

分类号 \_\_\_\_\_ 密级 \_\_\_\_\_

UDC \_\_\_\_\_ 编号 \_\_\_\_\_

# 大连理工大学

## 博士后研究报告

基于隐式表示的复杂结构高效设计与优化

胡江北

工作完成日期 2021 年 7 月—2024 年 7 月

报告提交日期 2024 年 7 月

大连理工大学（辽宁）

2024 年 7 月



# 基于隐式表示的复杂结构高效设计与优化

Efficient Design and Optimization of Complex Structures Based on Implicit  
Representations

博 士 后 姓 名 胡江北

流动站（一级学科）名称 计算机科学与技术

专 业（二级学科）名称 计算机应用技术

研究工作起始时间 2021 年 7 月 31 日

研究工作期满时间 2024 年 7 月 7 日

大连理工大学人事处（辽宁）

2024 年 7 月



## 摘要

拓扑优化利用计算手段优化材料分布，旨在获得预期性能并满足特定约束的结构，是现代智能制造领域的重要设计方法。然而，拓扑优化过程中产生的结构通常具有非常复杂的几何与拓扑特征，给结构的表示、分析和优化都带来了极大的挑战。本工作利用隐式表示灵活性和可微分性的特点，针对不同的结构设计目标和约束，以提高算法效率和应用可扩展性为目的，开展了以下创新性研究工作：

(1) 传统显式方法在设计多样化、轻量化和物理可靠的薄壳结构时仍存在诸多挑战，针对于此，本文通过开发一种新颖的隐式设计框架，实现了在薄壳结构上的高效雕刻设计。基于参数化表示的雕刻模板（包括规则、非规则和个性化三种），本文通过优化模板尺寸和方向等参数，达到在指定材料消耗下的结构刚度最大化。本文的方法通过完全的隐式函数操作完成结构的表示、分析和优化，避免了传统有限元方法中繁琐耗时的重新网格化步骤，极大地提高了薄壳结构的设计效率。

(2) 空心化通过从三维模型内部体积中去除材料来实现轻量化，同时还可保持可行的机械性能。然而，空心化模型在增材制造过程中往往需要额外的支撑材料，大大抵消了轻量化效果。本文提出了两种创新方法以解决该问题：第一种使用基于椭球体的连续函数表示，设计和优化自然具有自支撑性的空心化结构，本文提出了一种高效的优化策略，以确定椭球空腔的形状、位置和拓扑结构，旨在实现最小化材料成本、最大化结构刚度和确保自支撑性等多种目标；第二种通过一种高效的可微分通道设计框架，以连通空心腔体使其能够顺利导出打印过程中残留在腔体内的制造材料。

(3) 拓扑优化较高的计算复杂性和周期较长的迭代过程严重影响了效率，这给其实际应用都带来了严重阻碍。为了解决这一挑战，本文提出了创新框架 IF-TONIR，利用神经网络隐式表示复杂结构形状，并基于数据驱动的方式实现端到端的拓扑优化，能够从不同设计域的不同边界条件直接预测最优化结构。此外，本文提出了基于持续同调技术的拓扑损失函数来训练网络模型，有效惩罚了预测结构中断裂的存在，从而提高了生成结构的整体物理可靠性。

本文研究提出的基于隐式方法的复杂结构表示、分析和优化方法，具有计算效率高、设计效率高和适用性强等优点，有望在工程设计领域得到广泛应用，推动相关领域的技术进步。

**关键词：**拓扑优化；隐式表示；变分自编码器，薄壳结构；自支撑结构

## Abstract

Topology optimization utilizes computational methods to optimize material distribution, aiming to obtain structures with expected performance and specific constraints. It is an important design method in the field of modern intelligent manufacturing. However, the structures generated during the topology optimization process often have very complex geometric and topological features, posing great challenges to the representation, analysis, and optimization of the structures. This work leverages the flexibility and differentiability of implicit representations to address different structural design objectives and constraints, with the goal of improving algorithmic efficiency and application scalability. The following innovative research work has been carried out:

(1) Traditional explicit methods still face many challenges when designing diverse, lightweight, and physically reliable thin-shell structures. To address this, this paper develops a novel implicit design framework to achieve efficient carving design on thin-shell structures. Based on parameterized carving templates (including regular, irregular, and personalized types), this paper optimizes template size, orientation, and other parameters to maximize structural stiffness under specified material consumption. The method in this paper completes the representation, analysis, and optimization of the structure through fully implicit function operations, avoiding the tedious and time-consuming remeshing steps in traditional finite element methods, greatly improving the design efficiency of thin-shell structures.

(2) Hollowing achieves lightweight design by removing material from the internal volume of three-dimensional models while maintaining feasible mechanical performance. However, hollowed models often require additional support materials during the additive manufacturing process, greatly offsetting the lightweight effect. This paper proposes two innovative methods to solve this problem: The first uses a continuous function representation based on ellipsoids to design and optimize naturally self-supporting hollowed structures. An efficient optimization strategy is proposed to determine the shape, position, and topological structure of ellipsoidal cavities, aiming to achieve multiple objectives such as minimizing material cost, maximizing structural stiffness, and ensuring self-supportability. The second method uses an efficient differentiable channel design framework to connect hollow cavities, allowing for smooth extraction of manufacturing

---

## Abstract

---

materials remaining inside the cavities during the printing process.

(3) The high computational complexity and long iterative process of topology optimization seriously affect efficiency, posing significant obstacles to its practical application. To address this challenge, this paper proposes an innovative framework, IFTONIR, which utilizes neural networks to implicitly represent complex structural shapes and achieves end-to-end topology optimization based on a data-driven approach, enabling direct prediction of optimized structures from different design domains and boundary conditions. Furthermore, this paper proposes a topology loss function based on persistent homology techniques to train the network model, effectively penalizing the existence of discontinuities in the predicted structures, thus improving the overall physical reliability of the generated structures.

The complex structure representation, analysis, and optimization methods based on implicit approaches proposed in this research have advantages such as high computational efficiency, high design efficiency, and strong applicability. They are expected to be widely applied in the field of engineering design, promoting technological progress in related fields.

**Keywords:** Topology Optimization; Implicit Representations; Variational Auto-Encoder; Thin-Shell Structures; Self-Supporting Structures

目 次

插图清单.....	VI
附表清单.....	VIII
第 1 章 绪论 .....	1
1.1 拓扑优化 .....	1
1.2 结构表示 .....	1
1.3 物理信息神经网络 .....	1
第 2 章 基于隐式表示的薄壳结构雕刻设计 .....	2
2.1 引言 .....	2
2.2 研究方法 .....	3
2.2.1 参数化设计 .....	3
2.2.2 优化问题的形式和求解 .....	8
2.3 实验和讨论 .....	11
2.3.1 有效性验证 .....	11
2.3.2 效果及比较实验 .....	11
2.3.3 3D 打印及物理验证 .....	14
2.3.4 应用 .....	14
2.4 本章小结 .....	16
第 3 章 基于隐式表示的自支撑空心化轻量结构设计 .....	17
3.1 引言 .....	17
3.2 研究方法 .....	18
3.2.1 自支撑空心结构设计 .....	18
3.2.2 自支撑空心化模型的函数表示 .....	19
3.2.3 优化问题的形式及求解 .....	20
3.2.4 优化求解过程 .....	23
3.3 实验和讨论 .....	24
3.3.1 有效性和效率性 .....	24
3.3.2 比较和讨论 .....	25
3.4 本章小结 .....	29

## 目 次

---

<b>第 4 章 基于隐式神经表示的端到端拓扑优化方法 .....</b>	<b>30</b>
<b>4.1 引言 .....</b>	<b>30</b>
<b>4.2 预备知识 .....</b>	<b>32</b>
<b>4.2.1 拓扑优化一般形式 .....</b>	<b>32</b>
<b>4.2.2 结构的隐式表示 .....</b>	<b>33</b>
<b>4.2.3 基于立方复形的持续同调分析 .....</b>	<b>34</b>
<b>4.3 研究方法 .....</b>	<b>35</b>
<b>4.3.1 数据集 .....</b>	<b>35</b>
<b>4.3.2 网络结构 .....</b>	<b>36</b>
<b>4.3.3 损失函数和评估指标 .....</b>	<b>40</b>
<b>4.3.4 训练和生成 .....</b>	<b>43</b>
<b>4.4 实验和分析 .....</b>	<b>43</b>
<b>4.4.1 超参数设置和收敛性 .....</b>	<b>43</b>
<b>4.4.2 性能评估 .....</b>	<b>45</b>
<b>4.4.3 消融实验 .....</b>	<b>45</b>
<b>4.4.4 比较实验 .....</b>	<b>48</b>
<b>4.5 本章小结 .....</b>	<b>50</b>
<b>参考文献 .....</b>	<b>51</b>
<b>致 谢 .....</b>	<b>56</b>
<b>声 明 .....</b>	<b>57</b>
<b>个人简历、发表的学术论文与科研成果 .....</b>	<b>58</b>

## 插图清单

图 2.1 基于隐式表示的薄壳（对偶）雕刻设计优化方法 .....	2
图 2.2 薄壳雕刻设计方法流程图 .....	3
图 2.3 规则图案模板示例 .....	4
图 2.4 基于 Voronoi 结构的非规则图案模板构造示意图 .....	5
图 2.5 个性化图案模板构造示意图 .....	6
图 2.6 薄板（对偶）雕刻算法流程示意图 .....	7
图 2.7 超单元策略示意图 .....	10
图 2.8 有效性与收敛性分析 .....	12
图 2.9 初值稳定性分析 .....	12
图 2.10 用规则、非规则和个性化图案模板（对偶）雕刻的更多结果 .....	13
图 2.11 本算法 (a-b) 和基于离散三角形的方法 <sup>[11]</sup> (c-d) 的比较 .....	13
图 2.12 通过 3D 打印制造的薄壳雕刻优化结构 .....	14
图 2.13 真实物理受力测试 .....	15
图 2.14 本文薄壳雕刻设计算法在医疗轻量化制造和家具设计中的应用 .....	15
图 3.1 自支撑空心化算法流程图 .....	18
图 3.2 自支撑椭球体示意图 .....	19
图 3.3 椭球空心化 3D 模型的函数表示 .....	19
图 3.4 2D 视角下的自动定位示意图 .....	20
图 3.5 算法流程 .....	21
图 3.6 尺寸参数 $s$ 的影响 .....	22
图 3.7 初始结构和优化结构的应力分布比较 .....	24
图 3.8 四个模型的收敛曲线 .....	24
图 3.9 与椭圆柱体结构方法 <sup>[29]</sup> 在相同填充比例下的比较实验 .....	25
图 3.10 与相关自支撑空心轻量化方法的比较 <sup>[30,32]</sup> .....	26
图 3.11 与相关非自支撑轻量化方法 <sup>[35,40]</sup> 的比较 .....	27
图 3.12 相同填充比例下不同方法 <sup>[30,32,35,40]</sup> 的 MVMS 比较直方图 .....	28
图 3.13 不同受力方向下的优化结构 .....	28
图 3.14 带有椭球形空腔的优化模型的 3D 打印结果 .....	29
图 3.15 3D 打印模型的实际应力测试 .....	29
图 4.1 IF-TOINR 算法整体框架图 .....	31

图 4.2 传统拓扑优化的一般流程 .....	32
图 4.3 基于 SDF 的结构表示 .....	33
图 4.4 基于持续同调技术的拓扑特征表示示意图 .....	35
图 4.5 数据集准备 .....	36
图 4.6 网络输入数据信息构成 .....	38
图 4.7 拓扑损失 $\mathcal{L}_{topo}$ 的说明 .....	41
图 4.8 几何损失和拓扑损失的比较 .....	42
图 4.9 IF-TONIR 的训练过程 .....	45
图 4.10 训练数据集上的测试结果 .....	46
图 4.11 测试数据集上的测试结果 .....	46
图 4.12 拓扑损失的消融实验结果 .....	47
图 4.13 点属性和物理场的消融实验结果 .....	47
图 4.14 IF-TONIR 与其他生成模型的比较 .....	49
图 4.15 IF-TONIR 可以生成任意分辨率下的结构 .....	49

## 附表清单

表 2.1 本文算法与商业软件（ANSYS）在性能上的比较结果。 .....	13
表 3.1 实验结果表：优化数据和时间 .....	26
表 3.2 相关方法的定性比较 .....	27
表 4.1 用于生成数据集的参数设置 .....	37
表 4.2 用于提取物理场特征的 CNN 网络架构 .....	39
表 4.3 用于生成最优结构的解码器 .....	39

## 符号表

$\mathbf{r} = (x, y, z)$	空间坐标
$\mathbf{R}$	旋转矩阵
$\mathbf{n}$	外法向量
$\Phi(\mathbf{r})$	隐式场
$\mathbf{f}$	体积力
$H(x)$	Heaviside 函数
$\mathbf{u}$	位移场
$\overline{V}$	体积约束
$\Gamma_u$	Dirichlet 边界
$\epsilon$	二阶线性应变张量
$\Xi$	弹性张量
$a, b, c$	椭球轴长
$\mathbf{z}_i$	结构潜在编码
$\Phi_E, \Phi_D$	编码器、解码器



## 第1章 绪论

- 1.1 拓扑优化
- 1.2 结构表示
- 1.3 物理信息神经网络

## 第2章 基于隐式表示的薄壳结构雕刻设计

### 2.1 引言

薄壳结构以其纤薄和弯曲的形状承载载荷，这种结构特别优雅和高效。它们在我们的生活中以各种尺寸广泛存在，在满足力学性能的同时提供了艺术美感的视觉体验<sup>[1-2]</sup>。近年来，基于壳体结构的曲面设计受到艺术家和研究人员的广泛关注<sup>[3-5]</sup>。其中，雕刻是设计壳体结构的一种流行方式<sup>[6-7]</sup>。经过精巧的雕刻设计，壳体结构可以具有更高的艺术感，并在医疗和轻量化应用中得到广泛实践<sup>[8-9]</sup>。

现代计算机图形学技术的发展已经引领了壳体结构雕刻设计方法的日益多样化，例如基于纹理合成的方法<sup>[10]</sup>，基于镶嵌的方法<sup>[3]</sup>和基于重复模板的方法<sup>[11]</sup>。作为一种材料减少过程，雕刻设计的核心问题是在设计过程中维持壳体结构的力学性能和功能。现有的大多数方法都侧重于显式表示，如多边形网格等，这不利于结构分析和参数优化。由于雕刻壳体结构的拓扑和几何结构高度复杂，采用传统有限元方法(FEM)<sup>[12-13]</sup>进行力学响应分析非常耗时。此外，在现有的设计技术中，设计、分析和优化通常是分离的，在不同阶段经常需要重复重新划分网格<sup>[14]</sup>。由于缺乏统一的表示方法和有效的优化技术，在壳体结构上进行雕刻设计并非易事。

本文研究提出了一种隐式参数化方法来设计轻量级薄壳结构，并通过参数优化保证结构的物理可靠性，如图 2.1 所示。具体地，通过在输入薄壳结构上分布重复模板图案并对其进行雕刻来完成设计，用隐式表示的薄壳结构的模板图案可以直接用函数进行设计、分析和优化，本文通过优化模板图案的尺寸和方向等属性，在雕刻设计的同时最大化壳体结构的刚度。与基于传统有限元的网格方法相比，本文方法由于避免了显式模型的生成和分析过程中的重新网格剖分，在保证足够精度的前提下大大提高了计算效率。此外，本文还通过对图案模板的不同函数操作，实现了对偶雕刻设计，进一步增强了薄壳结构设计的丰富性。本文通过在多种薄壳结构模型上的测试，并实施了仿真和对比试验来证明该方法的有效性和高效性。

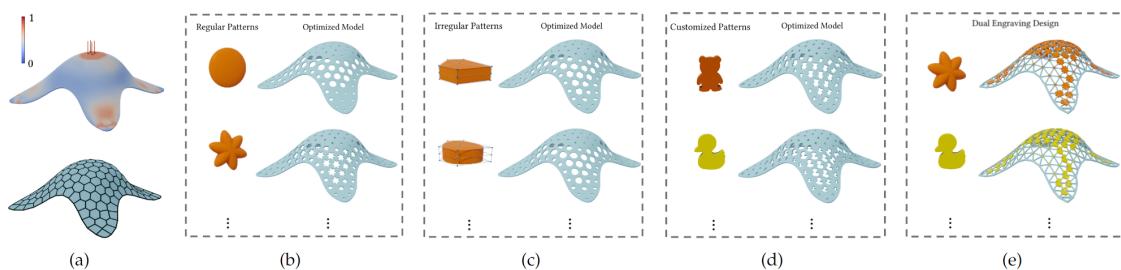


图 2.1 基于隐式表示的薄壳（对偶）雕刻设计优化方法

## 2.2 研究方法

本方法基于结构的隐式表示设计了一种用于薄壳结构雕刻设计的参数化方法，算法流程如图 2.2 所示。首先，使用函数表示构建三种类型的图案模板，包括规则图案、不规则图案和用户指定的个性化图案。这些图案模板具有可调整的属性，例如位置、方向和大小，可以通过参数控制（第 2.2.1 节）。然后，将这些模板图案用于壳体结构的雕刻。由于使用有向距离场（SDF）表示输入壳体，因此可以在图案模板和壳体模型之间执行函数布尔运算。最后，为了确保雕刻壳体结构的完整性，引入了结构力学问题的优化模型。以最小应变能为目标，给定体积为约束，该框架可以根据结构响应分析优化图案的属性变量。优化后的（对偶）雕刻壳体结构可以简单地用函数的零等值面表示（第 2.2.2 节）。在各种壳体模型上成功实现了该算法，并进行了多组实验，验证了该框架的有效性和鲁棒性（第 2.3 节）。

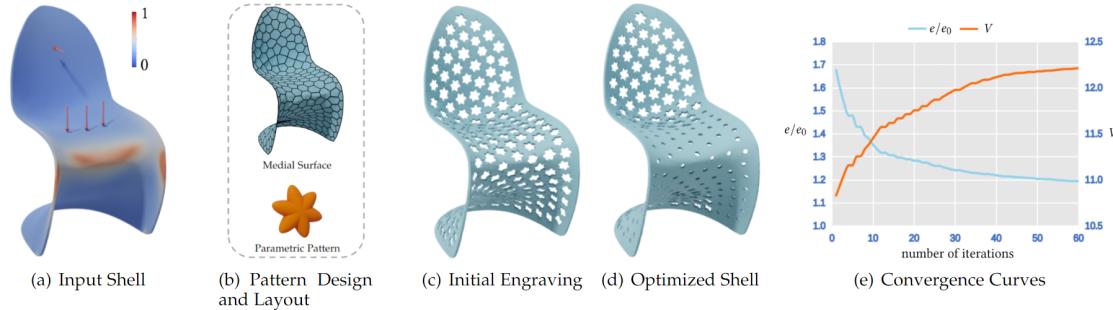


图 2.2 薄壳雕刻设计方法流程图

### 2.2.1 参数化设计

本文算法采用隐式函数来表示输入模型和图案模板，从而将复杂的结构优化转化为可控参数设计问题，如此便可以高效、鲁棒和可扩展的方式进行结构的设计和优化。

#### 2.2.1.1 图案模板设计

本文提出了三种用于薄壳结构雕刻设计的图案模板类型，包括规则图案、非规则图案和个性化图案，所有这些图案都可以用隐式函数表示。

**规则图案模板。** 首先考虑旋转对称的规则图案，并使用超椭球方程构造它们，

$$E(\mathbf{r}) = \left( \frac{\hat{x}}{L_1} \right)^p + \left( \frac{\hat{y}}{L_2} \right)^p + \left( \frac{\hat{z}}{L_3} \right)^p - 1, \quad (2.1)$$

其中  $\mathbf{r} = (x, y, z)^\top \in \Omega$  为三维空间  $\mathbb{R}^3$  中的设计域， $\mathbf{c}_0 = (x_0, y_0, z_0)^\top$  是超椭球的中心坐标。定义  $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})^\top = \mathbf{R}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_0)$ ，其中  $\mathbf{R} = \{R_{ij}\}_{3 \times 3}$  为旋转矩阵用于调整超

椭球的方向。 $L_1$ ,  $L_2$ , 和  $L_3$  是超椭球的三个轴长,  $p$  是形状因子, 是一个大于零的偶数。当  $p$  增大时, 超椭球逼近一个长方体。

通过控制少量参数, 多个超椭球可以构成丰富复杂的图案结构。可以在局部坐标系中围绕其中心点旋转一个超椭球, 以获得新的图案, 如图 2.3 所示。具体地, 假设一个规则图案模板是由  $n$  个超椭球  $\{E_i\}_{i=1}^n$  组成, 第  $k$  个超椭球的旋转角度为  $\frac{k\pi}{n}$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ 。因此, 可通过旋转矩阵  $\Lambda(\frac{k\pi}{n})\mathbf{R}$  计算超椭球  $E_k$  的方向, 其中  $\Lambda(\theta)$  是绕  $z$  轴旋转矩阵:

$$\Lambda(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

最终, 规则图案模板就表示为这些超椭球  $\{E_i\}_{i=1}^n$  的布尔并, 即函数形式:

$$P(\mathbf{r}) = \min(E_1, E_2, \dots, E_n). \quad (2.3)$$

总的来说, 一个规则图案模板具有可设计变量  $\{\mathbf{c}_0, L_1, L_2, L_3, \mathbf{R}, n, p\}$ , 可以根据应用需求优化这些参数来控制雕刻壳体结构的艺术和物理属性。

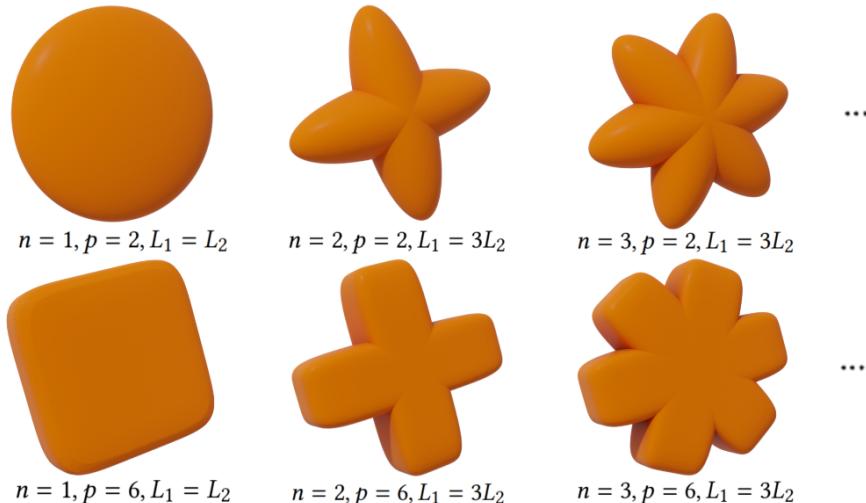


图 2.3 规则图案模板示例

**非规则图案模板。** 非规则图案具有自由的轮廓, 本文用连续函数表示这些图案。具体地, 采用被广泛使用的 Voronoi 结构图案, 将 Voronoi 图的顶点设置为初始控制点, 利用 B-样条来表示非规则图案。如图 2.4 所示, 给定一个 Voronoi 单元, 其顶点为  $\{\mathbf{p}_i^0\}_{i=1}^m$ , 质心为  $\mathbf{c}_0 = (x_0, y_0, z_0)^\top$ , 外法向量为  $\mathbf{n}$ , 则可以设置新的图案控制

点为

$$\mathbf{p}_i = s\mathbf{p}_i^0 + (1-s)\mathbf{c}_0, \quad (2.4)$$

其中  $0 < s < 1$  是一个偏移因子。为了使用 B 样条构造一个封闭的模板曲面，设计

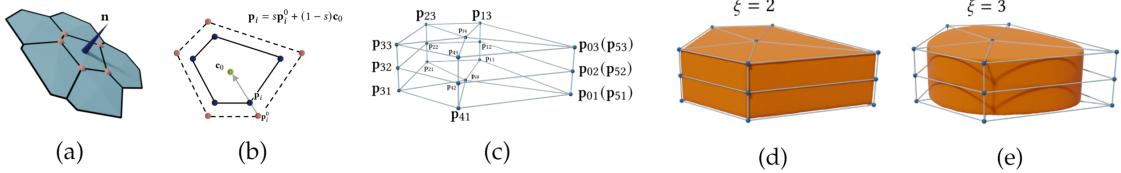


图 2.4 基于 Voronoi 结构的非规则图案模板构造示意图

控制网格如下(见图 2.4(c)):

