography (STL) slicing and G-code generation algorithm for an entry level 3-D printer, 2013 Africon. IEEE, 2013: 1–5.
- [123] Abdulhameed O, Al-Ahmari A, Ameen W, Mian S H. Additive manufacturing: Challenges, trends, and applications[J]. *Adv. Mech. Eng.*, 2019, 11(2): 1687814018822880.
- [124] Alinejad N, Kazemi S H, Odnevall I. SLM-processed MoS₂/Mo₂S₃ nanocomposite for energy conversion/storage applications[J]. *Sci. Rep.*, 2022, 12(1): 5030.
- [125] Liverani E, Toschi S, Ceschini L, Fortunato A. Effect of selective laser melting (SLM) process parameters on microstructure and mechanical properties of 316L austenitic stainless steel[J]. *J. Mater. Process. Technol.*, 2017, 249: 255–263.
- [126] Papazoglou E L, Karkalos N E, Karmiris-Obreatański P, Markopoulos A P. On the modeling and simulation of SLM and SLS for metal and polymer powders: A review[J]. *Arch. Comput. Methods Eng.*, 2022: 1–33.
- [127] Weirather J, Rozov V, Wille M, Schuler P, Seidel C, Adams N A, Zaeh M F. A smoothed particle hydrodynamics model for laser beam melting of Ni-based alloy 718[J]. *Comput. Math. Appl.*, 2019, 78(7): 2377–2394.
- [128] Yu T, Zhao J. Semi-coupled resolved CFD-DEM simulation of powder-based selective laser melting for additive manufacturing[J]. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2021, 377: 113707.
- [129] Cheng J, Xia Q, Kim J, Li Y. An efficient linear and unconditionally stable numerical scheme for the phase field sintering model[J]. *Commun. Nonlinear Sci.*, 2023, 127: 107529.
- [130] Li L, Li J Q, Fan T H. Phase-field modeling of wetting and balling dynamics in powder bed fusion process[J]. *Phys. Fluids*, 2021, 33(4).
- [131] Wang S L, Sekerka R F, Wheeler A A, Murray B T, Coriell S R, Braun R, McFadden G. Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1993, 69(1–2): 189–200.