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{i0} &= \mathbf{c}_0 - \frac{h_0}{2}\mathbf{n}, \quad i = 0, 1, \dots, m, \\ \mathbf{p}_{i1} &= \mathbf{p}_i - \frac{h_0}{2}\mathbf{n}, \quad i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{p}_{01} = \mathbf{p}_{m1}, \\ \mathbf{p}_{i2} &= \mathbf{p}_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{p}_{02} = \mathbf{p}_{m2}, \\ \mathbf{p}_{i3} &= \mathbf{p}_i + \frac{h_0}{2}\mathbf{n}, \quad i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{p}_{03} = \mathbf{p}_{m3}, \\ \mathbf{p}_{i4} &= \mathbf{c}_0 + \frac{h_0}{2}\mathbf{n}, \quad i = 0, 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (2.5)$$

其中  $h_0$  是输入薄壳结构的厚度。然后，一个非规则图案模板就可以隐式表示为：

$$P(\mathbf{r}) = \|\mathbf{r} - \mathbf{c}_0\| - d(u, v) = 0, \quad (2.6)$$

其中  $d(u, v)$  是距离函数，可以按如下插值形式：

$$d(u, v) = \left\| \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^4 N_{i,\xi}(u) N_{j,\eta}(v) \mathbf{p}_{ij} - \mathbf{c}_0 \right\|, \quad (2.7)$$

其中  $\|\cdot\|$  是  $\mathbb{R}^3$  上的欧几里得范数， $N_{i,\xi}(u)$  和  $N_{j,\eta}(v)$  是带有曲面参数  $u$  和  $v$  的 B 样条基函数<sup>[15]</sup>。方法中设置  $u \in [-\pi, \pi]$ ,  $v \in [0, \pi]$  并采用均匀间隔的结点。 $\xi$  和  $\eta$  是 B 样条基函数的阶数。在实验中， $\eta = 2$ ,  $\xi$  用于控制非规则图案的光滑度。对于非规则图案，可控制的设计变量是  $\{\mathbf{c}_0, s, \xi\}$ 。

**个性化图案模板。** 个性化图案模板具有用户可自定义的轮廓，它们应该是一个薄片平面模型，其厚度与输入壳结构的厚度有关。为了以标准化的方式构建定制图案，本文计算了包围图案二维轮廓的最小圆<sup>[16]</sup>，并通过圆的半径限制图案的尺寸。以最小圆的圆心为局部坐标系的中心，通过沿  $z$  轴偏移平面模型，可以获得厚度为  $h_0$  的个性化图案。为了统一函数表示，本文使用径向基函数拟合定制图案。类似地，本文应用缩放因子  $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)^\top$  和旋转矩阵  $\mathbf{R}$  来控制图案的大小和方

向。最后，将定制图案表示为拟合函数的零等值面

$$P(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^m \omega_i \varphi(\|\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_i\|) + Q(\hat{\mathbf{r}}) = 0, \quad (2.8)$$

其中  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{s}^\top \mathbf{R}(\mathbf{r} - \mathbf{c}_0)$ ,  $\mathbf{c}_0 = (x_0, y_0, z_0)$  是模板的中心坐标,  $\{\mathbf{r}_i\}_{i=1}^m$  是图案模板所占空间中均匀采样得到的点 (默认  $m = 1000$ ),  $\varphi(t) = t^2 \log(t)$  是薄板样条基函数,  $Q(\mathbf{r}) = \omega_{m+1}x + \omega_{m+2}y + \omega_{m+3}z + \omega_{m+4}$ ,  $\{\omega_i\}_{i=1}^{m+4}$  是拟合系数。如图 2.5 所示, 个性

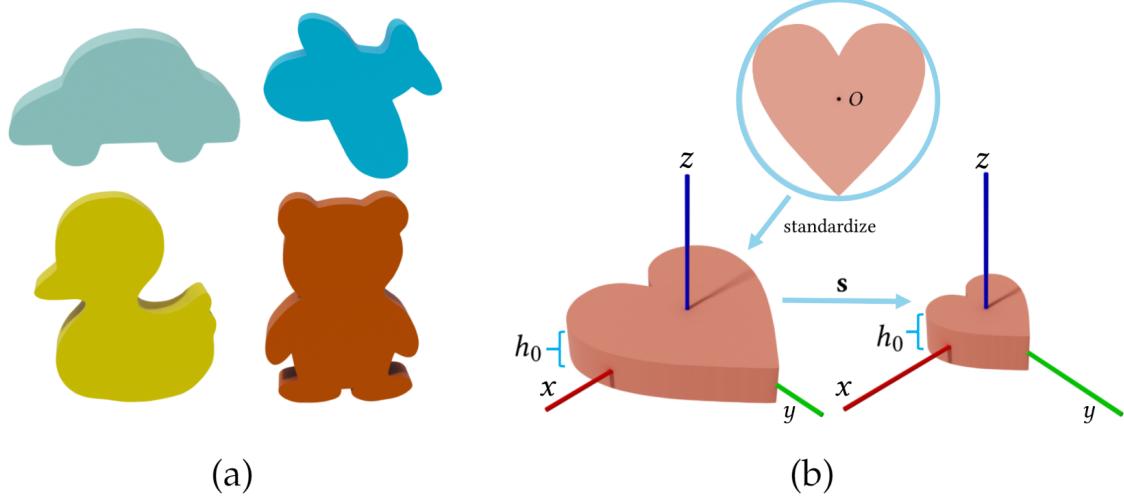


图 2.5 个性化图案模板构造示意图

化图案模板的设计变量是  $\{\mathbf{c}_0, s_x, \mathbf{R}\}$ 。其中, 模板的厚度不会随着缩放而改变, 即  $s_x = s_y$  和  $s_z = 1$ 。

### 2.2.1.2 雕刻设计

在薄壳上雕刻图案模板, 是通过输入壳体与图案模板之间布尔运算的实现。得益于基于函数的表示, 复杂的布尔运算可以简化为函数的最小值计算。图案模板的主要特征有位置、定向和尺寸等。具体的:

**图案模板的位置。** 在薄壳结构上分配图案模板的位置是至关重要的, 如图 2.6 (b) 所示, 首先在薄壳结构的中心表面上利用 Lloyd 算法<sup>[17]</sup>计算一个受限的 Voronoi 图, 然后将图案模板放置在 Voronoi 单元的质心处  $\{\mathbf{c}_0^i = (x_0^i, y_0^i, z_0^i)\}_{i=1}^{N_p}$ ,  $N_p$  是图案模板的数量。Voronoi 镶嵌已广泛应用于壳体设计, 并与设计的非规则图案模板兼容。本文提出的框架可以用于直接优化图案的位置, 然而, 优化变量和计算成本将急剧增加。因此, 本文利用 Voronoi 图来简化算法的计算。未来将研究探索一种更高效、更优化的方法来确定图案的位置。



图 2.6 薄板（对偶）雕刻算法流程示意图

**图案模板的定向。** 图案的方向包括两个步骤: 分别设置局部坐标系中  $z$  轴方向和  $xy$  平面上的旋转方向。首先, 通过方向矩阵  $\mathbf{R}_i^z$  旋转图案, 使局部坐标系的  $z$  轴方向与中心面上相应 Voronoi 单元的法向量  $\{\mathbf{n}_c^i\}_{i=1}^{N_p}$  对齐。特别地, 如果  $\mathbf{n}_c^i = \mathbf{z}_0$ , 其中  $\mathbf{z}_0 = (0, 0, 1)^T$ , 则方向矩阵  $\mathbf{R}_i^z = \mathbf{I}_{3 \times 3}$ ; 否则,  $\mathbf{R}_i^z$  可以计算为

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_z^i &= \mathbf{n}_c^i, \\ \mathbf{n}_x^i &= \frac{\mathbf{n}_x^i \times \mathbf{z}_0}{\|\mathbf{n}_x^i \times \mathbf{z}_0\|}, \\ \mathbf{n}_y^i &= \frac{\mathbf{n}_z^i \times \mathbf{n}_x^i}{\|\mathbf{n}_z^i \times \mathbf{n}_x^i\|}, \\ \mathbf{R}_i^z &= (\mathbf{n}_x^i, \mathbf{n}_y^i, \mathbf{n}_z^i)^T.\end{aligned}\quad (2.9)$$

然后, 根据旋转角度旋转图案模板, 确定局部坐标系中  $xy$  平面上模板的方向。因此, 图案模板的方向可以通过旋转矩阵确定, 如下所示:

$$\mathbf{R}_i = \Lambda(\alpha_i) \mathbf{R}_i^z, \quad (2.10)$$

其中,  $\{\alpha_i\}_{i=1}^{N_p}$  是可设计的旋转角度。此外, 本文提出的方法允许通过生成方向场<sup>[18]</sup>来确定旋转角度, 如图 2.6 (c) 所示, 规则的方向场可以实现更美观的图案模板分布。

**图案模板的尺寸。** 图案模板应限制在相应的 Voronoi 单元内, 以避免相交。此外, 相邻图案模板不应太近以保证可打印性和可用性。因此, 算法将第  $i$  个图案的最大尺寸长度设置为

$$L_{\max}^i = e_b^i - \epsilon/2, \quad (2.11)$$

其中,  $e_b^i$  是当前中心点与 Voronoi 单元边界之间的最小距离,  $\epsilon$  是最小打印精度。图案的最小尺寸长度可根据应用需求指定。在本文的实验中, 默认设置第  $i$  个图案的最小尺寸长度  $L_{\min}^i$  为输入壳体厚度的一半。

**薄壳雕刻操作。** 为了隐式设计薄壳结构, 本文使用有向距离函数  $\phi_{\text{shell}}(\mathbf{r})$  表示输入的壳体模型。在壳体上进行雕刻设计就是要移除壳体的部分区域, 由于图案和

输入壳体都用函数表示，复杂的布尔运算可以转化为以下简单计算：

$$\Phi^E(\mathbf{r}) = \min(\phi_{\text{shell}}(\mathbf{r}), P_1(\mathbf{r}), P_2(\mathbf{r}), \dots, P_{N_p}(\mathbf{r})), \quad (2.12)$$

其满足：

$$\Phi(\mathbf{r}) \begin{cases} > 0, & \text{如果 } \mathbf{r} \text{ 在雕刻模型的内部,} \\ = 0, & \text{如果 } \mathbf{r} \text{ 在雕刻模型的边界,} \\ < 0, & \text{如果 } \mathbf{r} \text{ 在雕刻模型的外部.} \end{cases} \quad (2.13)$$

雕刻后的壳体结构是函数  $\Phi(\mathbf{r})$  的零等值面，如图 2.6(e) 所示。

**薄壳对偶雕刻操作。** 与所提出的算法兼容另一种薄壳结构设计方式是，将与壳体相交的图案模板部分保留为实体而不是挖空，我们称之为对偶雕刻设计。在本研究中，通过简单的函数修改实现对偶雕刻，所有保留的实体部分可表示为：

$$\begin{aligned} \phi_{\text{retain}} &= \max(\tilde{P}_1(\mathbf{r}), \tilde{P}_2(\mathbf{r}), \dots, \tilde{P}_{N_p}(\mathbf{r})), \\ \tilde{P}_i(\mathbf{r}) &= \min(\phi_{\text{shell}}(\mathbf{r}), -P_i(\mathbf{r})), \quad i = 1, 2, \dots, N_p. \end{aligned} \quad (2.14)$$

为了将各个图案模板之间连接起来，算法使用 Voronoi 镶嵌的对偶 Delaunay 三角形的边构建一组桁架结构，如图 2.6(b) 所示。对于开放曲面，还需要添加边来连接 Delaunay 三角形的边界点和 Voronoi 镶嵌的边界点。假设 Delaunay 三角形具有边集  $\{e_i\}_{i=1}^{N_e}$ ，使用公式 (2.1) 中描述的超椭球方程构建桁架结构：

$$\begin{aligned} \phi_{\text{truss}} &= \max(\tilde{E}_1(\mathbf{r}), \tilde{E}_2(\mathbf{r}), \dots, \tilde{E}_{N_e}(\mathbf{r})), \\ \tilde{E}_i(\mathbf{r}) &= \min(\phi_{\text{shell}}, E_i(\mathbf{r})), \quad i = 1, 2, \dots, N_e, \end{aligned} \quad (2.15)$$

其中， $E_i(\mathbf{r}) i = 1^{N_e}$  是一系列超椭球，将每条边的中点设置为相应超椭球的中心，边的方向决定了旋转矩阵  $\mathbf{R} = Rij_{3 \times 3}$ ， $L_2$  设置为边长的一半， $L_1$  和  $L_3$  被释放以优化调整桁架结构的局部厚度。对于桁架的构建，设置  $p = 8$ 。在本文的实验中， $L_1$  和  $L_3$  根据输入壳体在外部载荷下的应变能分布来分配。最终，对偶雕刻可以隐式表示为

$$\Phi^{DE}(\mathbf{r}) = \max(\phi_{\text{retain}}, \phi_{\text{truss}}). \quad (2.16)$$

类似地，提取函数  $\Phi^{DE}(\mathbf{r})$  的零等值面以获得对偶雕刻壳体结构，如图 2.6(f) 所示。

## 2.2.2 优化问题的形式和求解

上述介绍的薄壳结构（对偶）雕刻设计方法可应用于各种具有物理可行性的应用，例如家具设计、医疗器械优化和轻质复合结构。而为了使设计的薄壳结构能够满足特定的物理需求，需要根据目标和约束条件对设计变量进行优化。基于

隐式表示，本算法实现了基于函数计算的高效自动优化，本节将具体介绍针对机械应用的数学优化问题形式。

### 2.2.2.1 问题形式

结构柔度是一种衡量全局结构刚度的物理量，通常用于经典拓扑和结构优化<sup>[19-20]</sup>。引入形状描述函数  $\Phi(\mathbf{r})$ ，可以定义结构柔度为

$$I = \int_{\Omega_S} H(\Phi(\mathbf{r})) \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} dS, \quad (2.17)$$

其中  $\Omega_S$  是被输入薄壳结构  $S$  所占的区域， $\mathbf{f}$  是施加的体积力， $\mathbf{t}$  是施加在 Neumann 边界  $\Gamma_t$  上的表面力， $\mathbf{u}$  是位移， $H(\mathbf{r})$  是正则化的 Heaviside 函数<sup>[21]</sup>，如下定义，

$$H(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x > \eta, \\ \frac{3(1-\alpha)}{4} \left( \frac{x}{\eta} - \frac{x^3}{3\eta^3} \right) + \frac{(1+\alpha)}{2}, & \text{if } -\eta \leq x \leq \eta, \\ \alpha, & \text{if } x < -\eta, \end{cases} \quad (2.18)$$

其中， $\eta$  和  $\alpha$  是分别控制正则化程度和全局刚度矩阵非奇异性的参数。实验中，默认设置  $\alpha$  为 0.001，将  $\eta$  设置为输入壳模型最大尺寸的 1/50。算法以最小化结构柔度（公式 (2.17)）作为优化目标，并受体积约束  $\bar{V}$  的约束。

$$V = \int_{\Omega_S} H(\Phi(\mathbf{r})) dV \leq \bar{V}, \quad (2.19)$$

考虑静态力学问题，如果给定如下固定边界约束，

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}, \text{ on } \Gamma_u, \quad (2.20)$$

可以用弱变分形式表示平衡方程如下，

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_S} H(\Phi(\mathbf{r})) \mathbb{E} : \varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{v}) dV \\ &= \int_{\Omega_S} H(\Phi(\mathbf{r})) \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dV + \int_{\Gamma_t} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} dS, \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_{ad}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

其中， $\bar{\mathbf{u}}$  是 Dirichlet 边界  $\Gamma_u$  上的指定位移， $\mathbf{v}$  是定义在  $\Omega_S$  上的试验函数， $\mathcal{V}_{ad} = \{\mathbf{v} | \mathbf{v} \in W^1(\Omega_S), \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma_u\}$ ， $W^1$  是一阶 Sobolev 空间， $\varepsilon$  是二阶线性应变张量， $\mathbb{E}$  是由杨氏模量和泊松比定义的弹性张量。

### 2.2.2.2 计算和优化

雕刻后的壳体结构呈现复杂的拓扑和几何特征，从而导致计算复杂度高。基于有限元的传统优化方法需要在每次迭代中进行耗时的重新网格划分（四面体或六面体）。本文所提出的带有雕刻图案的壳体结构可以用函数表示，因此无需进行重

新网格划分来表示模型。只需构建一次统一的有限元作为积分域，即可直接在函数上执行积分和导数计算。此外，采用超级单元策略<sup>[22-23]</sup>可以加速计算。如图 2.7 所示，设计域  $\Omega_S$  被均匀划分为称为超级单元的粗糙、规则的六面体单元，用于插值位移场。随后，每个超级单元被均匀划分为称为背景单元的较小的规则六面体单元，用于以高分辨率精确描述几何形状。利用函数进行直接计算以及采用超级单元策略的积分域，优化过程的效率远高于传统的基于有限元的方法 (FEM)，尤其适用于复杂的雕刻壳体结构。

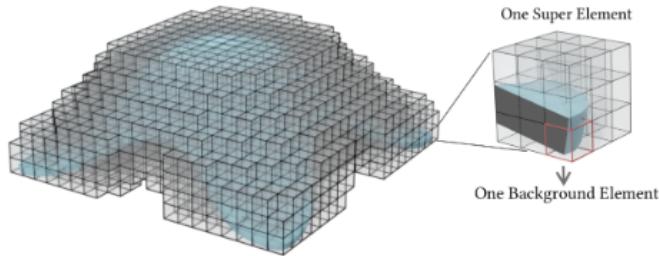


图 2.7 超单元策略示意图

有了上述离散化方案，可以将优化问题公式 (2.17-2.21) 重新表述为，

$$\min_{\Theta} \mathbf{F}^T \mathbf{U}, \quad (2.22)$$

$$\text{s.t.: } \mathbf{KU} = \mathbf{F}, \quad (2.23)$$

$$V = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_{l=1}^8 H(\Phi_l^j) v_b \leq \bar{V}, \quad (2.24)$$

其中， $\Theta$  是待优化的参数。在实验中，不同图案模板具有不同的设计参数，比如规则图案模板的参数为  $\Theta = \{\{L_1^i\}_{i=1}^{N_p}, \{\alpha_i\}_{i=1}^{N_p}\}$ ，非规则图案模板的参数为  $\Theta = \{s_i\}_{i=1}^{N_p}$ ，个性化图案模板的参数为  $\Theta = \{\{s_x^i\}_{i=1}^{N_p}, \{\alpha_i\}_{i=1}^{N_p}\}$ 。 $\mathbf{U}$  是位移向量， $\mathbf{F}$  是节点力向量， $N_b$  是背景单元的数量， $\mathbf{K}$  是刚度矩阵，其中第  $i$  个元素为

$$\mathbf{K}^i = \sum_{j=1}^{N_b} \frac{1}{8} \sum_{l=1}^8 (H(\Phi_l^j)) \mathbf{K}^0, \quad (2.25)$$

其中， $\Phi_l^j$  是  $\Phi(\mathbf{r})$  在第  $i$  个超单元的第  $j$  个背景单元中第  $l$  个节点处的值， $\mathbf{K}^0$  是每个背景单元中的常矩阵，

$$\mathbf{K}^0 = \epsilon_0 \mathbf{B}(\mathbf{r}_{ij})^T \mathbf{D}^0 \mathbf{B}(\mathbf{r}_{ij}) v_b, \quad (2.26)$$

其中， $\epsilon_0$  是原始弹性模量， $\mathbf{B}$  是应变矩阵， $\mathbf{r}_{ij}$  是第  $i$  个超单元的第  $j$  个背景单元中高斯积分点的坐标， $\mathbf{D}^0$  对应实体材料单元的本构矩阵， $v_b$  是一个背景单元的体积。由于只需要在每次迭代中更新系数  $\frac{1}{8} \sum_{l=1}^8 H(\Phi_l^j)$ ，因此可以在响应分析过程

中高效地组装刚度矩阵  $\mathbf{K}$ 。

本算法使用 GCMMA<sup>[24-25]</sup>求解优化问题 (2.22)，这是一种基于梯度的拓扑优化算法。得益于本算法的设计和表示都是基于隐式方法，可以直接在函数表示上计算目标函数和约束条件的梯度，如下所示，

$$\frac{\partial I}{\partial \Theta} = - \sum_{k=1}^{N_s} \mathbf{U}_k^T \left[ \frac{1}{8} \sum_{j=1}^{N_b} \left( \sum_{l=1}^8 \frac{\partial H(\Phi_l^{kj})}{\partial \Theta} \right) \mathbf{K}^0 \right] \mathbf{U}_k, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial V}{\partial \Theta} = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_{l=1}^8 \frac{\partial H(\Phi_l^j)}{\partial \Theta} v_b, \quad (2.28)$$

其中  $\Theta$  是待优化参数， $N_s$  和  $N_b$  分别是超单元和背景单元的数量。经实验验证，大部分的优化都可以在 120 步之内收敛。

## 2.3 实验和讨论

本算法通过在各种不同模型上的测试，验证了其有效性和性能。本节将展示一些实验结果，以展示算法的优势和应用潜力。

### 2.3.1 有效性验证

为验证分析的有效性，对比了有限元软件 ANSYS<sup>(1)</sup>和超级单元策略在相同载荷条件下得到的应变能量图。在 ANSYS 中使用默认的 SOLID186 单元 (20 节点二次位移实体单元) 对雕刻壳体结构进行网格划分。将结构优化问题表述为刚度最大化，比较了不同实验配置下结构的刚度值。为了公平性，采用归一化刚度  $e/e_0$  作为结构刚度的评价指标，与 Wu 等人<sup>[26]</sup>的做法一致，其中  $e_0$  为原始壳体结构的刚度。

如图 2.8 所示，不同粗细网格比 (超级单元/背景单元) 的结果能量分布均与 ANSYS 在同样模型上的结果相当，这证明了超单元方法在刚度最小化问题上的有效性和精确性。网格单元越细致，结果越精确，但计算时间也会相应增加。图 2.8 (e) 展示了在相同体积约束 (66%) 下，不同粗细网格比 (1 : 8、1 : 27 和 1 : 64) 的优化结果。在精度和效率之间权衡，实验中默认选择粗细网格比 1 : 27。

### 2.3.2 效果及比较实验

所提出的方法即使使用不同的初始值也能高效收敛。如图 2.9 所示，在相同的载荷条件和约束下，具有不同初始图案的壳体模型收敛到了相似的结果。为验证

<sup>(1)</sup> <https://www.ansys.com/>

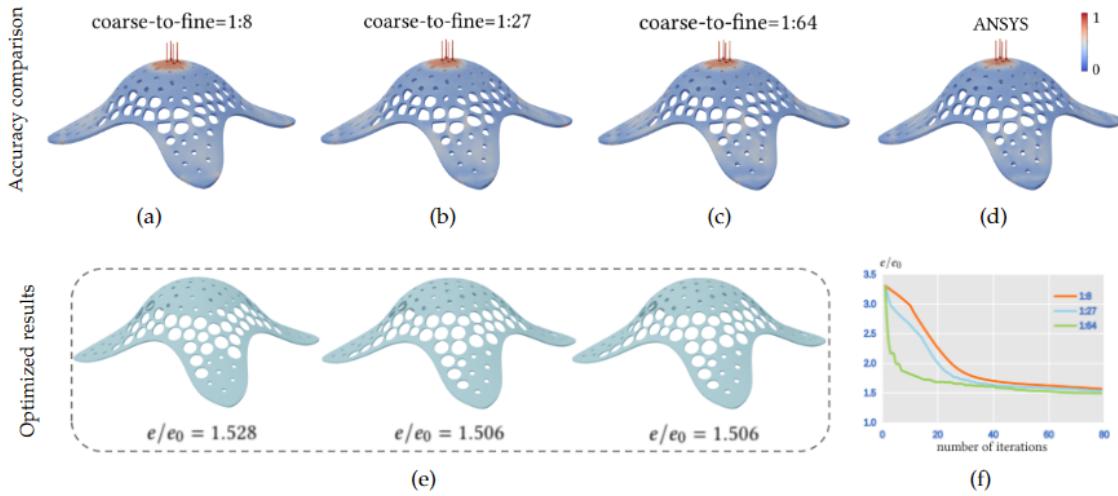


图 2.8 有效性与收敛性分析

所提出框架的鲁棒性，如图 2.10 所示，测试了更复杂的壳体模型，包含不同类型的图案。所有实验在 120 次迭代内都达到了收敛。

表 2.1 对比了 ANSYS(使用传统有限元法的标准商业软件) 和该方法的效果及效率。尽管与 ANSYS 的能量计算结果存在数值差异，但从图 2.8 可以看出，相对能量分布是可比的。本算法方案能够准确地找到结构的易损区域并对其进行优化，同时，该方法的优化时间远低于 ANSYS，因为省略了每次迭代中耗时的重新网格化过程。

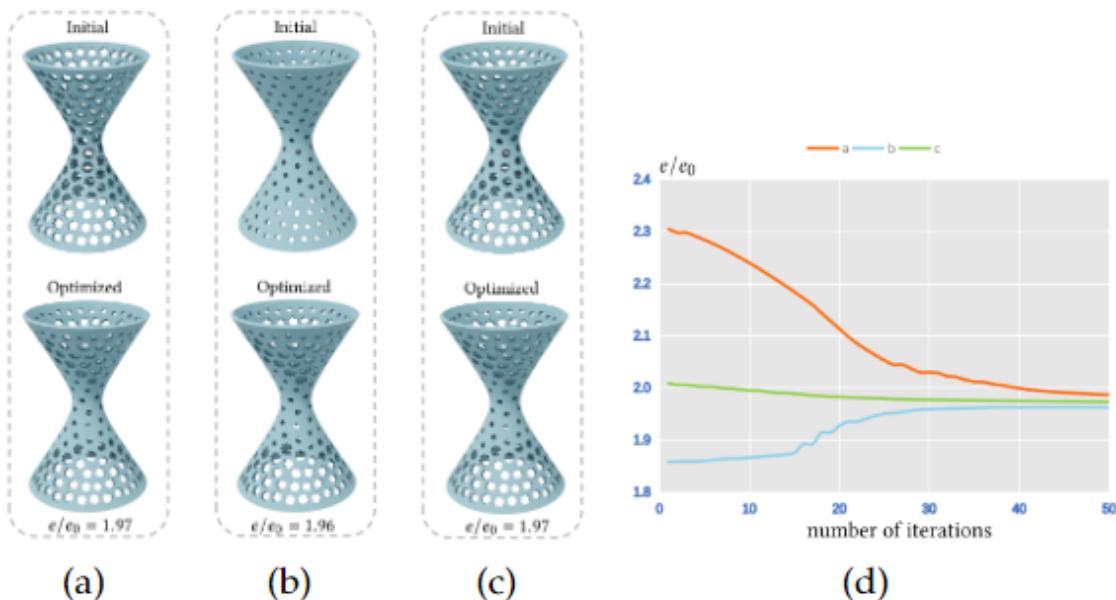


图 2.9 初值稳定性分析

实验还与基于离散三角形单元的方法<sup>[11]</sup>进行了对比对比，如图 2.11 所示，该方法提出了一种基于示例纹理合成的参数化算法用于模板绘制，这是一种在离散

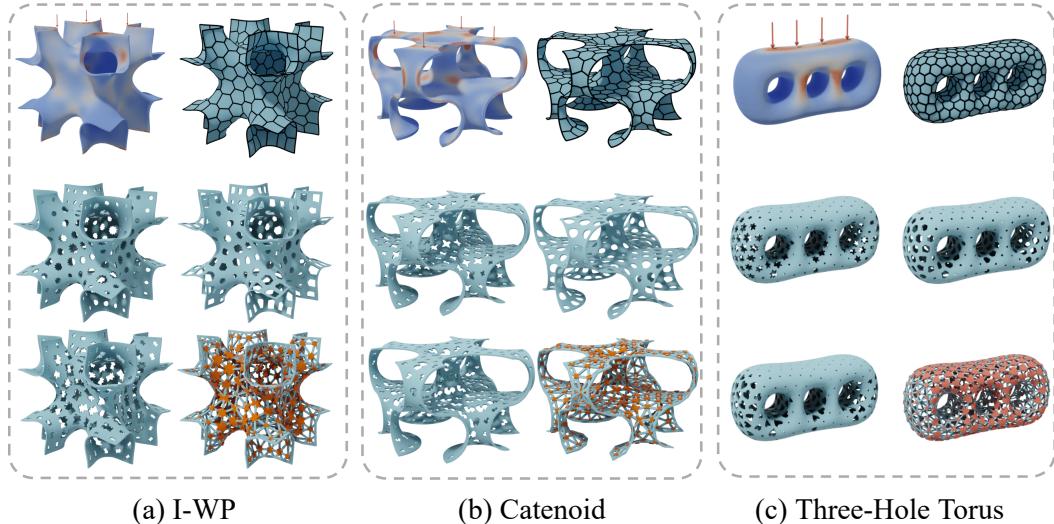
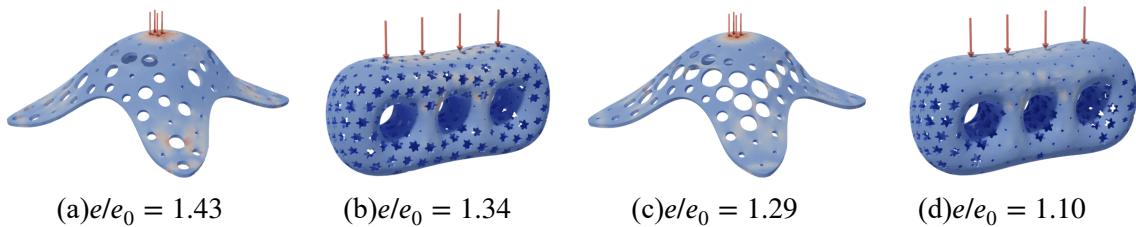


图 2.10 用规则、非规则和个性化图案模板（对偶）雕刻的更多结果

表 2.1 本文算法与商业软件（ANSYS）在性能上的比较结果。

模型	图案模板类型	参数个数	单元个数	体积 ( $mm^3$ )		$e/e_0$		耗时 (min)		迭代步数
				原始薄壳	雕刻薄壳	本文算法	ANSYS	本文算法	ANSYS	
Building	非规则	150	3,040,000	9.39	7.51	1.09	1.20	0.5	2.5	52
Panton Chair	规则	300	2,703,584	8.98	6.72	1.04	1.20	0.8	3.1	60
I-WP	规则	250	8,000,000	35.44	26.85	1.12	1.25	2.5	9.8	65
Catenoid	个性化 (dual)	500	5,360,000	46.42	25.85	1.52	1.75	1.7	5.6	95
Three-Holes	个性化	800	1,329,160	17.22	13.22	1.06	1.18	1.9	6.2	115

表示上实现的显式方法。在该方法中，每个三角形单元的应变能量是恒定的，这导致了显著的精度损失。与该离散方法不同，本文方法是直接在隐式函数上实现的。受益于此，本文方法可以通过函数参数轻松控制，更加多样化，并可扩展到不同的优化问题。例如，可以优化一个对偶问题来丰富薄壳结构的多样性。本文方法在相同的体积约束 (75%) 下生成的优化结构具有更大的结构刚度 (较小的柔度比率  $e/e_0$ )。Schumacher et al.<sup>[11]</sup> 中的方法使用恒定应变三角形单元计算结构变形，因此会遭受精度损失，尤其是对于复杂几何的壳体。此外，本文方法具有更好的可控性和可扩展性，因为它是基于函数表示执行的。如图 2.10 所示，该方法将隐式框架扩展到双雕刻设计，这丰富了壳体结构的多样性。

图 2.11 本算法 (a-b) 和基于离散三角形的方法<sup>[11]</sup> (c-d) 的比较

### 2.3.3 3D 打印及物理验证

如图 2.12 所示，优化的雕刻模型可以通过 3D 打印很好地制造出来。为了证明实用性，如图 2.13 所示，使用 RG1-5 微型计算机控制电子万能试验机对 3D 打印模型进行了测试。算法优化得到的结构具有良好的力学性能，可承受较大的外力，支撑腿在试验机施加 800 N 以上的力时才会断裂。

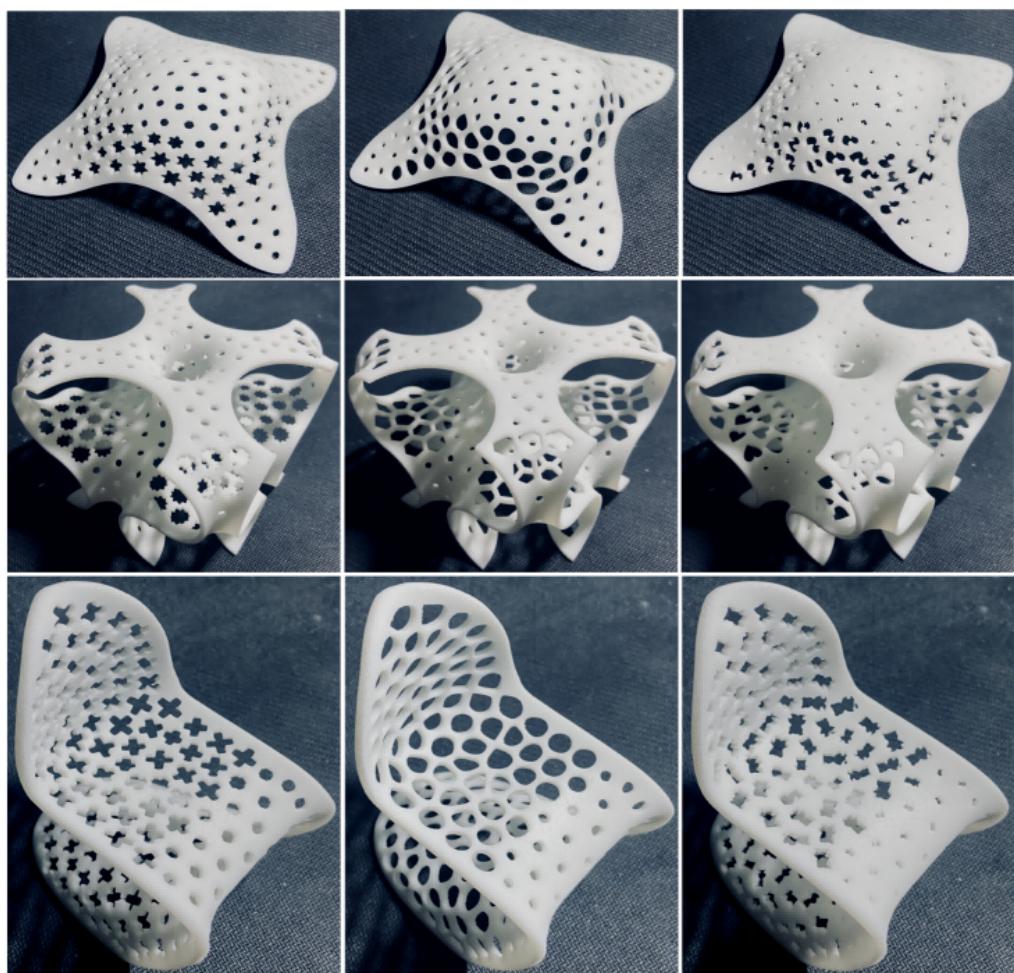


图 2.12 通过 3D 打印制造的薄壳雕刻优化结构

### 2.3.4 应用

本文所提出的薄壳雕刻设计与优化算法可以应用于各种实际可行的应用中，如图 2.14 (a) 所示，对于个性化医疗装置，该雕刻设计可以满足轻量化和散热的要求，同时保持必要的强度。该方法在生活领域的应用如图 2.14 (b) 所示，不仅实现了轻量化目的，而且大幅丰富了家具和日用品的多样性。

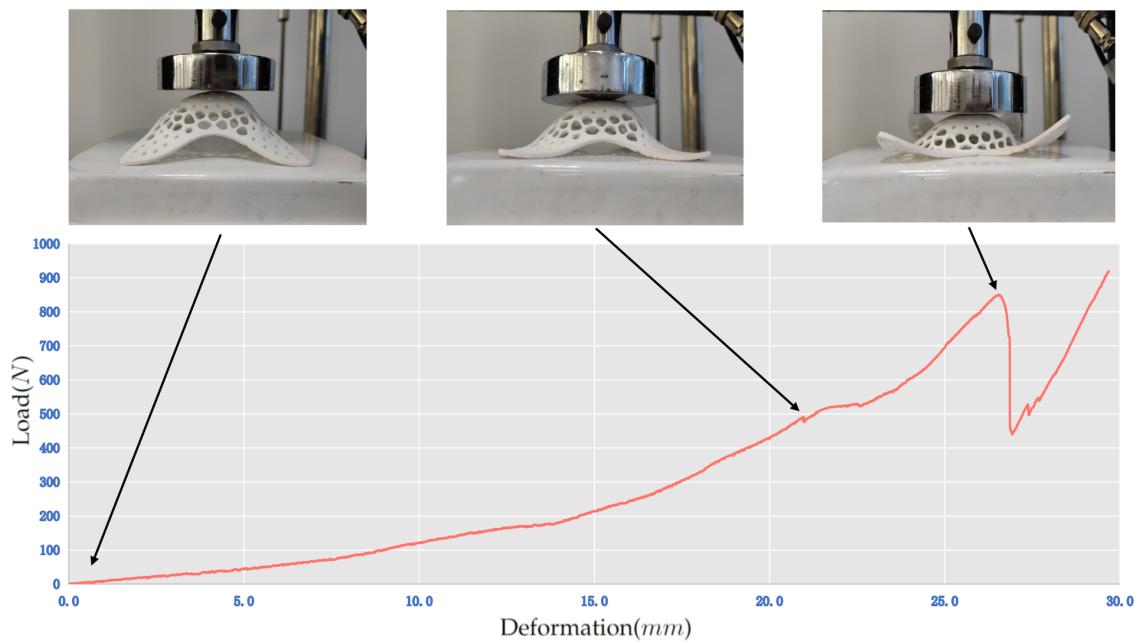


图 2.13 真实物理受力测试

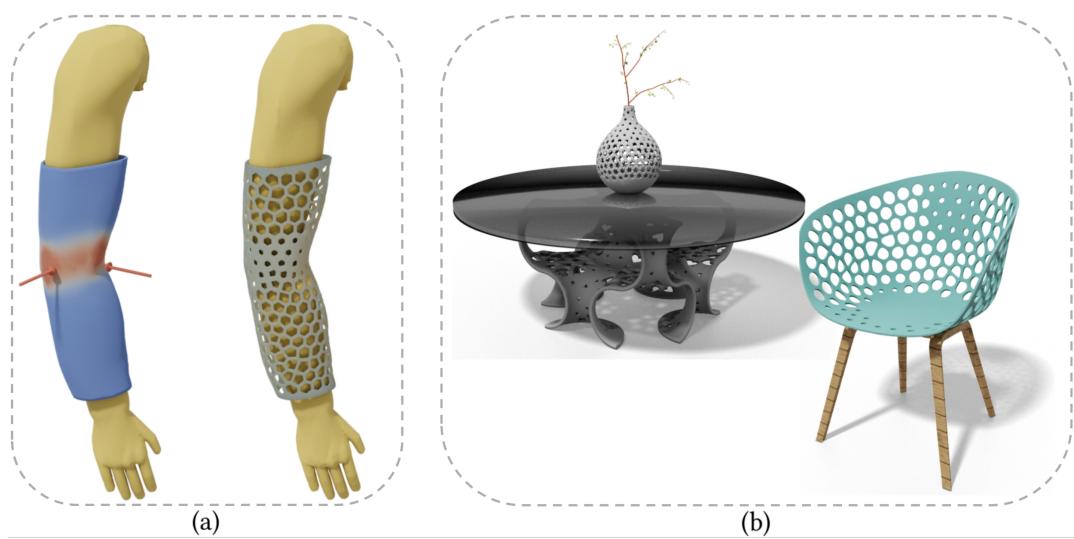


图 2.14 本文薄壳雕刻设计算法在医疗轻量化制造和家具设计中的应用.

## 2.4 本章小结

本章提出了一种新的参数化设计和优化方法，用于实现可行的薄壳结构。该方法通过隐式函数表示壳体和图案，因此可以将规则、非规则和个性化图案作为函数操作进行(对偶)雕刻。通过优化图案的尺寸和方向属性，并在指定的体积约束下评估参数制定设计问题，以最小化结构的应变能。由于雕刻结构由隐式函数表示，该方法可以在优化迭代过程中避免重新网格划分。通过仿真和3D打印，所提出的方法比基于传统有限元法的方法更有效，并丰富了壳体结构设计的多样性。本章节算法在复杂结构设计和优化领域做出的贡献总结如下：

- 提出了一种基于函数的薄壳结构图案雕刻的参数化设计方法，可以通过执行函数操作直接表示和设计不同类型的图案。
- 基于隐式表示，采用了高效的建模和优化方法来提高雕刻薄壳结构的刚度。直接在隐式表示上解决优化问题，无需重新网格划分。计算结果显示，该方法收敛速度很快。
- 简单的函数修改可以产生不同的设计方案。该框架丰富了薄壳结构的多样性，可应用于医疗装置和家具轻量化等实际可行的应用。

## 第3章 基于隐式表示的自支撑空心化轻量结构设计

### 3.1 引言

空心化在计算制造中广泛应用，目的是在不改变外表面的情况下减少材料消耗和打印时间<sup>[27]</sup>。3D 打印方法如熔融沉积成型 (FDM) 通常需要额外支撑结构，以避免空心腔内大量悬空部分崩塌。这些额外支撑材料虽旨在支撑，但对结构强度增强有限，且在打印后从完全封闭内部空间去除存在挑战。因此，优化内部结构以增强强度，同时保持自支撑能力至关重要。设计自支撑结构的方法包括后处理、带约束的反向设计和建模自支撑空腔。但后处理方法通常产生无法控制的填充比和脆弱构件。反向设计需考虑多约束，包括自支撑约束<sup>[28]</sup>，导致计算复杂度高，难以找到最优解。近年来，通过设计自支撑空腔进行空心化的简单高效策略受到关注<sup>[29-33]</sup>。现有方法基于空腔的显式表示<sup>[29-30]</sup>，难以控制和广泛应用。这些方法仅考虑自支撑特性，未优化结构强度<sup>[29,32]</sup>或使用启发式优化<sup>[31]</sup>，导致性能有限且不可靠。高效设计和优化自支撑空腔用于空心化仍是一大挑战。与显式方法相比，函数表示的结构连续，可通过参数轻易控制<sup>[34-35]</sup>。直接对函数进行解析计算可避免优化过程中频繁重网格，大幅提高自支撑空心化的效率和效果。

本章节提出一种基于 3D 椭球体的自支撑空腔，用于空心化给定模型，可用函数表示并通过参数控制。由于椭球体的平滑性，该自支撑空腔能有效减少应力集中<sup>[36]</sup>。所提出的算法利用函数表示，可直接对函数进行积分和梯度计算，避免耗时的重网格划分，仅需一次构建基本的均匀有限元，作为优化过程中的积分域。具体而言，使用径向基函数和椭球体函数分别描述模型和空腔，通过操作函数可实现空心化过程，调整椭球体函数参数，可轻易改变空腔的位置、尺寸和自支撑特性。如图 3.1 所示，展示了该流程。初始时，根据给定载荷和边界条件下输入实体模型的应力场布置空腔。实验表明，良好的初始化有助于快速收敛。然后进行高效的优化过程，优化空腔的形状、位置和拓扑。最终得到具有优化自支撑空腔的空心化模型，具有最高刚度。并且，所有优化结构均可使用常见的 FDM 3D 打印技术完美制造。此外，一旦建立了封闭空腔之间的连接通道<sup>[37]</sup>，该框架可扩展到其他增材制造技术，如 SLS 和 SLA。重要的是，该框架内所有的设计和优化过程均为全自动化。

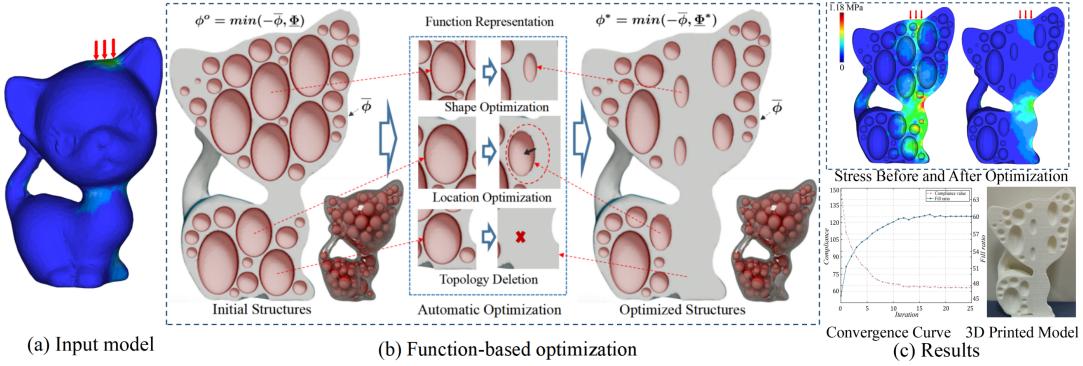


图 3.1 自支撑空心化算法流程图

## 3.2 研究方法

以 FDM 3D 打印为例，在 3D 打印中有两个重要参数决定了打印模型的内部自支撑特性，分别是最大悬挑长度  $\delta_0$  和最大悬挑角度  $\theta_0$ ，如图 3.2 所示。这些与材料相关的参数  $\theta_0$  和  $\delta_0$  可通过实验测量得到。对于 PLA 材料，默认参数设置为  $\delta_0 = 10\text{mm}$  和  $\theta_0 = 60^\circ$ 。

### 3.2.1 自支撑空心结构设计

本章算法在设计自支撑空心结构上，采用椭球体作为自支撑空腔结构，主要有两个原因：一是椭球体具有少量参数的显式函数表达式；二是可通过调整参数轻易实现自支撑。实际上，椭球体尺寸大小会影响其自支撑特性，如图 3.2 所示。这意味着尺寸较小时，球体可无需支撑即可打印（图 3.2 (b)）。为更好描述自支撑椭球体问题，需引入一些定量参数：椭球体  $E$  在  $X$ 、 $Y$  和  $Z$  轴上的三个主要半径分别为  $a$ 、 $b$  和  $c$ ；椭球体的打印方向默认与  $z$  轴对齐。为避免内部椭球体过小无法打印，设置  $\min\{a, b\} > 5\sigma$ ，其中  $\sigma$  为每层制造厚度（默认  $\sigma=0.2\text{ mm}$ ）。椭球体的下半球为自支撑，仅需考虑上半球。如图 3.2 (a) 所示，当悬挑角  $\theta < \theta_0$  时，相应部分为自支撑（低于红色水平线  $p_1 p_2$  的部分）。对于悬挑角  $\theta > \theta_0$  的部分，若  $p_1$  和  $p_2$  间水平距离小于  $\delta_0/2$ ，上方部分仍可自支撑。因此，可将椭球体自支撑的条件表述如下<sup>[29]</sup>：

$$\begin{cases} a \leq c, & \text{if } 5\sigma \leq a \leq \delta_0/(2 \cos \theta_0), \\ b \leq c, & \text{if } 5\sigma \leq b \leq \delta_0/(2 \cos \theta_0), \\ c \geq a(4a^2 - \delta_0^2)^{\frac{1}{2}} / \delta_0 \tan \theta_0 & \text{if } a > \delta_0/(2 \cos \theta_0), \\ c \geq b(4b^2 - \delta_0^2)^{\frac{1}{2}} / \delta_0 \tan \theta_0 & \text{if } b > \delta_0/(2 \cos \theta_0). \end{cases} \quad (3.1)$$

对于固定主半径  $c$  的椭球体，可根据公式 (3.1) 调整另外两个半径  $a$  和  $b$  以获得自支撑的椭球体。图 3.2 还展示了具有不同尺寸的自支撑椭球体。在该方法中，确定

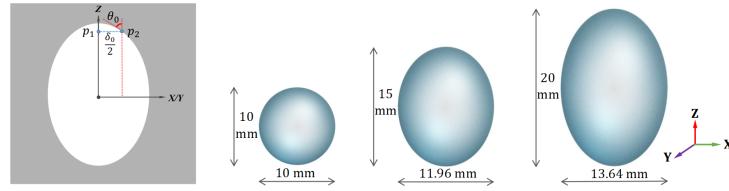


图 3.2 自支撑椭球体示意图

可优化变量的范围对优化器很重要。

### 3.2.2 自支撑空心化模型的函数表示

相比离散边界表示，连续函数表示具有多方面优势，包括参数可控性、高精度、解析优化，以及易存储和传输。由于椭球体具有函数表示，可使用函数表示来描述具有椭球体空腔的模型。对于具有椭球体空腔的3D模型，可将其划分为模型的外表面和椭球体空腔的内部表面两部分，模型的外表面和内部表面均可使用函数进行隐式表示。

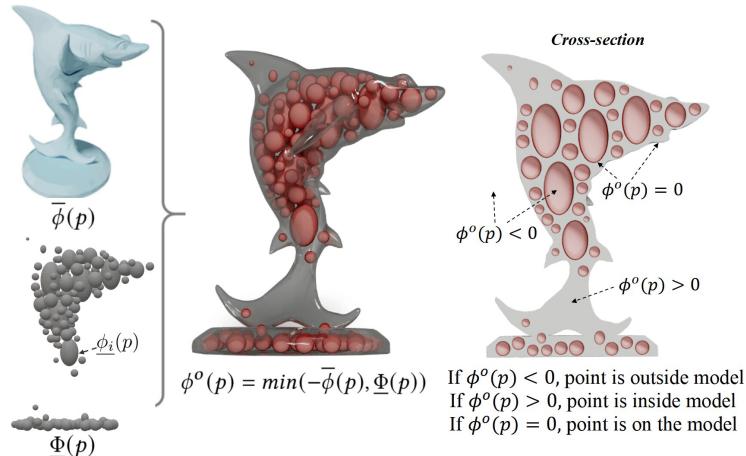


图 3.3 椭球空心化 3D 模型的函数表示

外表面可以用下面的径向基函数插值得到，

$$\bar{\phi}(p) = \sum_{i=1}^{n_t} \alpha_i R_i(p) + Q(p), \quad (3.2)$$

其中， $\bar{\phi}(p)$  是模型的外表面函数， $p = (x, y, z)$  是设计空间中的一个点， $R_i(p) = R(|p - p_i|)$  是径向基核函数 ( $R(x) = x^2 \log(|x|)$ )， $\{p_i\}_{i=1}^{n_t}$  是在模型表面上均匀采样的控制点集， $n_t$  是控制点的数量， $Q(p) = \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_3 z + \beta_4$  是一个单项式表达式， $\{\alpha_i\}$  和  $\{\beta_i\}$  是权重系数。由于外表面无需改变，因此仅需对采样点和权重进行一次计算。该文采用 RBF 方法来逼近外表面，这是因为 RBF 具有强大的非线性拟合能力和高计算效率。当然，也可以考虑其他替代方案来实现相同的目标。

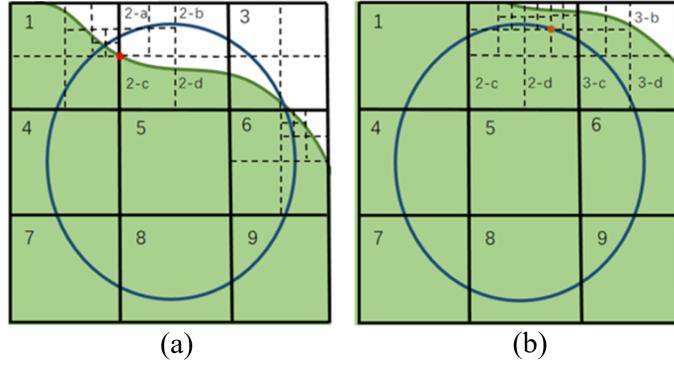


图 3.4 2D 视角下的自动定位示意图

内表面通过椭球函数来表示,

$$\begin{aligned}\underline{\Phi}(p) &= \min(\underline{\phi}_1(p), \underline{\phi}_2(p), \dots, \underline{\phi}_{n_e}(p)), \\ \underline{\phi}_i(p) &= \frac{(x - x_i)^2}{a_i^2} + \frac{(y - y_i)^2}{b_i^2} + \frac{(z - z_i)^2}{c_i^2} - 1,\end{aligned}\quad (3.3)$$

其中,  $\underline{\Phi}(p)$  表示椭球体空腔的整个内部表面,  $\underline{\phi}_i(p)$  是第  $i$  个椭球体的表面, 其三个主半径为  $(a_i, b_i, c_i)$ , 中心点为  $(x_i, y_i, z_i)$ ,  $n_e$  是椭球体的数量,  $(x, y, z)$  是椭球体的坐标, 主半径和中心点用于控制椭球体, 并根据目标需求进行优化。然后, 通过布尔运算可以获得具有椭球体空腔的 3D 模型的函数表示。具有椭球体空腔的 3D 模型的函数可表示为

$$\phi^o(p) = \min(-\bar{\phi}(p), \underline{\Phi}(p)). \quad (3.4)$$

函数表示可准确描述具有椭球体空腔的 3D 模型, 并通过参数(如主半径和椭球体中心)控制其形状、位置和拓扑结构, 图 3.3 展示了具有椭球体空腔的模型表示。获得表示函数后, 即可通过计算函数值轻松确定模型的内部和外部。若  $\phi^o(p) < 0$ , 则点在模型外部; 若  $\phi^o(p) > 0$ , 则点在实体部分内部; 若  $\phi^o(p) = 0$ , 则点在模型表面上。连续可微函数有助于准确计算体积和进行高效敏感性分析, 为自动优化提供可行条件。

### 3.2.3 优化问题的形式及求解

给定一个模型、外部载荷和体积约束, 算法的目标是获得一个由椭球体组成的优化自支撑空腔的模型。所提出提出的问题形式和优化可以直接在函数上执行, 无需耗时的重新网格化。结构柔度被用于制定优化目标, 优化应变能以最大化结

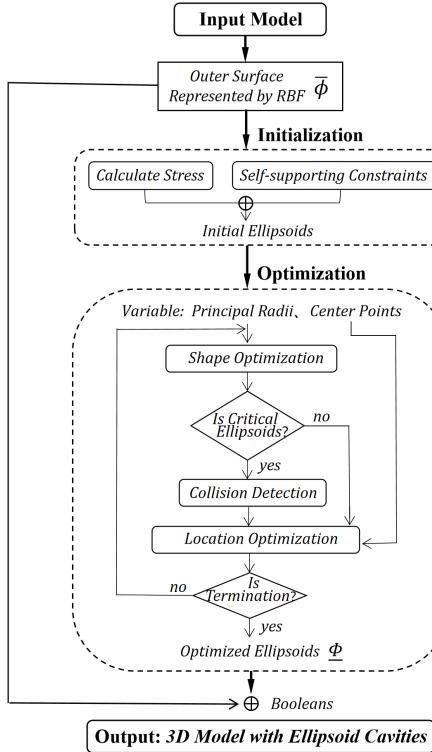


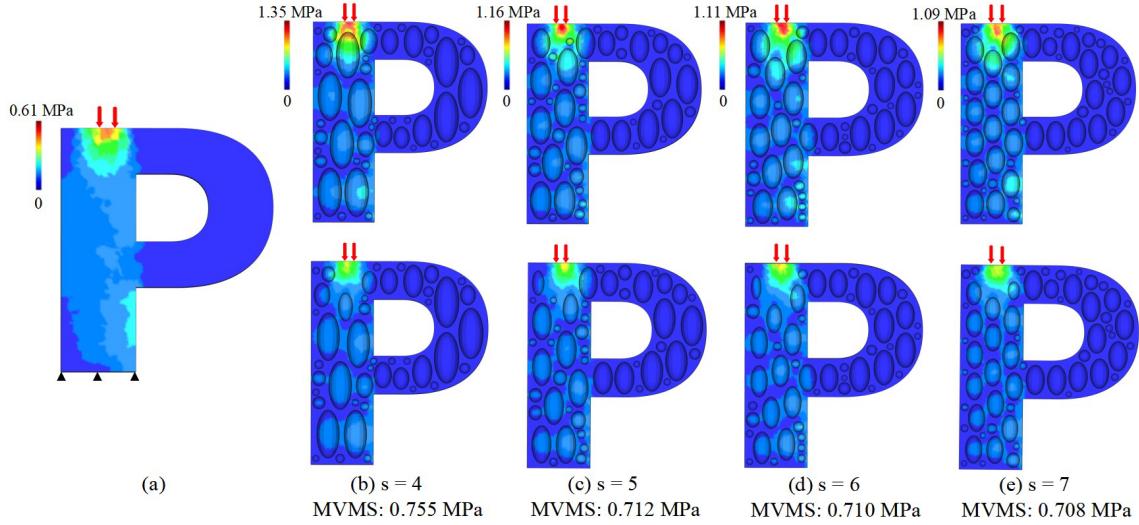
图 3.5 算法流程

构刚度。在给定约束条件下，最小化具有自支撑空腔的模型顺应性可以表述如下：

$$\begin{aligned}
 \min \quad I &= \int_{\Omega_D} G(\phi^o(p)) f \cdot u \, dV + \int_{\tau_s} F_s \cdot u \, dS, \\
 \text{s.t.} \quad & \int_{\Omega_M} G(\phi^o(p)) \mathbb{E} : \varepsilon(u) : \varepsilon(v) \, dV_M \\
 &= \int_{\Omega_M} G(\phi^o(p)) f \cdot v \, dV + \int_{\tau_s} F_s \cdot v \, dS, \quad \forall v \in U_{ad}, \quad (3.5) \\
 & \int_{\Omega_M} G(\phi^o(p)) \, dV < V_c, \\
 & u = \bar{u} \quad \text{on} \quad \tau_u, \\
 & d(\underline{\phi}_i(p), \underline{\phi}_j(p)) > 0, \forall \underline{\phi}_i, \underline{\phi}_j \in \underline{\Phi},
 \end{aligned}$$

其中， $I$  是结构顺应性， $\Omega_D$  是设计域， $\Omega_M$  是模型域， $G(*)$  是正则化的 Heaviside 函数<sup>[35]</sup>， $f$  是体积力， $F_s$  是定义在 Neumann 边界  $\tau_s$  上的表面拉力， $v$  是定义在  $\Omega_D$  上的相应测试函数，其中  $U_{ad} = v | v \in \text{Sob}_1(\Omega_M), v = 0, \text{on } \tau_u$ ， $u$  是位移场， $\text{Sob}_1$  是一阶 Sobolev 空间， $\varepsilon$  是二阶线性应变张量， $\mathbb{E}$  是由弹性模量和泊松比决定的四阶各向同性弹性恒等张量， $\bar{u}$  是在 Dirichlet 边界  $\tau_u$  上的预设位移， $V_c$  是体积约束， $d(\underline{\phi}_i(p), \underline{\phi}_j(p))$  是第  $i$  个椭球体和第  $j$  个椭球体之间的距离。

优化的主要目标是在满足目标体积约束的前提下，提高结构的物理性能，而

图 3.6 尺寸参数  $s$  的影响

非仅关注实现自支撑特性。结构的自支撑特性在初始化阶段即已确立，在优化过程中，通过限制主半径最大范围来确保自支撑能力，该方法有助于减少优化过程中的约束条件数量。

**问题的离散化。** 与传统有限元分析不同，每次迭代都需要对四面体或六面体网格进行重网格化来描述形状并计算，而重网格化过程非常耗时，且容易出现网格失败或质量较差的问题。在本章方法中，形状由连续函数描述，仅需构建一次统一的有限六面体单元作为积分域，并在整个优化过程中保持六面体单元不变。方程 3.5 中的优化问题可重写为离散形式，

$$\begin{aligned} \min \quad & I = U^T K U, \\ \text{s.t.} \quad & K U = F, \\ & V = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^8 G(\bar{\phi}_{i,j}) - \sum_{k=1}^{n_e} \frac{4}{3} \pi a_k b_k c_k \leq V_c, \\ & \sum_{i=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{n_e-1} E_s^{ij} = 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

其中  $U$  是位移矩阵， $F$  是体力向量， $n$  是用于积分计算的离散单元数量， $n_e$  是椭球体空腔的数量， $V_c$  是体积约束， $\bar{\phi}_{i,j}$  是第  $i$  个单元的第  $j$  个节点点处  $\bar{\phi}(*)$  的值， $K$  是刚度矩阵，其中  $K_i$  是第  $i$  个单元的刚度矩阵， $(a_k, b_k, c_k)$  是第  $k$  个椭球体的三个主半径， $E_s^{ij}$  是第  $i$  个椭球体与第  $j$  个椭球体之间的碰撞检测。

### 3.2.4 优化求解过程

良好的初始化有助于加快优化收敛，本节提供了一种基于输入模型结构强度构建的应力初始化方法。给定均匀采样的椭球体质心，目标是获得一个无交叉的自支撑椭球体填充。根据公式(3.1)中的自支撑计算，仅需获得每个椭球体的主半径 $c$ ，其他两个主半径 $a$ 和 $b$ 的最大值可以推导得出。第 $i$ 个椭球体的主半径 $c_i$ 可计算为

$$c_i = e^{-(2\sigma_n)^2} * \frac{h_{max}}{s}, \quad (3.7)$$

其中， $\sigma_n$ 为标准化结构应力， $h_{max}$ 为输入模型最大高度， $s$ 为调整自支撑椭球体大小和数量的缩放因子。缩放因子 $s$ 影响椭球体空腔大小和数量，但对优化结构力学性能影响较小。在相同填充比下，缩放因子 $s$ 越大，椭球体空腔数量越多。当缩放因子 $s$ 取6时，在结构强度和椭球体数量间达到了良好平衡，如图3.6所示。获得椭球体初始主半径后，将使用自动定位检测调整椭球体大小。当无相交椭球体时，即可获得初始化。

$n_e$ 个椭球体的变量包括主半径 $(a_i, b_i, c_i) i = 1^{n_e}$ 和中心点 $(x_i, y_i, z_i) i = 1^{n_e}$ 。在优化过程中，如果未施加限制，椭球体很可能发生碰撞，这种碰撞会损害结构的自支撑性能。为解决这一问题，可采用GJK算法<sup>[38]</sup>检测椭球体间碰撞，并计算每个椭球体的可行运动范围，确保无碰撞运动。

为避免优化迭代中椭球体频繁碰撞，设置了设计变量上限，将椭球体限制在各自可行范围内。然而，在每次迭代中重新计算每个椭球体可行范围会带来大量额外计算开销。实际上，无需在单次迭代中求解所有椭球体可行范围。大多数椭球体在优化过程中保持不变，无需进行碰撞检测。通过排除这些不变椭球体，可提高计算效率，并保持优化问题可微分性。剩余的被称为关键椭球体的，是根据上次迭代梯度值确定的。在迭代过程中，仅监测涉及关键椭球体的碰撞。初始时通常仅有少数关键椭球体，在优化过程中数量逐渐增加，但相对保持较小。

每步迭代，形状参数 $\{(a_i, b_i, c_i)\}_{i=1}^{n_e}$ 首先被优化，局部参数 $\{(x_i, y_i, z_i)\}_{i=1}^{n_e}$ 先固定。目标函数关于变量的梯度可以计算得到：

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial t_k} &= -U^T \frac{\partial K}{\partial t_k} U = -U^T \left[ \frac{1}{8} \sum_{i=1}^{n_e} \sum_{j=1}^8 q(G(\phi_{ij}^o))^{q-1} \frac{\partial G(\phi_{ij}^o)}{\partial t_k} K_i \right] U, \\ \frac{\partial V}{\partial t_k} &= \sum_{k=1}^{n_e} \frac{4}{3} \pi \frac{a_k b_k c_k}{t_k}, \\ \frac{\partial G(\phi_{ij}^o)}{\partial t_k} &= \frac{\partial G}{\partial \phi_{ij}^o} \frac{\partial \dot{\phi}_{ij}^o}{\partial t_k}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

其中,  $t_k$  表示待优化参数, 可以采用移动渐近线优化器<sup>[39]</sup>中的相应  $\partial I / \partial t_k$  来更新形状参数  $(a_i, b_i, c_i)_{i=1}^{n_e}$ 。如果某个椭球体更新后的形状参数最小值低于第 3.1 节提到的指定阈值, 则将其移除, 并将椭球体数量更新为  $n_e = n_e - 1$ 。接下来, 采用类似的方法优化位置参数  $(x_i, y_i, z_i)_{i=1}^{n_e}$ , 同时保持更新后的形状参数固定不变。尽管无法通过数学推导保证收敛, 但在实验中, 所有结果都在数十次迭代内收敛。

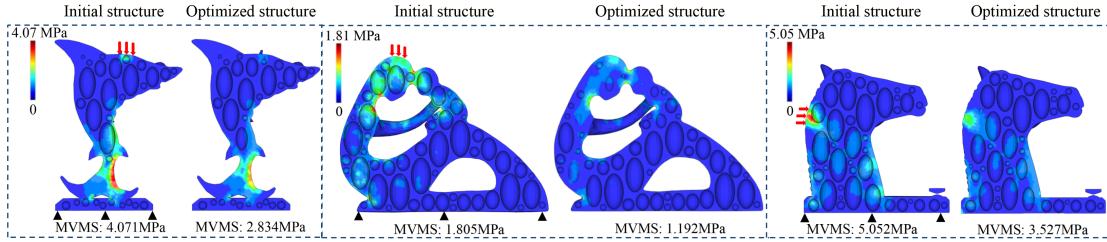


图 3.7 初始结构和优化结构的应力分布比较

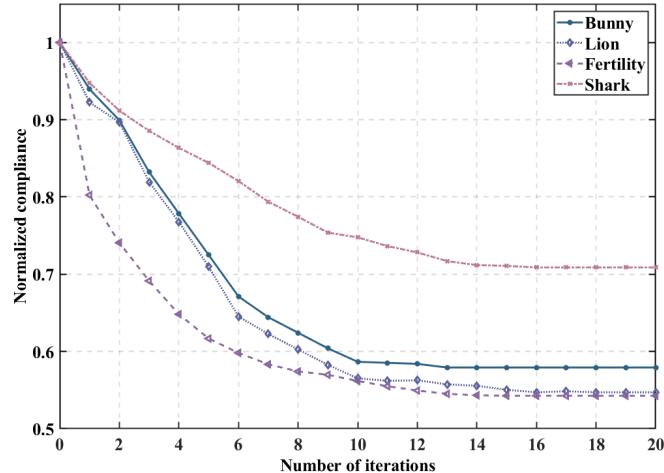


图 3.8 四个模型的收敛曲线

### 3.3 实验和讨论

本节测试了所提出的自支撑空心化方法在各个方面的性能。默认情况下, 在固定底部的情况下, 在顶部施加  $1.0 \text{ N/mm}^2$  的表面压力。填充的自支撑结构由 3D 打印机使用  $0.2 \text{ mm}$  的切片厚度和弹性模量为  $3000 \text{ MPa}$ 、泊松比为  $0.35$  的 PLA 塑料打印。设计和优化过程中涉及一些参数, 其中大部分参数与模型无关, 可以默认固定。所有实验均在一台配备  $3.70\text{GHz}$  Intel(R)Core(TM) i9-10900 CPU 和  $128 \text{ GB}$  RAM 的计算机上进行。

#### 3.3.1 有效性和效率性

众所周知, 在基于传统有限元分析 (FEA) 的优化方法中, 生成四面体网格和/或六面体网格需要耗费大量时间。而且在传统基于 FEM 的优化过程中, 重新网格化

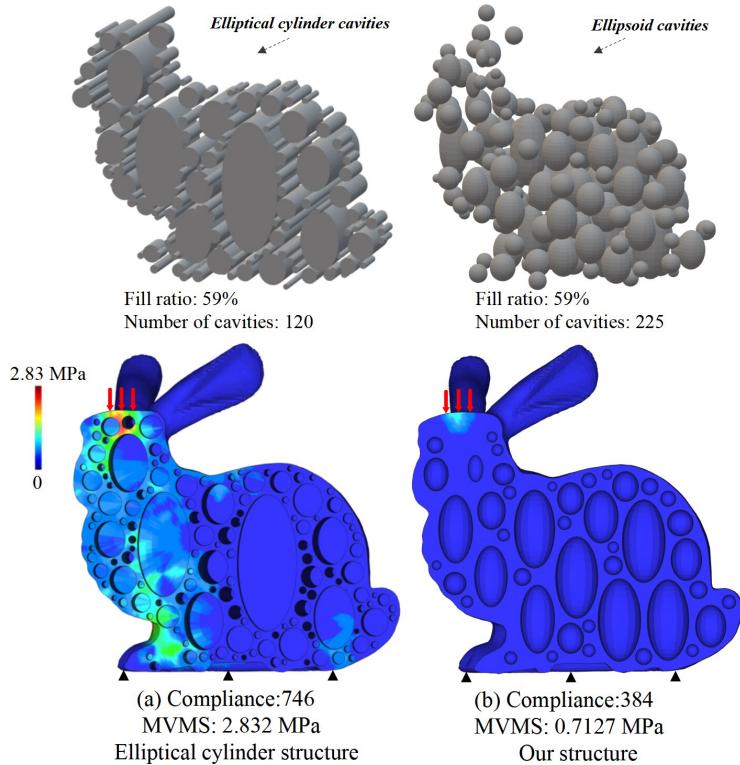


图 3.9 与椭圆柱体结构方法<sup>[29]</sup> 在相同填充比例下的比较实验

是必需的步骤，用于表示形状并执行计算。相比之下，基于函数的 3D 模型表示方法可以直接在离散计算中对这些函数进行积分和梯度计算，仅需构建一次简单的均匀有限元作为积分域即可。在建模和优化过程中不需要频繁重新网格化，这导致数值计算非常高效和稳定，特别是对于大型复杂结构。图 3.7 显示了初始化和相应的优化结果。所提出的方法生成了轻量级且强度高的模型，这些模型通过优化的自支撑椭球体进行了空心化，并具有良好的力学性能。相应模型的时间和优化数据如表 3.1 所示。在几何（形状和位置）和拓扑（空腔数量）优化后，最大冯·米塞斯应力（MVMS）得到了显著改善。使用传统有限元分析很难获得优化的椭球体，这里仅列出了 FEA 中一次迭代的计算时间。所提出的方法更加高效，所有实验都在数十步内收敛，总时间（包括初始化和优化）每个模型不到一个小时。

此外，所提出的基于函数的框架提供了精确的解析梯度，并确保了优化的数值稳定性。图 3.8 展示了四种不同模型的收敛曲线。为了直观显示，收敛曲线已经通过刚度能量进行了归一化处理，这些模型均在 20 次迭代内实现了收敛。

### 3.3.2 比较和讨论

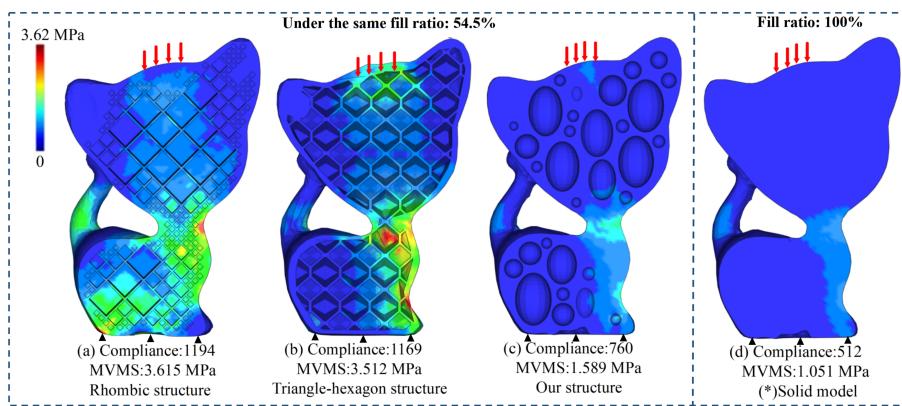
为验证所提出方法的有效性，结果与最相关的椭圆柱结构<sup>[29]</sup>进行了比较。椭圆柱方法使用贪心初始化生成空腔结构，但无法优化相应结构。此外，椭圆柱结构由 2D 椭圆拉伸而成，在具有复杂几何和拓扑的形状中会出现空心化问题。所提

表 3.1 实验结果表：优化数据和时间

模型	初始空心化模型			优化空心化模型			优化		总时间 (min)	一步 FEA 时间 (min)
	MVMS(MPa)	# Ellipsoids	Fill ratio	MVMS(MPa)	# Ellipsoids	Fill ratio	Time(min)	#iterations		
P	1.11	228	55.6%	0.71	219	59.47%	2.31	20	52.6	4.22
Bunny	1.49	231	54.21%	0.713	225	59.03%	2.26	16	46.2	3.67
Shark	4.07	213	62.31%	2.83	208	65.02%	2.24	17	42.6	3.18
Fertility	1.81	193	59.42%	1.19	183	64.98%	2.21	16	41.4	3.25
Molar	8.92	330	50.54%	5.94	329	55.81%	2.37	18	53.9	3.75
Kitten	2.58	413	42.27%	1.59	402	54.48%	2.41	18	52.2	4.03
Horse	5.05	567	38.42%	3.51	564	41.5%	2.54	16	46.7	3.53

出的椭球体在 3D 空间中构建，具有更高的自由度，轴长和位置可以使用高效的无网格方法进行优化。优化后的结构明显优于<sup>[29]</sup>方法的结果。柔度反映了整体结构强度，最大冯·米塞斯应力 (MVMS) 用于反映结构中最薄弱的局部区域。结构柔度或 MVMS 越小，结构越强。如图 3.9 所示，椭圆柱结构和所提出结构的顺应性分别为 746 和 384，两种结构的 MVMS 分别为 2.832 MPa 和 0.7127 MPa。这表明，在相同条件(外载和体积约束)下，所提出结构的刚度明显优于椭圆柱结构。

本文还与与其他相关方法进行了比较，包括菱形结构<sup>[30]</sup>、三角-六边形结构<sup>[32]</sup>、基于 TPMS 的结构<sup>[35]</sup>和蜂窝结构<sup>[40]</sup>，所有模型在相同外载下进行了测试。图 3.10 (a)-(d) 展示了在相同 54.5% 填充比下，菱形结构 (a)、三角-六边形结构 (b) 和所提出结构 (c) 的比较。相应的最大冯·米塞斯应力 (MVMS) 分别为 3.615 MPa、3.512 MPa 和 1.589 MPa。本文方法所优化结构的 MVMS 更接近于实心模型 (d)，各结构的柔度值分别为 1194、1169、760 和 512。菱形结构通过细分初始菱形单元自适应构建，可优化变量仅为细分层级，自由度小于所提出方法。三角-六边形结构具有良好刚度，但未对结构进行优化。

图 3.10 与相关自支撑空心轻量化方法的比较<sup>[30,32]</sup>

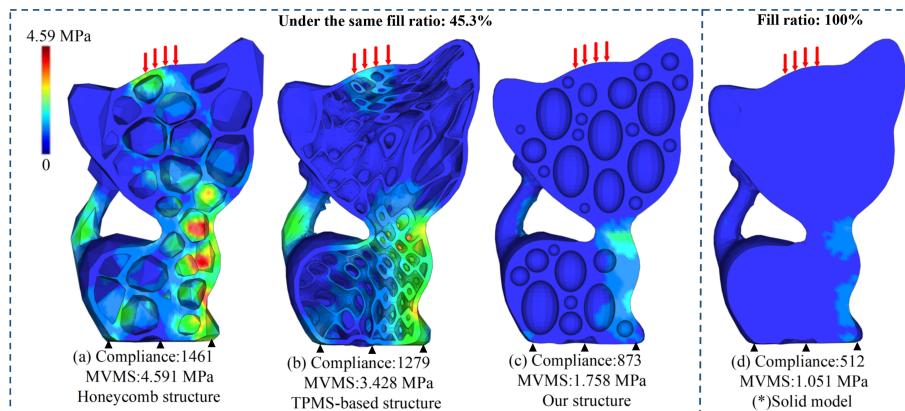
本文方法还与一些非自支撑结构进行了比较，包括蜂窝结构<sup>[40]</sup>和基于 TPMS 的结构<sup>[35]</sup>，如图 3.11 所示。蜂窝结构通过启发式算法进行优化，需要在每次迭代中进行耗时的重网格化。相比之下，所提出的结构可以通过函数进行表示、设计和优化，有利于数值计算的稳定性和快速收敛。基于 TPMS 的结构可以使用连续表

示自动优化，但由于受 TPMS 构造的限制，该结构在狭窄和薄弱部位容易出现脆弱性。比较结果表明，所提出的自支撑结构刚度优于其他结构。主要原因是，该自支撑结构可以直接在函数上进行解析计算，并具有更多可优化的自由度，包括形状(椭球体尺寸)、位置(椭球体位置)和拓扑(椭球体数量)。在相同 45.3% 的填充比下，所提出结构的 MVMS 和填充比更接近于实心模型(填充比 100%)。为了更清晰地说明，图 3.12 中绘制了这些方法的 MVMS 直方图。直方图清楚地显示，所提出的结果具有最佳性能，与实心模型相当。上述相关方法的总结列于表 3.2 中。该方法在自支撑性、强度导向性、表示、优化和可优化自由度等方面具有明显优势。

表 3.2 相关方法的定性比较

方法	自支撑性	强度优化	表示方法	优化形式	优化自由度
Honeycomb structures in <sup>[40]</sup>	✗	✓	离散	启发式	3D(几何+拓扑)
Rhombic structures in <sup>[30]</sup>	✓	✓	离散	自动	3D(几何+拓扑)
Support-free hollowing structures in <sup>[31]</sup>	✓	✗	离散	none	none
Elliptical cylinder structures in <sup>[29]</sup>	✓	✗	离散	none	none
TPMS-based structures in <sup>[35]</sup>	✗	✓	连续	自动	3D(几何+拓扑)
Triangle-hexagon structures in <sup>[32]</sup>	✓	✓	离散	none	none
本文方法	✓	✓	连续	自动	3D(几何+位置+拓扑)

所提出的框架支持多种载荷工况。为验证该方法在不同载荷条件下的有效性，如图 3.13 所示，对其进行了进一步测试。在不同工况下，该方法表现良好，并获得了给定载荷条件下的最优结构。外力方向没有限制，与椭球体或制造方向无关。该方法采用的椭球体为各向异性孔隙，当其与应力方向一致时，其机械性能优于等向孔隙。此外，优化后的模型可通过常见的 FDM 3D 打印技术制造。为评估可行性，如图 3.14 所示，使用 FDM 3D 打印机打印了几个优化后的模型。在所有实验中，内部结构均可良好打印，无需额外支撑。此外，如图 3.15 所示，使用 RG1-5 微型计算机控制电子万能试验机对 3D 打印模型进行了测试，该结构的机械性能与实

图 3.11 与相关非自支撑轻量化方法<sup>[35,40]</sup>的比较

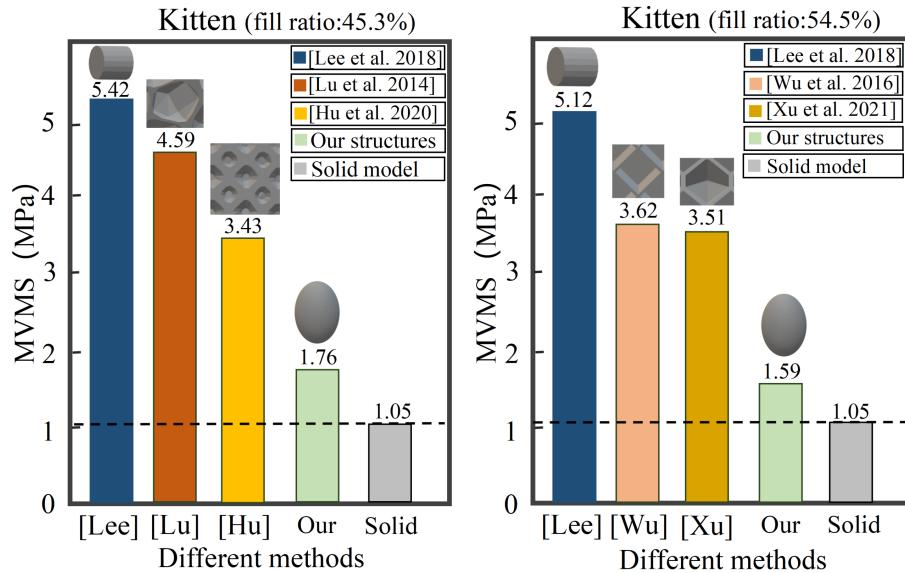


图 3.12 相同填充比例下不同方法<sup>[30,32,35,40]</sup>的 MVMS 比较直方图

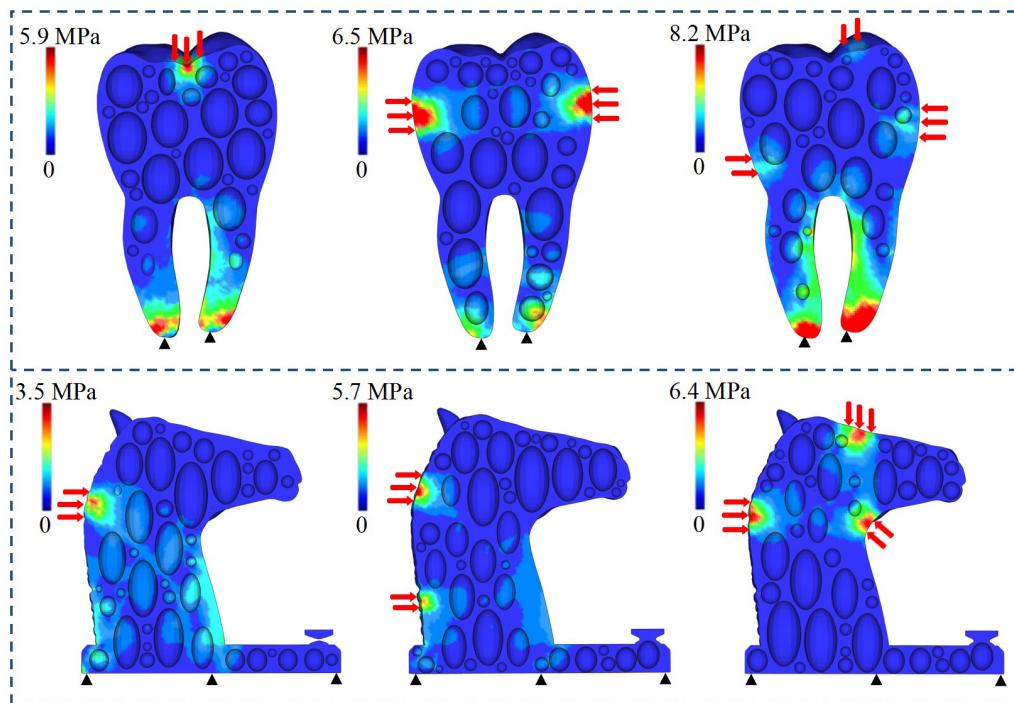


图 3.13 不同受力方向下的优化结构

心模型相当。两种模型在高荷载下都保持良好状态，即使试验机达到最大 5000N 的力，主体结构仍然完好。因此，所提出的方法得到的优化结构是可信和可行的。

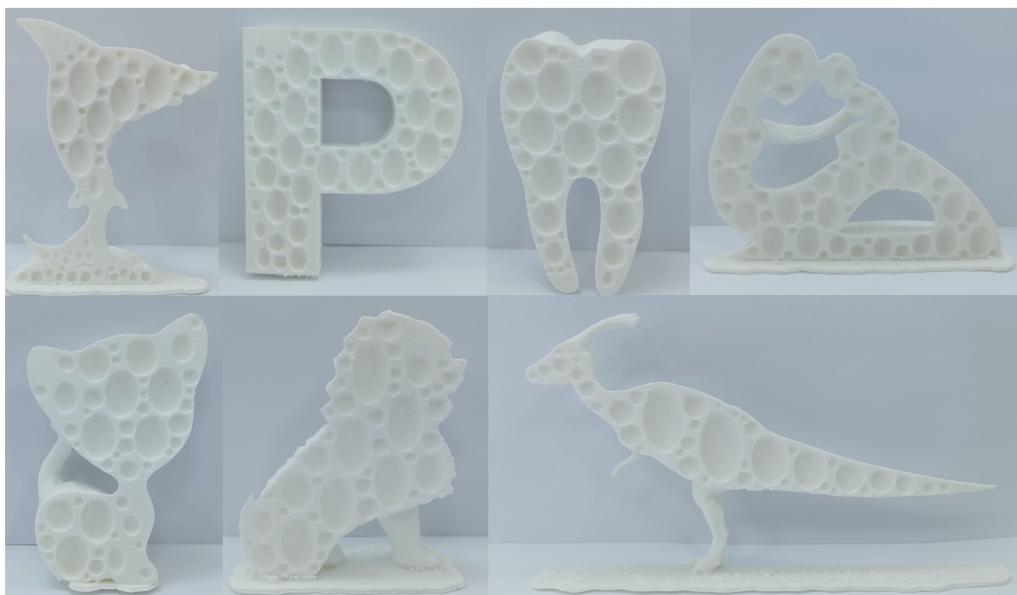


图 3.14 带有椭球形空腔的优化模型的 3D 打印结果

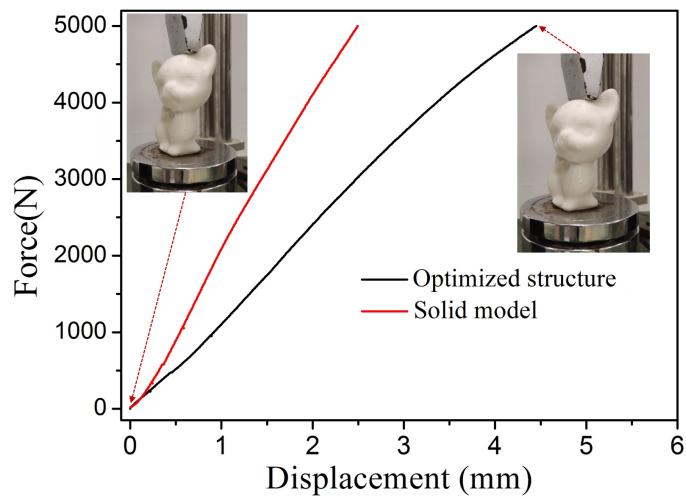


图 3.15 3D 打印模型的实际应力测试

### 3.4 本章小结

本章节提出了一种基于椭球雕刻的无网格自支撑空心化框架。与现有基于有限元的方法相比，该框架直接在连续函数上进行自支撑空心化的设计和优化，无需耗时的重网格化，大幅提高了空心化问题的有效性和效率。该框架可自动优化椭球形空腔的形状、位置和拓扑结构，从而得到性能优异的优化自支撑结构。一系列实验结果证明了该框架的有效性。

## 第 4 章 基于隐式神经表示的端到端拓扑优化方法

### 4.1 引言

拓扑优化 (Topology Optimization, TO) 是一种计算设计方法论，旨在确定设计域内材料的最佳分布，以实现特定的性能目标，同时遵守给定的约束条件<sup>[41]</sup>。在过去的三十年里，计算机技术和 3D 打印的进步推动了拓扑优化方法的重大进展。这些方法包括固体各向同性材料惩罚 (SIMP) 方法<sup>[42]</sup>、进化结构优化 (ESO) 方法<sup>[43]</sup>、水平集方法 (LSM)<sup>[44]</sup>以及最近的可移动可变组件/空隙 (MMC/MMV) 方法<sup>[45-46]</sup>。这些方法在结构表示方式上有所不同，但它们都是通过重复的物理响应分析和参数梯度信息来迭代地寻求最优的材料分布。拓扑优化的求解过程涉及反复的、计算密集型的有限元分析，以求解物理平衡方程。这种计算需求是这些方法效率低下的主要原因，从而阻碍了拓扑优化在实际应用场景中的推广。

为了提高效率，研究者们投入了大量精力，探索加速拓扑优化过程的有效方法<sup>[47]</sup>。这些方法采用了多种技术，如多网格求解器、模型缩减、高性能计算及其组合。近年来，人工智能 (AI) 在机械工程领域的影响显著增强。特别是，利用神经网络和深度学习技术解决拓扑优化问题的兴趣大幅增加<sup>[48-53]</sup>。在这些策略中，无迭代方法<sup>[54-55]</sup>引起了广泛关注。这些方法通过构建深度神经网络，直接从条件和问题配置中预测最优结构。通过这种直接设计方法实现近乎实时的拓扑优化，具有很大的吸引力。Sigmund 等人在综述中指出了与直接设计方法相关的几个挑战性问题<sup>[53]</sup>。首先，使用传统拓扑优化方法构建训练数据集计算成本高。其次，训练好的模型难以推广到未见样本。第三，常用的损失函数，如均方误差 (MSE) 或二元交叉熵 (BCE)，缺乏检测和防止结构断裂所需的敏感性。本章提出了一种新颖的无迭代拓扑优化框架，称为 IF-TOINR，旨在解决上述问题。

隐式神经表示 (INR) 最近受到了广泛关注<sup>[56-59]</sup>。INR 利用神经网络生成离散信号场（如颜色、符号距离值或密度）的连续参数化表示。INR 模型在各种挑战性领域的应用展示了其对输入数据变化的鲁棒性，以及对未见场景的良好泛化能力。受此启发，本文选择使用连续的符号距离场 (SDF) 来表示结构。与基于密度的离散表示方法相比，这种表示方法提供了一种紧凑且平滑的表示，有效消除了棋盘现象。此外，INR 的使用将设计过程与空间网格解耦，理论上能够以任何所需的精度获取结构。

IF-TOINR 框架利用变分自编码器 (VAE) 从训练数据集中学习和重构最优结构的 SDF。采用基于 CNN 的编码器将结构嵌入到低维潜在空间中。随后，基于

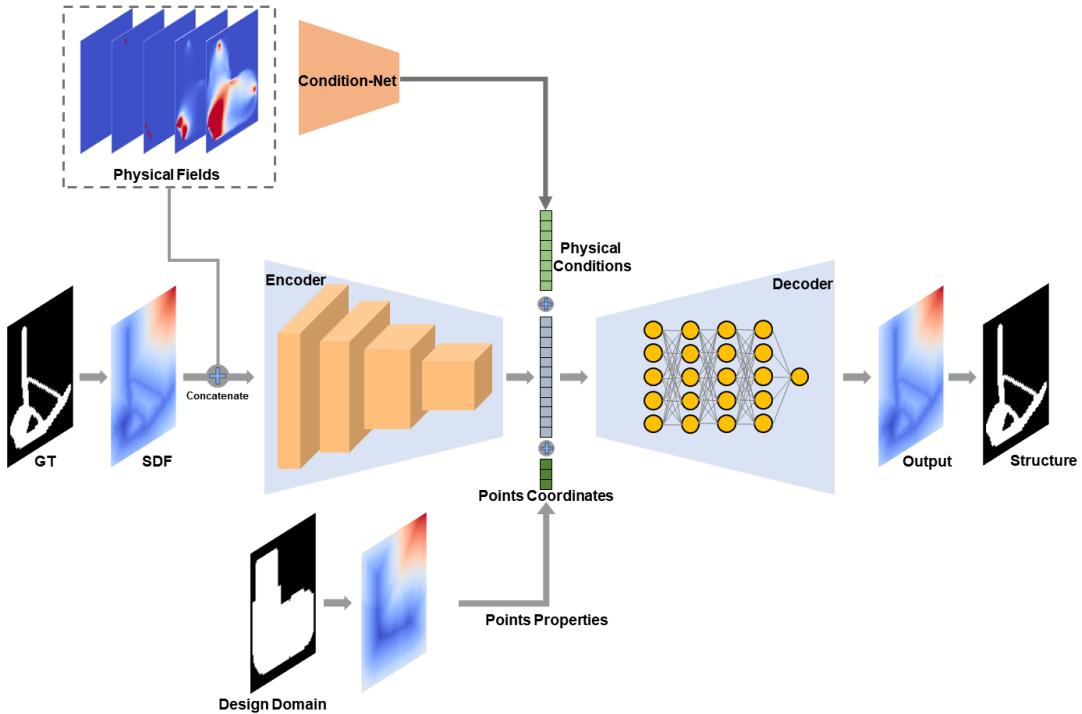


图 4.1 IF-TONIR 算法整体框架图

MLP 的解码器将设计域内特定点的坐标和来自自己学习潜在空间的潜在向量作为输入，预测该点对应的 SDF 值，结合来自两个来源的信息。IF-TONIR 包含一个名为物理网络的子网络，负责从各种条件中提取特征，包括载荷、位移约束以及应力和应变场。将来自物理网络的特征向量作为条件码，指导 VAE 模型根据给定的问题配置生成结构。为了使网络识别设计域的形状，将设计域转换为其 SDF 表示。然后，将设计域的 SDF 值附加到每个点作为附加属性。这些点的坐标及其属性被输入到解码器中，以输出最优结构的 SDF 值。最终，通过提取其 SDF 的零水平集，获得最优结构。

损失函数的选择在训练神经网络中起着至关重要的作用。然而，经典的损失函数如均方误差 (MSE) 或二元交叉熵 (BCE) 仅关注局部离散信号误差，可能无法充分捕捉全局结构特征，如连通性。在本研究中，引入了一种基于计算拓扑学中持久同调技术的拓扑感知损失项<sup>[60]</sup>。该拓扑损失能够捕捉重构结构与真实结构 (GT) 之间的拓扑特征误差，如连通成分和孔洞的数量。实验结果验证了拓扑损失可以提高重构精度并减少结构断裂的发生。一旦模型训练完成，通过输入相关的设计域形状、问题配置和物理信息，即可直接推断出相应的最优结构。

## 4.2 预备知识

IF-TOINR 算法原理框架如图 4.1 所示，在介绍算法之前之前，章节 4.2 先介绍拓扑优化一般形式、结构隐式表示和持续同调技术的预备知识。

### 4.2.1 拓扑优化一般形式

拓扑优化旨在优化指定域内的材料分布，以满足特定的目标和约束。本章算法在著名的最小结构柔度问题上评估了所提出的算法。值得注意的是，给定合适的数据集，本方法可以扩展到具有不同目标和约束的拓扑优化问题，如应力相关问题<sup>[61]</sup>或热传导问题<sup>[62]</sup>。具体来说，本文考虑在体积约束下的二维最小柔度问题。如图 4.2(左)所示，当在给定域上施加特定载荷以及附加的边界位移约束时，会引出以下问题的公式化：

$$\min_{\Theta} C(\Theta) = \int_{\Omega_\Theta} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, d\sigma + \int_{\Gamma_T} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, ds, \quad (4.1a)$$

$$\text{s.t.: } \int_{\Omega_\Theta} \mathbb{E} : \varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{v}) \, d\sigma = \int_{\Omega_\Theta} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\sigma + \int_{\Gamma_T} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, ds, \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_{ad}, \quad (4.1b)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}, \text{ on } \Gamma_u, \quad (4.1c)$$

$$\int_{\Omega_\Theta} 1 \, d\sigma \leq \bar{V}, \quad (4.1d)$$

其中， $C$  是结构柔度，衡量总的结构应变能，较低的  $C$  值表示结构刚度更大。 $\Omega_\Theta$  是结构所占据的区域， $\Theta$  是控制结构几何和拓扑的优化变量。 $\mathbf{f}$  是外力， $\mathbf{t}$  是定义在 Neumann 边界上的牵引力， $\mathbf{u}$  是位移场， $\mathbf{v}$  是定义在  $\Omega_\Theta$  上的相应测试函数， $\mathcal{V}_{ad}$  是运动学上可接受的位移场空间。 $\varepsilon$  是二阶线性应变张量， $\mathbb{E}$  是由杨氏模量和泊松比决定的四阶各向同性弹性张量， $\bar{\mathbf{u}}$  是在 Dirichlet 边界  $\Gamma_u$  上的规定位移， $\bar{V}$  是给定的体积约束。在传统的 SIMP 方法中， $\Theta$  表示离散元素的密度。通过迭代优化算法获得最优的密度分布，如图 4.2(中)所示。随后，进行一系列后处理操作以获得连续的最优结构表示，如图 4.2(右)所示。在该算法中，SDF 的连续性使表示的调整变得简单，能够根据需要细化结构特征或引入平滑操作。

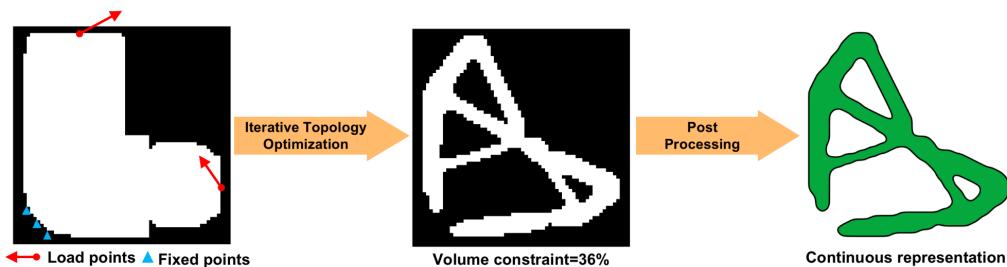


图 4.2 传统拓扑优化的一般流程

### 4.2.2 结构的隐式表示

符号距离场 (SDF) 是一种广泛使用的几何模型表示方法，它为空间中的每个点分配一个符号距离值，表示该点与结构边界上最近点之间的距离。距离的符号表明该点位于结构的内部或外部，如图 4.3 (a) 所示。在结构占据的区域内，如图 4.3 (b) 所示，可以定义一个连续的符号距离函数  $\phi_{\Theta}(\mathbf{x})$ ，其满足以下条件：

$$\phi_{\Theta}^{SDF}(\mathbf{x}) \begin{cases} > 0, & \text{if } \mathbf{x} \text{ is inside,} \\ = 0, & \text{if } \mathbf{x} \text{ is on the boundary,} \\ < 0, & \text{if } \mathbf{x} \text{ is outside.} \end{cases} \quad (4.2)$$

通过提取  $\phi_{\Theta}$  的零水平集，可以轻松获得结构的边界。本章算法利用神经网络拟合结构的 SDF，网络参数记为  $\Theta$ 。这种隐式表示方法的主要优点是与空间网格解耦，输入设计域内任意点的坐标，即可获得相应的 SDF 值，无需依赖预定义的空间网格。理论上，这使得可以在任何所需分辨率下获取结构（如图 4.3 (c) 所示）。然而，需要注意的是，结构细节的复杂性取决于所使用神经网络的表达能力，更复杂的神经网络能够捕捉到更复杂的结构细节。鉴于训练数据集来源于 SIMP 方法，该方法生成结构的密度场，因此需要在 SDF 和密度场之间建立相互转换。通过经典的距离变换方法<sup>[63]</sup>，从结构的密度场导出 SDF。一旦获得结构的 SDF，即可将其转

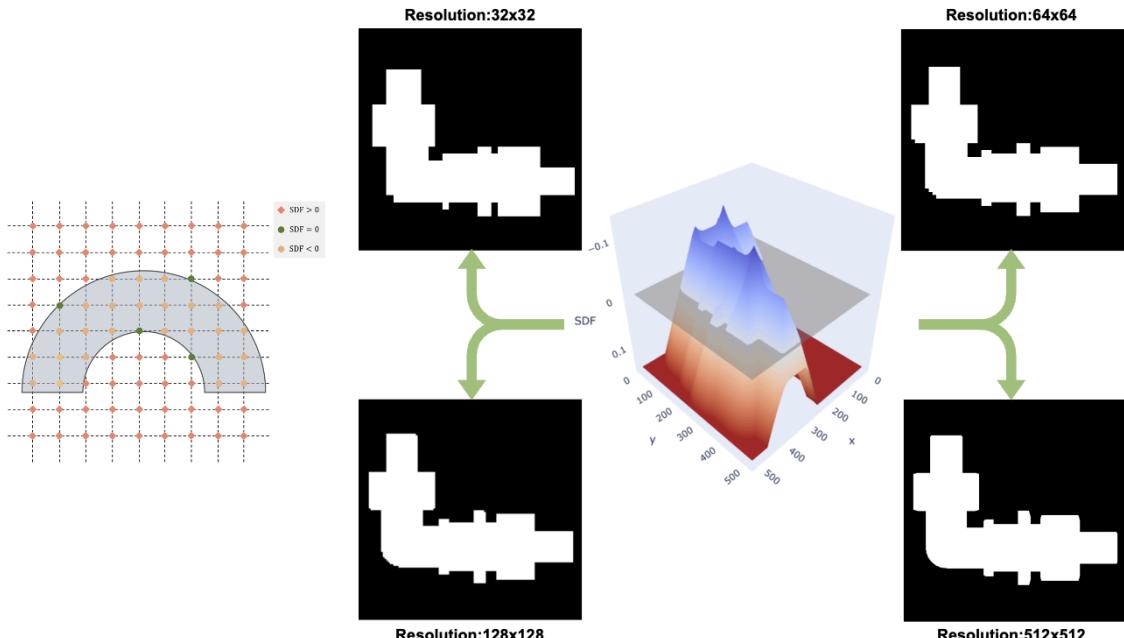


图 4.3 基于 SDF 的结构表示

换为密度场，具体步骤如下：

$$\phi^D(\phi^{SDF}(\mathbf{x})) = \begin{cases} 0, & \text{if } \phi^{SDF}(\mathbf{x}) > 0, \\ 1, & \text{if } \phi^{SDF}(\mathbf{x}) \leq 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

### 4.2.3 基于立方复形的持续同调分析

拓扑数据分析 (TDA) 是一种创新方法，结合了拓扑学、几何学和数据科学，以揭示复杂数据集中有意义的模式和结构。通过关注数据的固有形状和连接性，TDA 提供了宝贵的见解和对数据内部关系的深入理解。单纯复形<sup>[64]</sup> 常用于离散数据空间，表示数据点之间的连接关系。本文使用立方复形来分析结构的隐式神经表示的拓扑特征。由于结构使用符号距离场表示，立方复形提供了一个有效的框架，用于提取和分析这些表示中编码的潜在拓扑信息。

**定义 4.1 (立方复形):** 一个立方复形  $C$  是一组有限的  $n$  维立方体，形式为  $[a_1, b_1] \times \cdots \times [a_n, b_n]$ ，其中  $a_i, b_i \in \mathbb{R}$  且  $a_i \leq b_i$ ，并满足以下条件：

1. 如果一个立方体  $c \in C$ ，那么  $c$  的所有面也在  $C$  中。
2. 如果两个立方体  $c_1, c_2 \in C$  有非空交集，那么它们的交集要么是  $c_1$  和  $c_2$  的一个面，要么是  $C$  中的一个立方体。

直观地说，在基于二维数据的立方复形中，基本元素包括点（0 维立方体）、线段（1 维立方体）和正方形（2 维立方体）。图 4.4(a) 展示了使用离散元素对结构进行二值化表示。在这种表示中，密度值等于 1 的元素（实心元素）组合形成立方复形  $C_s$ ，可以计算  $C_s$  的拓扑特征，即 **Betti 数**。Betti 数反映了结构中连通分量的数量（0 维 Betti 数  $\beta_0$ ）和孔洞的数量（1 维 Betti 数  $\beta_1$ ）。然而，Betti 数是离散的拓扑特征，不可微，不能直接用于网络训练。为了解决这个问题，使用持久同调方法提取结构的拓扑特征。

持久同调<sup>[65]</sup> 是一种强大的数学工具，用于计算和分析嵌套单纯复形中的多维拓扑特征。它可以跟踪超水平集滤波中所有复形上的拓扑特征演变，如定义 4.2 所述。根据研究问题，有多种定义滤波的方法。在本文算法中，将结构的 SDF（图 4.4(b)）作为分配给  $C_s$  的滤波函数。然后，定义一个连续特征度量，即 **持久性**，用于分析数据的多维拓扑特征，如定义 4.3 所述。可以将拓扑特征的出生值、死亡值和持久性编码在一个 **持久性图** (PD) 中，如图 4.4(c) 所示。持久性图作为一个多维形状描述符，捕捉结构的所有拓扑特征。

**定义 4.2 (超水平集滤波):** 定义一个滤波函数  $f : C_s \rightarrow \mathbb{R}$ ，它为  $C_s$  中的每个元素分配一个实数值。函数  $f$  的超水平集滤波是一个嵌套的复形序列  $\emptyset \subseteq C_0 \subseteq C_1 \subseteq \cdots \subseteq C_n = C_s$ ，其中  $C_i = \{c \in C_s | f(c) \leq \alpha_i\}$ ，且  $\alpha_0 \leq \alpha_1 \leq \cdots \leq \alpha_n$ 。

**定义 4.3 (持久性):** 对于一个拓扑特征  $\beta_k$ , 其持久性定义为该特征的出生值与死亡值之间的差, 即  $\text{pers}(\beta_k) = |\alpha_i - \alpha_j|$ , 其中出生值  $\alpha_i$  和死亡值  $\alpha_j$  分别对应于该特征被创建和消失时的滤波值。持久对  $(\alpha_i, \alpha_j)$  也描述了拓扑特征。特别地,  $(\alpha_i, +\infty)$  反映了一个在  $\alpha_i$  处出生并持续到滤波结束的特征。

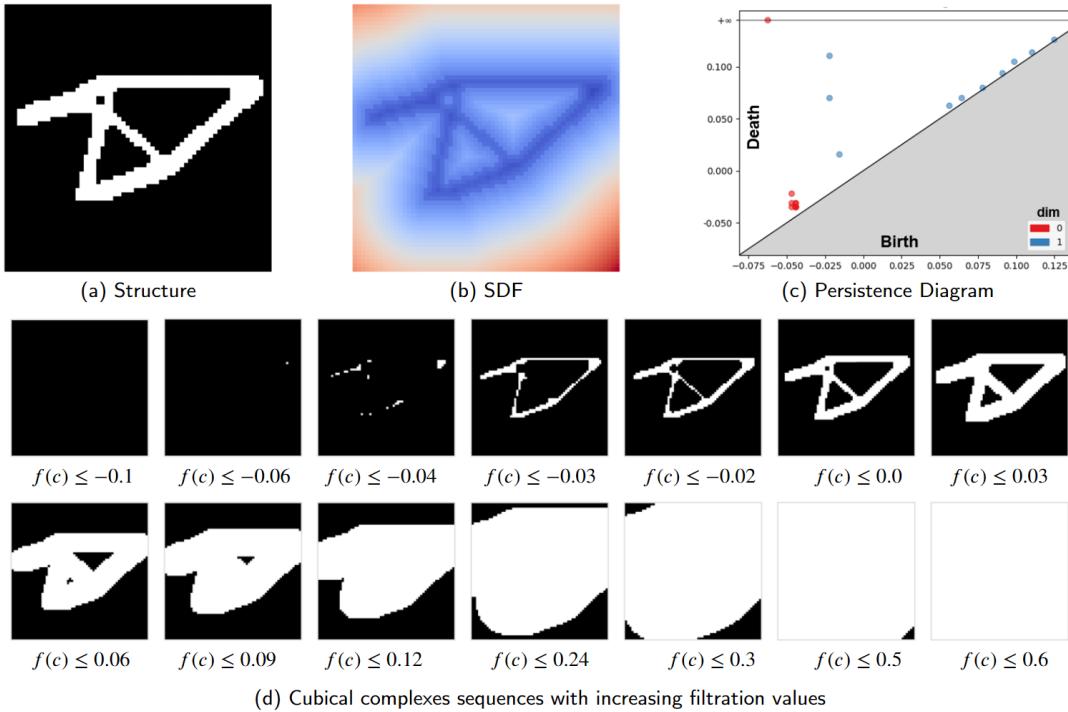


图 4.4 基于持续同调技术的拓扑特征表示示意图

### 4.3 研究方法

本算法采用 SIMP 方法生成二维数据集，得到在特定条件下（包括载荷、位移约束和体积约束）最小化结构柔度的最优结构（称为真实值，GT）。IF-TONIR 的关键思想是利用变分自编码器（VAE）重建最优结构。通过训练，网络捕捉结构特征并将其编码到低维潜在空间中。然后，从这个潜在空间生成相应的最优结构，同时考虑边界信息和设计域形状作为条件。具体而言，使用物理网络从边界条件和物理场中提取特征。这个特征向量作为条件码，引导网络根据给定问题配置生成结构。通过将点坐标及其与设计域形状相关的属性输入解码器，网络可以有效识别材料可分布的设计区域。

### 4.3.1 数据集

将训练良好的模型推广到任意设计域和约束条件可能具有挑战性，即使是形

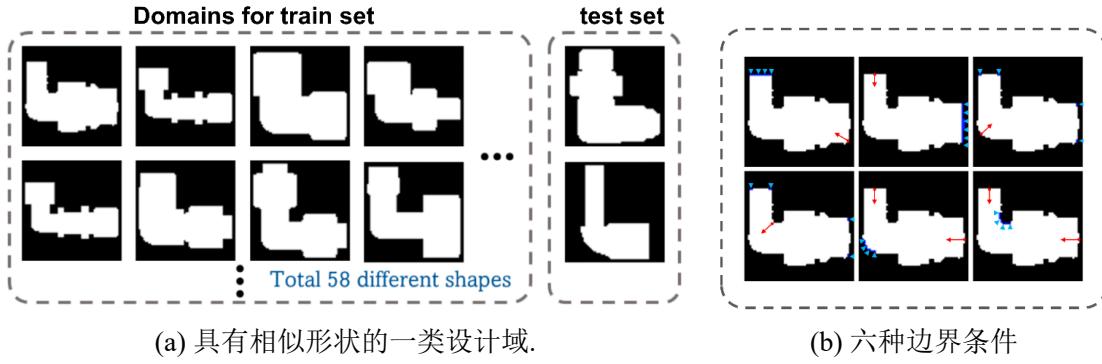


图 4.5 数据集准备

程。为了解决这一问题，准备了一个数据集，将具有相似特征的设计域分类为组，如图 4.5(a) 所示。在这个由该组设计域生成的最优结构组成的数据集上训练 IF-TONIR。因此，在处理形状相似的设计域时，网络可以直接预测相应的最优结构。

此外，考虑到实际应用中，尽管尺寸不同，但具有相同功能的工业部件通常具有相似的载荷情况，因此无需要求网络推广到任意载荷条件。因而，为每个形状设计域设置了六种边界条件（图 4.5(b)）。每个边界条件包括不同的载荷方向和体积约束。IF-TONIR 的潜在应用场景是，对于需要优化的形状相似的部件，训练于先前最优结构的网络可以直接生成优化解，而无需迭代。文献<sup>[66]</sup> 提供了一个紧凑且高效的 SIMP Matlab 实现，用于生成相应的最优结构作为真实值。生成训练数据集的具体参数详见表 4.1。在准备数据集时，固定每个设计域类别中形状的材料属性。在实验设置中，杨氏模量和泊松比分别设为 1.0 和 0.2。将体积约束和力的方向作为每个优化问题的变量，使用传统方法<sup>[66]</sup> 迭代获得优化结果，这些结果作为训练的真实值。本工作提供了一种连续梯度惩罚方案，以减少 SIMP 方法中的棋盘现象，从而优化具有清晰边界的结构。此外，与固定惩罚系数相比，该方案可以生成柔度更低的结构。因此，采用文章中提供的 SIMP 惩罚设置参数 50, 3, 25, 0.25 来生成优化问题的优化结构。

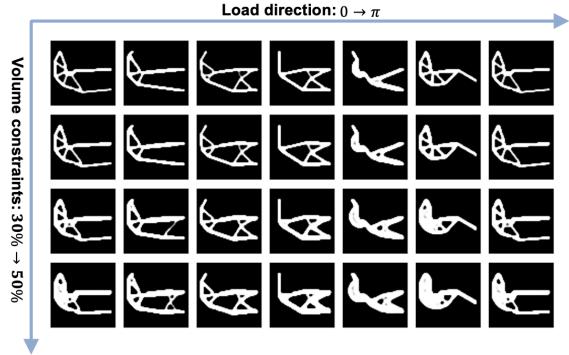
观察到，在相应边界条件下，原始设计域的物理响应分析结果与最优结构之间存在很强的相关性。因此，除了 SDF 表示和边界条件外，还计算了原始结构在载荷和位移约束下的应力场和应变能场。这些额外的物理场作为训练过程中的补充信息，在之前的工作中（如 TopologyGAN<sup>[67]</sup> 和 TopoDiff<sup>[68]</sup>）已被验证有效。

### 4.3.2 网络结构

网络架构主要包括两个部分，如图 4.1 所示，包含一个基于变分自编码器的最优结构重建网络，以及一个负责将边界条件和物理场编码为条件码的物理网络。

表 4.1 用于生成数据集的参数设置

参数	设置
体积约束	[0.3 : 0.02 : 0.5]
施力方向	[0 : $\pi/6$ : $\pi$ ]
分辨率	$64 \times 64$
SIMP 惩罚因子	{50, 3, 25, 0.25}
SIMP 滤波半径	10
杨氏模量	1.0
泊松比	0.2



#### 4.3.2.1 网络输入

在数据集中，原始二维最优结构表示为分辨率为  $64 \times 64$  的二值图像，其中“1”（白色）表示实心元素，“0”（黑色）表示空心元素。将结构的 SDF  $\{\mathbf{s}_i^s\}_{i=1}^N$  计算为 VAE 网络的输入（如图 4.6(a)），其中  $N$  为样本总数。由于 VAE 是一种自监督学习方法，SDF  $\mathbf{s}_i^s$  也作为网络回归输出的真实值（GT）。此外，设计域的 SDF  $\{\mathbf{s}_i^d\}_{i=1}^N$  作为属性附加到点上，用于识别设计域的形状（如图 4.6(b)）。

如图 4.6(c) 所示，载荷和位移约束表示为二维稀疏矩阵。在载荷矩阵中（包括  $x$  方向和  $y$  方向），每个元素的值为力值。位移约束使用相同大小的矩阵表示，值为 1 的元素表示相应元素在  $x$  和  $y$  方向上的位移约束为 0，而值为 0 的元素表示无约束元素。补充的物理信息包括在特定载荷和位移约束下原始结构的应力场和应变场，这些信息通过 SolidsPy<sup>[69]</sup>计算得到。通过整合这五个场，获得物理信息数据样本  $\{\mathbf{s}_i^{phy}\}_{i=1}^N$ 。

#### 4.3.2.2 用于结构重建的 VAE

IF-TONIR 的主要目标之一是对输入的最优结构进行先验学习和隐式重建。为此，采用了变分自编码器（VAE）网络，这是一种广泛使用的生成模型。VAE 网络由编码器和解码器组成。在该方法中，使用 ResNet18 架构作为编码器。ResNet18<sup>[70]</sup>是一种知名的卷积神经网络架构，在各种图像相关任务中表现出色。编码器通过一系列二维卷积层处理最优结构的输入 SDF，提取特征并将其映射到低维潜在空间。此外，还将条件信息  $\{\mathbf{s}_i^{phy}\}_{i=1}^N$  输入到编码器中。编码器  $\phi^E$  的目的是学习潜在编码  $\mathbf{z}_i$  的分布，该编码能够重建输入数据  $\mathbf{s}_i^s$ 。通常，假设潜在编码  $\mathbf{z}_i$  遵循高斯分布，

$$q_{\phi^E}(\mathbf{z}_i | \mathbf{s}_i^s, \mathbf{s}_i^{phy}) = \mathcal{N}(\mu_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s, \mathbf{s}_i^{phy}), \sigma_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s, \mathbf{s}_i^{phy})), \quad (4.4)$$

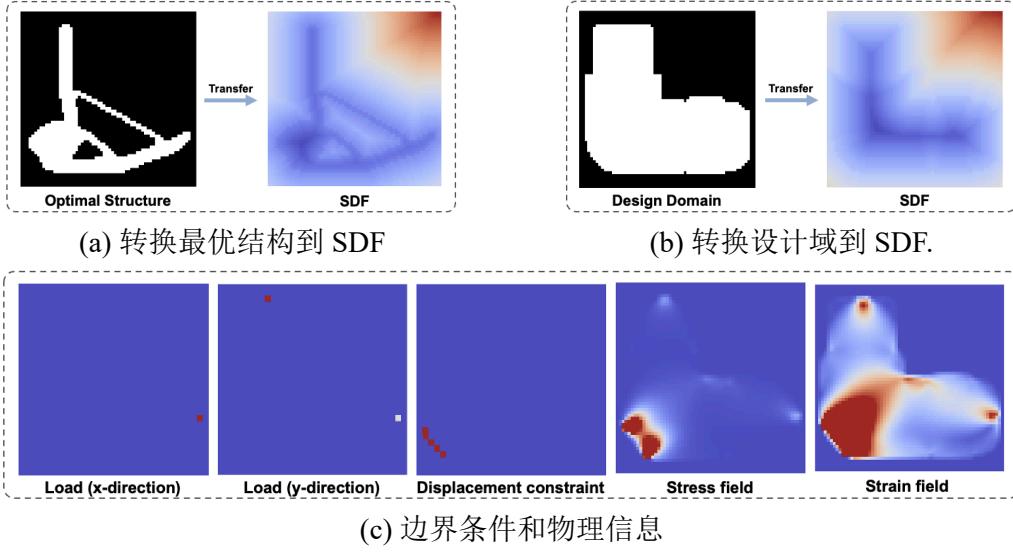


图 4.6 网络输入数据信息构成

其中,  $\mu_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s)$  和  $\sigma_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s)$  是由编码器  $\phi^E$  参数化的潜在编码的均值和方差。然后, 采用重新参数化技巧<sup>[71]</sup>将潜在编码  $\mathbf{z}_i$  表示为:

$$\mathbf{z}_i = \mu_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s, \mathbf{s}_i^{phy}) + \sigma_{\phi^E}(\mathbf{s}_i^s, \mathbf{s}_i^{phy}) \odot \epsilon, \quad (4.5)$$

其中,  $\epsilon$  是从标准高斯分布中采样的随机变量,  $\odot$  是元素逐个相乘。编码之后, 采用基于多层感知器 (MLP) 的解码器  $\phi^D$  对潜在编码  $\mathbf{z}_i$  进行解码, 并重建最优结构的 SDF。在设计域内采样点, 并将这些点的坐标输入到解码器中。解码器返回每个点的符号距离值。通过这种方式, 解码器有效地充当结构的符号距离函数。在训练过程中, 在设计域内均匀采样  $64 \times 64$  个点  $\{\mathbf{p}_k\}_{k=1}^M$ 。通过最小化解码器输出的 SDF  $\hat{\mathbf{s}}_i^s$  与 GT 输入之间的重建误差来训练网络。

以下列出 IF-TONIR 的网络架构细节, 采用浅层卷积神经网络 (如表 4.2 所示) 从边界设置和物理场中提取特征作为条件。对于 VAE, 使用 ResNet18<sup>[72]</sup>作为编码器, 使用 MLP 作为解码器 (如表 4.3 所示)。

#### 4.3.2.3 条件信息输入

为了使网络能够在各种设计域形状和边界条件下生成结构, 必须将条件信息纳入网络中。为此, 引入了先验概率分布  $p(\mathbf{s}_i^s | \mathbf{c})$ , 其中  $\mathbf{c}$  表示条件信息。条件信息包括设计域形状、载荷、位移约束和体积约束等。

边界设置包括五个二维张量, 分别是  $x$  和  $y$  方向的载荷矩阵、位移约束矩阵、应力场和应变场。采用浅层卷积神经网络 (CNN) 有效表示和编码这些边界信息作为条件。CNN 网络以边界张量  $\mathbf{s}_I^{phy}$  为输入, 通过一系列卷积层处理, 捕捉相关特征和模式。这使得物理网络能够生成包含边界条件关键信息的潜在编码  $\mathbf{c}_i^{phy}$ 。通

CNN				
网络层	卷积核尺寸	卷积步长	卷积补丁	通道数
2D Conv	$3 \times 3$	1	1	$5 \rightarrow 64$
Batch Norm				
LeakyReLU				
Max Pool	2	1	1	$64 \rightarrow 64$
2D Conv	$3 \times 3$	1	1	$64 \rightarrow 64$
Batch Norm				
LeakyReLU				
Max Pool	2	1	1	$64 \rightarrow 64$
2D Conv	$3 \times 3$	1	1	$64 \rightarrow 32$
Batch Norm				
LeakyReLU				
Max Pool	2	1	1	$32 \rightarrow 32$
2D Conv	$3 \times 3$	1	1	$32 \rightarrow 32$
Batch Norm				
LeakyReLU				
Max Pool	2	1	1	$32 \rightarrow 32$
2D Conv	$3 \times 3$	1	1	$32 \rightarrow 32$
Batch Norm				
LeakyReLU				
Max Pool	2	1	1	$32 \rightarrow 32$
Output: $1 \times 128$				

表 4.2 用于提取物理场特征的 CNN 网络架构

基于 MLP 的解码器			
网络层	输入维度	输出维度	丢弃率
Fully Connected	$dim_z + dim_c + dim_p$	512	0.0
Fully Connected	512	512	0.0
Batch Norm			
Fully Connected	512	512	0.1
Batch Norm			
Fully Connected	512	512	0.0
Batch Norm			
Fully Connected	512	512	0.1
Batch Norm			
Fully Connected	$512 + dim_p$	512	0.0
Batch Norm			
Fully Connected	512	512	0.0
Batch Norm			
Fully Connected	512	512	0.1
Batch Norm			
Fully Connected	$512 + dim_p$	512	0.0
Batch Norm			
Fully Connected	512	1	0.0
tanh			

表 4.3 用于生成最优结构的解码器

过将边界条件编码为潜在编码，使网络在生成过程中能够有效利用这些信息，确保生成的结构与指定的边界条件一致。

由于解码器基于设计域内输入点  $\mathbf{p}_k = (x_k, y_k) \in \Omega$  的坐标输出 SDF 值，可以将形状信息和体积约束作为附加属性添加到该点。属性  $\mathbf{s}_i^d(\mathbf{p}_k)$  帮助网络识别设计域的形状，从而确定材料分布的边界。将体积约束  $v_i$  作为属性附加到每个点上，可以看作是表示该点处材料存在或不存在的概率密度分布。因此，将与每个点相关的向量  $\mathbf{c}_k^{pro} = (x_k, y_k, \mathbf{s}_i^d(\mathbf{p}), v_i)$  输入到解码器中。这使得网络在生成 SDF 值时能够考虑设计域形状和体积约束。Rahaman 等人<sup>[73]</sup>证明了深度神经网络倾向于学习低频函数，这可能限制其准确拟合高频变化数据的能力。借鉴 NeRF<sup>[57]</sup>的灵感，使用编码函数  $\gamma(t)$  将点属性  $t \in \mathbb{R}$  映射到高维空间  $\mathbb{R}^{2L}$ ：

$$\gamma(t) = (\sin(2^0 \pi t), \cos(2^0 \pi t), \sin(2^1 \pi t), \cos(2^1 \pi t), \dots, \sin(2^{L-1} \pi t), \cos(2^{L-1} \pi t)), \quad (4.6)$$

其中， $L$  是一个超参数，决定了编码函数的频率。在实验中，设定  $L = 4$  用于编码输入点  $\mathbf{p}_k = (x_k, y_k)$  的坐标， $L = 6$  用于编码  $\mathbf{s}_i^d(\mathbf{p}_k)$ ， $L = 10$  用于编码体积约束。此外，还可以将载荷和位移约束作为属性添加到点上，进一步增强网络识别边界条件的能力。

综上所述，将最优结构的潜在编码  $\mathbf{z}_i$ 、条件编码  $\mathbf{c}_i^{phy}$  和点属性  $\mathbf{c}_k^{pro}$  进行连接。然后将组合向量输入解码器进行结构生成。通过整合这些组件，网络能够利用潜在空间、条件信息和点属性，生成满足设计域形状和条件的最优结构。

### 4.3.3 损失函数和评估指标

与经典的变分自编码器（VAE）类似，IF-TONIR 在训练过程中使用包含重构损失和 KL 散度损失的损失函数。然而，为了提高结构重构的准确性，除了传统的几何损失外，还引入了拓扑损失。该拓扑损失旨在确保生成的结构具有与 GT 结构相同的拓扑。

#### 4.3.3.1 几何损失

几何损失衡量网络预测的 SDF 值  $\hat{s}_i^s$  与结构的 GT SDF 值  $s_i^s$  之间的回归误差。值得注意的是，结构的形状主要由其边界决定，而非边界点的值则不太重要。为了优先保证边界附近点的准确性，采用了在公式 (4.7) 中定义的夹紧  $L_1$  损失函数<sup>[74]</sup>，这使得 IF-TONIR 能够有效捕捉结构细节并保持所需的形状特征，

$$\mathcal{L}_{clamp}(\hat{s}_i^s, s_i^s) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M |\chi(\hat{s}_i^s(\mathbf{p}_k), \tau) - \chi(s_i^s(\mathbf{p}_k), \tau)|, \quad (4.7)$$

其中， $M$  是设计域采样点总数， $\chi(x, \tau) = \min(\tau, \max(-\tau, x))$ .

为了对输出结构施加体积约束，加入了一个体积损失项，该损失项量化了预测结构与目标结构在体积上的差异。通过以下积分方程从结构的 SDF 表示中计算其体积<sup>[75]</sup>：

$$V(\mathbf{s}) = \int_{\Omega} H(-\mathbf{s}(\mathbf{p})) \, dA, \quad (4.8)$$

其中， $\Omega$  是整个设计域， $dA$  是面积元素， $H(\cdot)$  是 Heaviside 函数，

$$H(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x < -\eta, \\ \frac{3}{4}(\frac{x}{\eta} - \frac{x^3}{3\eta^3}) + \frac{1}{2}, & \text{if } -\eta \leq x \leq \eta, \\ 0, & \text{if } x > \eta. \end{cases} \quad (4.9)$$

然后定义体积损失如下：

$$\mathcal{L}_{vol}(\hat{s}_i^s, s_i^s) = |V(\hat{s}_i^s) - V(s_i^s)| / V(s_i^s). \quad (4.10)$$

综上，几何损失就是 clamped  $L_1$  损失，MSE 损失和体积损失的和：

$$\mathcal{L}_{geo}(\hat{s}_i^s, s_i^s) = \mathcal{L}_{clamp}(\hat{s}_i^s, s_i^s) + \mathcal{L}_{vol}(\hat{s}_i^s, s_i^s). \quad (4.11)$$

在实验中，本算法设置  $\tau = 0.05, \eta = 0.02$ 。

### 4.3.3.2 拓扑损失

几何损失关注局部信息，而拓扑损失捕捉全局结构特征。如图 4.8(b) 所示，小的结构缺陷可能导致结构断裂，从而显著降低结构的顺应性。然而，这些错误在几何损失中可能只会导致小的数值。通过引入拓扑损失，IF-TONIR 能够有效检测和衡量微小的结构断裂。

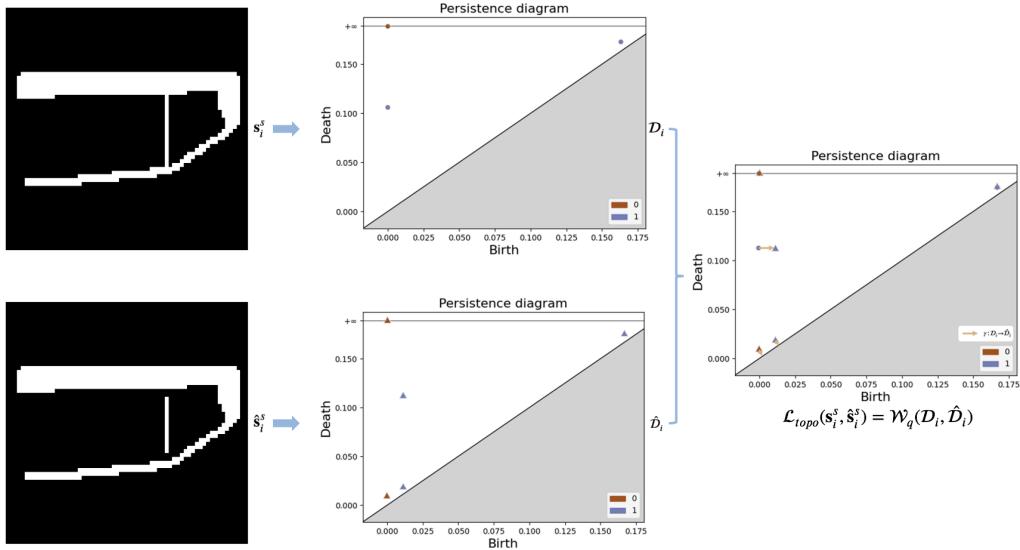


图 4.7 拓扑损失  $\mathcal{L}_{topo}$  的说明

为了获得结构  $s$  的可微拓扑特征，采用持久同调分析来导出其对应的持久图  $\mathcal{D}$ 。如图 4.7 所示，将拓扑损失  $\mathcal{L}_{topo}$  定义为从 GT 和网络预测结构中获得的持久图  $D_i$  和  $\hat{D}_i$  之间的 Wasserstein 距离：

$$\mathcal{L}_{topo}(\mathbf{s}_i^s, \hat{\mathbf{s}}_i^s) = \mathcal{W}_q(D_i, \hat{D}_i) = \left( \inf_{\gamma: D_i \rightarrow \hat{D}_i} \sum_{p \in D_i} \|p, \gamma(p)\|^q \right)^{1/q}, \quad (4.12)$$

其中， $\|\cdot\|$  是  $L_2$  范数， $\gamma$  是  $D_i$  和  $\hat{D}_i$  之间的双射， $q$  是控制拓扑损失敏感度的超参数。在实验中，设定  $q = 2$ 。使用 GUDHI 库<sup>[76]</sup>计算拓扑损失。为了提高效率，采用了并行处理进行加速。如图 4.8 所示，与几何损失相比，拓扑损失在捕捉结构缺陷和断裂方面更为有效。结构 (a) 是一个单连通 ( $\beta_0 = 1$ ) 且有一个孔 ( $\beta_1 = 1$ ) 的结构。与结构 (a) 相比，结构 (b) 由于缺少一个实心元素而断裂，导致孔消失 ( $\beta_1 = 0$ )，但保持单连通组件 ( $\beta_0 = 1$ )。尽管结构特征发生了显著变化 (高结构顺应性误差  $\mathcal{E}_{comp}$ )，缺少一个元素仍然导致低几何损失，而拓扑损失则表现出显著响应。由于缺少两个实心元素，结构 (c) 由两个断开的组件组成 ( $\beta_0 = 2$ )。同样，拓扑损失比相对较低的几何损失表现出更大的响应。为比较，设置了结构 (d)，其增加了一个实心元素，其拓扑特征与结构 (a) 保持一致。对于结构 (d)，几何损失、拓扑损失

和顺应性误差都保持在相对较低的水平。因此，采用以下重构损失来训练深度神经网络，使网络能够更准确地重构结构，

$$\mathcal{L}_{recon}(\mathbf{s}_i^s, \hat{\mathbf{s}}_i^s) = \lambda_1 \mathcal{L}_{geo}(\mathbf{s}_i^s, \hat{\mathbf{s}}_i^s) + \lambda_2 \mathcal{L}_{topo}(\mathbf{s}_i^s, \hat{\mathbf{s}}_i^s), \quad (4.13)$$

在实验中，设定权重  $\lambda_1 = 0.7, \lambda_2 = 0.3$ 。拓扑损失的应用在某种程度上确保了输出结构的完整性。

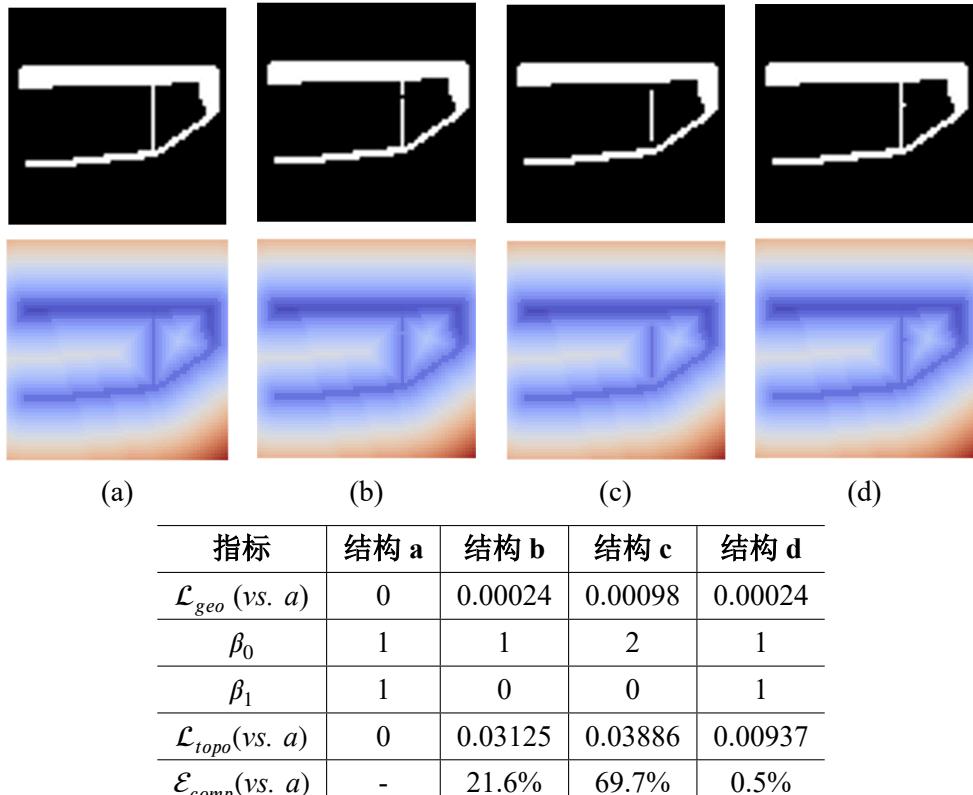


图 4.8 几何损失和拓扑损失的比较

除了重构损失外，VAE 还需要 KL 散度损失来约束学习到的潜在空间分布，使其匹配预定义的先验分布<sup>[71]</sup>，这鼓励学习到的分布与先验分布相匹配，促进模型捕捉数据的基本特征。KL 散度损失定义为：

$$\mathcal{L}_{KL} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (1 + \log(\sigma_i^2) - \mu_i^2 - \sigma_i^2) \quad (4.14)$$

其中， $\mu_i$  和  $\sigma_i$  分别表示第 i 个数据样本的学习潜在分布的均值和标准差，N 是数据样本的总数。最小化 KL 散度损失鼓励潜在空间接近均值为零、方差为一的多元高斯分布，从而确保更好的样本生成和潜在空间插值特性。因此，使用下面总损失来训练 IF-TONIR，

$$\mathcal{L}_{total} = \mathcal{L}_{recon} + \mathcal{L}_{KL} \quad (4.15)$$

### 4.3.3.3 评估指标

除了上述损失函数外，还使用重建准确性和物理准确性指标来评估 IF-TONIR 的性能。为了评估网络在结构重构方面的准确性，使用交并比（IoU）指标来量化 GT 结构与网络输出之间的差异，该指标常用于目标检测<sup>[77]</sup>，

$$\mathcal{E}_i^{IoU} = \frac{\|\Omega_{\hat{s}_i^s} \cap \Omega_{s_i^s}\|}{\|\Omega_{\hat{s}_i^s} \cup \Omega_{s_i^s}\|}, \quad (4.16)$$

其中， $\Omega_{\hat{s}_i^s}$  和  $\Omega_{s_i^s}$  分别是被  $\hat{s}_i^s \leq 0$  和  $s_i^s \leq 0$  占据的区域。 $\|\cdot\|$  表示该区域的面积。

为了评估原始优化问题的目标和体积约束的有效性，进一步分析了相对体积和结构柔度的误差，

$$\mathcal{E}_i^{vol} = \frac{|V(\hat{s}_i^s) - V(s_i^s)|}{V(s_i^s)}, \quad (4.17)$$

$$\mathcal{E}_i^{comp} = \frac{|C(\hat{s}_i^s) - C(s_i^s)|}{C(s_i^s)} \quad (4.18)$$

其中， $V(s_i^s) = \int_{\Omega_{s_i^s}} 1 dA$ ， $C(s_i^s)$  在公式 (4.1) 中定义。

### 4.3.4 训练和生成

IF-TONIR 算法表明，一旦神经网络经过充分训练并收敛，可以通过无迭代方法直接生成在体积约束下具有低顺应性的最优结构。算法 4.1 中概述了 IF-TONIR 的训练过程。基于 VAE 网络，将优化结构的 SDF 嵌入低维潜在空间。通过从学习到的潜在空间中采样，可以生成新的结构。为了指导生成过程，将设计域形状、载荷和位移约束作为属性附加到空间坐标上，并结合从物理网络获得的条件信息。然后，使用训练好的解码器获得优化的结构。详细的生成过程如算法 4.2 所示。

## 4.4 实验和分析

### 4.4.1 超参数设置和收敛性

本算法所用的训练数据集包含 26796 个样本，涵盖了图 4.5 所示的设计领域。对于每个训练 epoch，随机选择 21437 个样本(占 80%)用于训练，5359 个样本(占 20%)用于验证。模型在包含 924 个样本的测试数据集上进行评估，这些样本来自未见过的设计领域。

模型根据算法 4.1 在配备 Nvidia A40 GPU 的机器上进行训练，使用 Adam 优化器，初始学习率为 0.001，每 20 个 epoch 将学习率减少 0.5 倍。在训练过程中，将结构刚度作为损失函数或准确性指标是非常耗时的。尽管 TopoDiff<sup>[68]</sup> 提出了一

---

**算法 4.1 IF-TONIR 的训练**


---

**Require:** 结构的 GT SDFs:  $\{\mathbf{s}_i^s\}_{i=1}^N$ ; 设计域:  $\{\mathbf{s}_i^d\}_{i=1}^N$ ; 物理场:  $\{\mathbf{s}_i^{phy}\}_{i=1}^N$ ; 体积约束:  $\{v_i\}_{i=1}^N$ ; 采样点:  $\{\mathbf{p}_k = (x_k, y_k)\}_{k=1}^M$

**Ensure:** 最优网络参数  $\Theta^* = \{\Theta_{vae}^*, \Theta_{phy}^*\}$

- 1: 初始化网络  $\Phi_{vae}^E, \Phi_{vae}^D, \Phi_{phy}, \lambda_1, \lambda_2$
- 2: **while** 未收敛 **do**
- 3: 将数据集划分为  $M$  个批次  $\{\mathcal{T}_i\}_{i=1}^M$
- 4: **for all** 批次  $\mathcal{T}_i$  **do**
- 5: 初始化  $\mathcal{L}_{geo}^i = 0, \mathcal{L}_{topo}^i = 0$
- 6: **for all** 批次中的样本  $\mathbf{s}_j$  **do**
- 7: 计算结构潜在编码:  $\mathbf{z}_j = \Phi_{vae}^E(\mathbf{s}_j^s)$
- 8: 计算点属性向量:  $\mathbf{c}_k^{prop} = [\gamma(x_k), \gamma(y_k), \gamma(\mathbf{s}_i^d), \gamma(v_i)]$
- 9: 计算条件编码:  $\mathbf{c}_j^{phy} = \Phi_{phy}(\mathbf{s}_j^{phy})$
- 10: 连接潜在编码:  $\mathbf{l}_j = [\mathbf{z}_j, \mathbf{c}_k^{prop}, \mathbf{c}_j^{phy}]$
- 11: 计算重构的 SDF:  $\hat{\mathbf{s}}_j^s = \Phi_{vae}^D(\mathbf{l}_j)$
- 12: 评估几何损失:  $\mathcal{L}_{geo}^i = \mathcal{L}_{geo} + (\mathcal{L}_{clamp}(\hat{\mathbf{s}}_j^s, \mathbf{s}_j^s) + 0.1 * \mathcal{L}_{mse}(\hat{\mathbf{s}}_j^s, \mathbf{s}_j^s))$
- 13: 通过持久同调计算 PDs:  $\mathcal{D}_j, \hat{\mathcal{D}}_j$
- 14: 评估拓扑损失:  $\mathcal{L}_{topo}^i = \mathcal{L}_{topo} + \mathcal{W}_q(\hat{\mathcal{D}}_j, \mathcal{D}_j)$
- 15: 评估重构损失:  $\mathcal{L}_{recon}^i = \lambda_1 \mathcal{L}_{geo}^i + \lambda_2 \mathcal{L}_{topo}^i$
- 16: **end for**
- 17: 评估总损失函数:  $\mathcal{L}_{total}^i = \mathcal{L}_{recon}^i + \mathcal{L}_{KL}$
- 18: 通过  $\frac{\partial \mathcal{L}_{total}^i}{\partial \Theta}$  更新  $\Theta$
- 19: **end for**
- 20: **end while**

---



---

**算法 4.2 通过 IF-TONIR 生成最优结构**


---

**Require:** 设计域:  $\mathbf{s}^d$ ; 边界条件: 载荷和位移约束; 体积约束:  $v$ ; 设计域内的采样点:  $\{\mathbf{p}_k\}_{k=1}^M$ ; 最优网络参数:  $\Theta^* = \{\Theta_{vae}^*, \Theta_{phy}^*\}$

**Ensure:** 在给定体积约束  $v$  下具有最小柔度的最优结构  $\mathbf{s}^*$

- 1: **步骤 1:** 从标准高斯分布中采样形状潜在编码  $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(0, 1)$
- 2: **步骤 2:** 计算点属性向量:  $\mathbf{c}_k^{prop} = [\gamma(x_k), \gamma(y_k), \gamma(\mathbf{s}^d), \gamma(v)]$
- 3: **步骤 3:** 根据边界条件计算物理场  $\mathbf{s}^{phy}$
- 4: **步骤 4:** 计算物理潜在编码:  $\mathbf{c}^{phy} = \Phi_{phy}(\mathbf{s}^{phy}; \Theta_{phy}^*)$
- 5: **步骤 5:** 计算体积约束编码:  $\gamma(v)$
- 6: **步骤 6:** 连接潜在编码:  $\mathbf{l} = [\mathbf{z}, \mathbf{c}_k^{prop}, \mathbf{c}^{phy}]$
- 7: **步骤 7:** 生成最优结构的 SDF:  $\mathbf{s}_s^* = \Phi_{vae}^D(\mathbf{l}; \Theta_{vae}^*)$
- 8: **步骤 8:** 从 SDF 中提取结构:  $\mathbf{s}^*$

---

一个回归模型来预测生成结构的刚度，但需要额外的数据准备和网络训练。因此，使用 IoU 指标来监控训练过程，将来会将物理量监督纳入考虑。图 4.9 展示了训练过程中损失和 IoU 准确性的稳定收敛。可以观察到，随着训练的进行，生成的结构逐渐变得更加合理和稳健。大约需要 150 个 epoch 才能得到 IoU 准确性约为 94% 的预测结果。

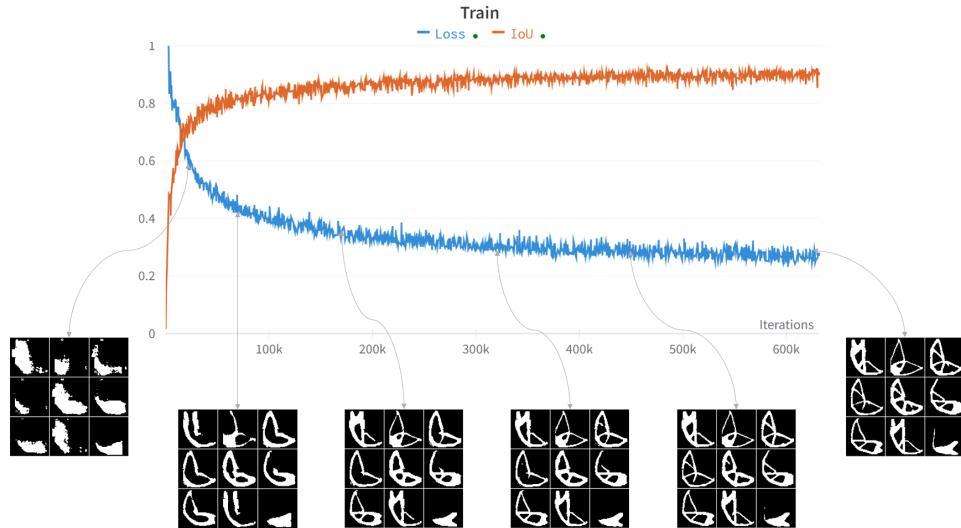


图 4.9 IF-TONIR 的训练过程

#### 4.4.2 性能评估

完成训练后，评估生成结构在结构刚度和体积方面的准确性。如图 4.10 所示，IF-TONIR 成功预测出了与训练数据集中 GT 样本非常相似的结构，它准确地识别了设计域的形状以及施加载荷的位置。在整个训练数据集上，IF-TONIR 的平均刚度误差为 6.90%，平均体积误差为 1.32%。为验证 IF-TONIR 的有效性，在测试数据集上评估其性能，如图 4.11 所示。测试数据集的平均刚度误差为 54.2%，平均体积误差为 4.02%。值得注意的是，测试数据集包含了两种训练过程中未观察到的设计域形状。因此，测试数据集中的边界条件位置与训练数据集完全不同。据悉，该算法是首个将设计域形状作为泛化能力一部分的算法。

#### 4.4.3 消融实验

**拓扑损失。** 结构不连续性常会导致不稳定或高刚度，图 4.12 说明了拓扑损失在改善生成结构的结构连续性方面的有效性。由于采用结构的 SDFs 作为计算持续同调的过滤值，所得到的 PD 可以有效捕捉数据的几何和拓扑特征。连续的过滤值场使训练过程更加稳定，从而使网络生成的结构能够与 GT 样本非常相似。

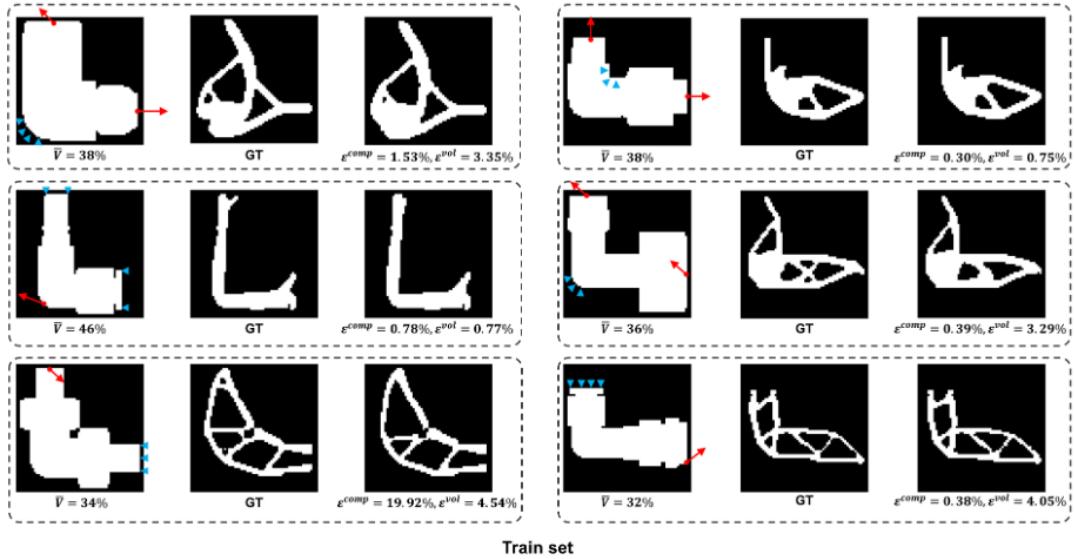


图 4.10 训练数据集上的测试结果

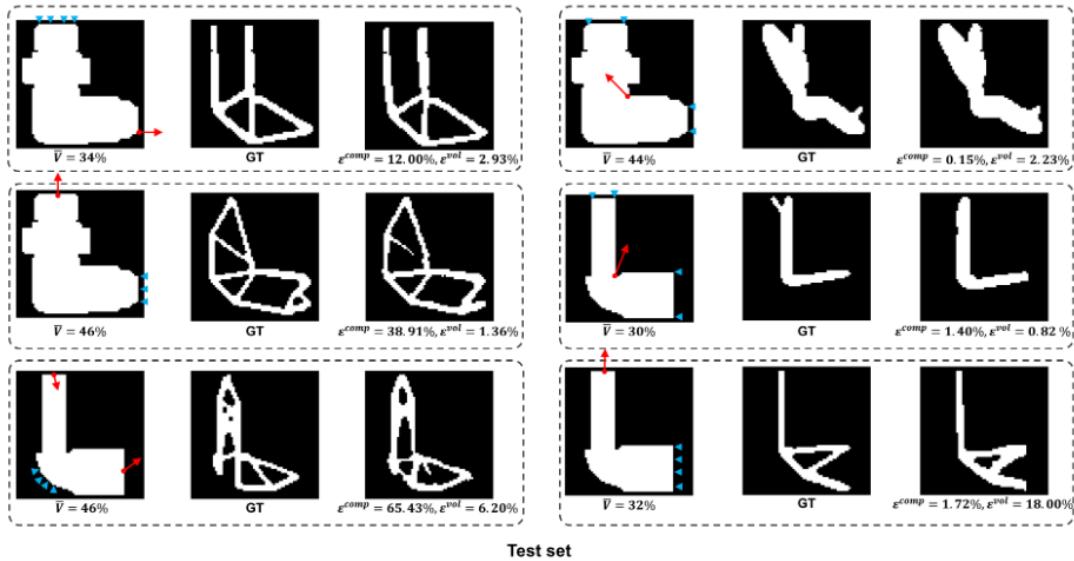


图 4.11 测试数据集上的测试结果

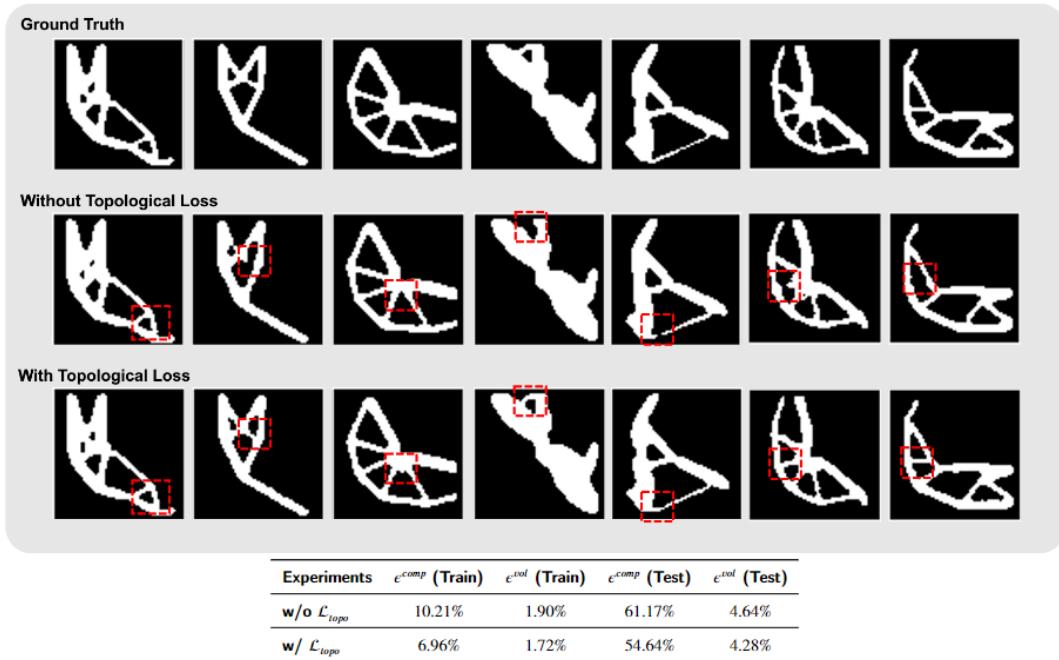


图 4.12 拓扑损失的消融实验结果

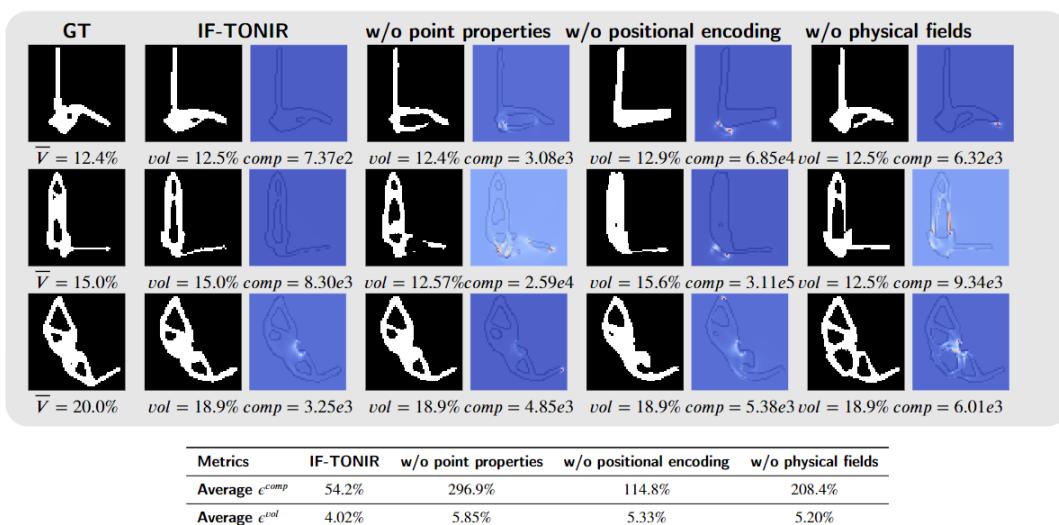


图 4.13 点属性和物理场的消融实验结果

**点属性。** 确定特定点的 SDF 值时，将设计形状信息和体积约束作为点属性，与坐标一起使用。这些点属性还可包括载荷位置和位移约束。本方法不同于之前的方法在于将体积约束作为解码器中点属性的一部分，而非复制以匹配输入张量大小。未使用点属性的对照实验表明其关键作用，如图 4.13 所示。通过对其值应用高频变换（如公式（4.6）中的位置编码）增强算法中点属性的影响。消融实验验证位置编码的重要性，结果表明位置编码层有助于网络预测更准确的体积和力的施加位置。使用位置编码的平均刚度几乎只有未使用位置编码的六分之一，表明结构强度更高，如图 4.13 中的几个示例所示。

**物理场。** 之前的工作已证实，原始设计域上的物理场信息在预测最优结构方面发挥着积极作用。为说明其对算法的重要性，如图 4.13 所示，从物理信息中删除应力和应变能场后出现的不利影响。

#### 4.4.4 比较实验

本节对 IF-TONIR 与其他生成模型（TopologyGAN<sup>[67]</sup> 和 TopoDiff<sup>[68]</sup>）进行了比较分析。值得注意的是，这些先前的工作未考虑设计域形状。为确保公平比较，这里在 TopoDiff 提供的相同数据集上评估了这三个模型。由于该数据集中的结构是在固定的规则设计域上生成的，只需从 IF-TONIR 中删除与域相关的信息，即可在提供的数据集上进行训练和评估。图 4.14 展示了 IF-TONIR、TopologyGAN 和 TopoDiff 之间的比较结果。

作为最受欢迎的生成模型之一，扩散模型已被证明在捕捉图像或形状生成中的细节方面具有更强的能力，如图 4.14 所示。此外，TopoDiff 框架结合了三个子网络来增强生成结构的强度和连续性。因此，从图 4.14 中的表格可以观察到，TopoDiff 目前取得了最佳性能。但需要注意的是，TopoDiff 在所比较的模型中具有最高的复杂度，生成结构需要更长的推理时间，需要 21.59 秒，而 IF-TONIR 只需 0.09 秒（在 CPU 上）。此外，将扩散模型扩展到 3D 域存在计算效率和内存利用方面的挑战。相比之下，IF-TONIR 在更轻的网络架构下取得了优于 GAN 模型的结果。众所周知，训练 GAN 模型是一项艰难的任务。该框架还展示了跨不同形状设计域进行推广的能力，这在之前的工作中未被考虑。然而，与其他 VAE 模型类似，IF-TONIR 在生成具有细节的结构方面仍有局限性，这是未来工作的重点领域。

TopologyGAN 和 TopoDiff 要求输入和输出分辨率保持一致，这在生成高分辨率结构时会带来挑战。这需要准备一个新的高分辨率样本数据集，或采用超分辨率等技术。然而，由于 IF-TONIR 使用了隐式神经表示，可以以任意所需的分辨率获得结构。如图 4.15 所示，训练好的网络允许通过增加设计域内的采样点数来生

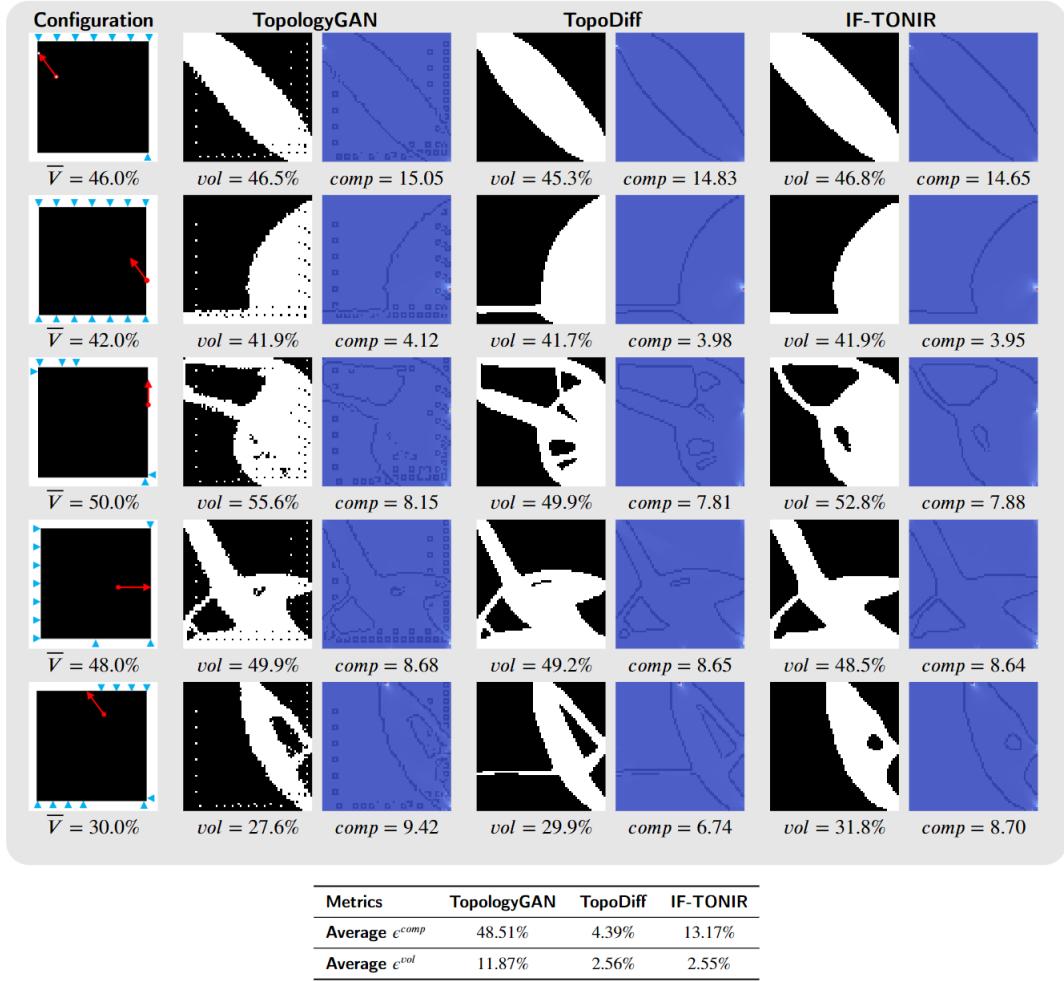


图 4.14 IF-TONIR 与其他生成模型的比较

成更高分辨率的结构。值得注意的是，IF-TONIR 可以在 CPU 上以约 10 秒的时间生成 1024 分辨率的结构。与传统的 SIMP 方法相比，该方法消除了获得平滑和连续结构表示的后处理需求。需要澄清的是，这里的分辨率指最终结构表示的分辨率，而不是结构特征的分辨率，提高结构表示的分辨率并不会增加更多的结构细节。

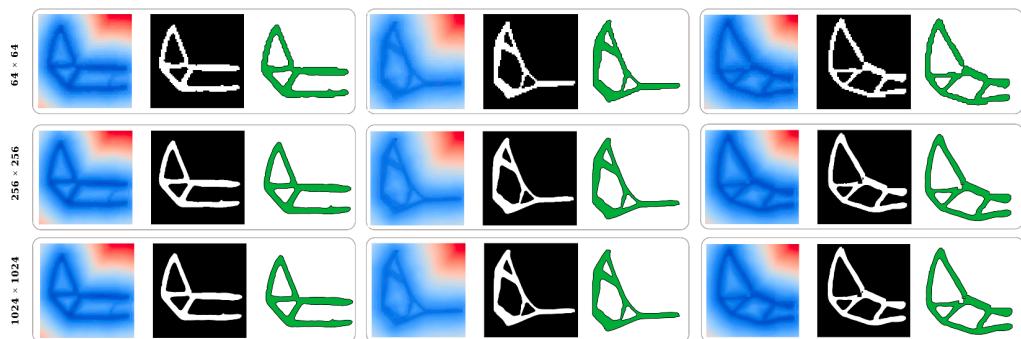


图 4.15 IF-TONIR 可以生成任意分辨率下的结构

## 4.5 本章小结

本文提出了 IF-TONIR，一种全新的无迭代拓扑优化方法。该算法利用隐式神经表示直接从给定条件和问题配置中生成优化结构。通过在测试数据集上的实验，IF-TONIR 展示了在生成各种类似形状设计域的优化结构方面的有效性，实现了较低的结构柔度。据悉，这是首个将拓扑优化过程推广到不同设计域形状的端到端工作。利用隐式神经表示将网络与空间网格解耦，理论上可以以任意所需的分辨率生成结构。此外，这种平滑紧凑的表示方法有效避免了棋盘现象。综上，本章算法在提高拓扑优化效率和应用性上主要有以下贡献：

- 提出了一种全新的无迭代拓扑优化方法，可以直接从各种设计域形状和边界条件中输出最优结构。
- 除了常用的几何损失外，还引入了基于持续同调的拓扑损失，以量化结构的连续性，有效检测和测量即使是微小的结构断开。
- IF-TONIR 生成了结构的紧凑平滑的隐式表示，将设计过程与空间网格分离，理论上可以以任意所需的分辨率生成结构。

## 参考文献

- [1] Adriaenssens S, Block P, Veenendaal D, et al. Shell structures for architecture: form finding and optimization[M]. Routledge, 2014.
- [2] Melaragno M. An introduction to shell structures: The art and science of vaulting[M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] Pietroni N, Tonelli D, Puppo E, et al. Statics Aware Grid Shells[J]. Computer Graphics Forum, 2015, 34(2): 627-641.
- [4] Chen W, Zhang X, Xin S, et al. Synthesis of Filigrees for Digital Fabrication[J]. ACM Transactions on Graphics, 2016, 35(4): 1-13.
- [5] Liu X, Lu L, Sharf A, et al. Fabricable dihedral Escher tessellations[J]. Computer-Aided Design, 2020, 127: 1-10.
- [6] Yang J, He S, Lin L. Binary Image Carving for 3D Printing[J]. Computer-Aided Design, 2019, 114: 191-201.
- [7] Stadlbauer P, Mlakar D, Seidel H P, et al. Interactive Modeling of Cellular Structures on Surfaces with Application to Additive Manufacturing[J]. Computer Graphics Forum, 2020, 39(2): 277-289.
- [8] Zhang X, Fang G, Dai C, et al. Thermal-Comfort Design of Personalized Casts[C]// Proceedings of the 30th Annual ACM Symposium on User Interface Software and Technology. ACM, 2017: 243-254 [2021-09-07].
- [9] Rao C, Tian L, Yan D M, et al. Consistently fitting orthopedic casts[J]. Computer Aided Geometric Design, 2019, 71: 130-141.
- [10] Dumas J, Lu A, Lefebvre S, et al. By-Example Synthesis of Structurally Sound Patterns[J]. ACM Transactions on Graphics, 2015, 34(4): 1-12.
- [11] Schumacher C, Thomaszewski B, Gross M. Stenciling: Designing Structurally-Sound Surfaces with Decorative Patterns[J]. Computer Graphics Forum, 2016, 35(5): 101-110.
- [12] Bucalem M, Bathe K J. Finite element analysis of shell structures[J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 1997, 4(1): 3-61.
- [13] Cirak F, Scott M J, Antonsson E K, et al. Integrated modeling, finite-element analysis, and engineering design for thin-shell structures using subdivision[J]. Computer-Aided Design, 2002, 34(2): 137-148.
- [14] Panetta J, Konaković-Luković M, Isvoranu F, et al. X-shells: A new class of deployable beam structures[J]. ACM Transactions on Graphics, 2019, 38(4): 1-15.
- [15] Cohen E, Riesenfeld R F, Elber G. Geometric modeling with splines: an introduction[M]. CRC Press, 2001.
- [16] Skyum S. A simple algorithm for computing the smallest enclosing circle[J]. Information Processing Letters, 1991, 37(3): 121-125.

- 
- [17] Lévy B, Liu Y. L p centroidal voronoi tessellation and its applications[J]. ACM Transactions on Graphics (TOG), 2010, 29(4): 1-11.
  - [18] Vaxman A, et al. Directional: A library for Directional Field Synthesis, Design, and Processing [EB/OL]. 2021. <https://doi.org/10.5281/zenodo.3338174>.
  - [19] Bendsøe M P. Optimal shape design as a material distribution problem[J]. Structural optimization, 1989, 1(4): 193-202.
  - [20] Wang M Y, Wang X, Guo D. A level set method for structural topology optimization[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2003, 192(1-2): 227-246.
  - [21] Zhang W, Yuan J, Zhang J, et al. A new topology optimization approach based on Moving Morphable Components (MMC) and the ersatz material model[J]. Struct Multidisc Optim, 2016, 53: 1243-1260.
  - [22] Nguyen T H, Paulino G H, Song J, et al. A computational paradigm for multiresolution topology optimization (MTOP)[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2010, 41(4): 525-539.
  - [23] Liu C, Zhu Y, Sun Z, et al. An efficient Moving Morphable Component (MMC)-based approach for multi-resolution topology optimization[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2018, 58(6): 2455-2479.
  - [24] Svanberg K. A Class of Globally Convergent Optimization Methods Based on Conservative Convex Separable Approximations[J]. SIAM Journal on Optimization, 2002, 12(2): 555-573.
  - [25] Wu Z Y, Bai F, Zhang L S. Convexification and concavification for a general class of global optimization problems[J]. Journal of Global Optimization, 2005, 31(1): 45-60.
  - [26] Wu J, Aage N, Westermann R, et al. Infill Optimization for Additive Manufacturing – Approaching Bone-like Porous Structures[J]. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2018, 24(2): 1127-1140.
  - [27] Plocher J, Panesar A. Review on design and structural optimisation in additive manufacturing: Towards next-generation lightweight structures[J]. Materials & Design, 2019, 183: 108164.
  - [28] Zheng N, Zhai X, Chen F. Topology Optimization of Self-supporting Porous Structures Based on Triply Periodic Minimal Surfaces[J]. Computer-Aided Design, 2023, 161: 103542.
  - [29] Lee M, Fang Q, Cho Y, et al. Support-free hollowing for 3D printing via Voronoi diagram of ellipses[J]. Computer-Aided Design, 2018, 101: 23-36.
  - [30] Wu J, Wang C C, Zhang X, et al. Self-supporting rhombic infill structures for additive manufacturing[J]. Computer-Aided Design, 2016, 80: 32-42.
  - [31] Wang W, Liu Y J, Wu J, et al. Support-Free Hollowing[J]. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2018, 24(10).
  - [32] Xu W, Liu Y, Yu M, et al. A Support-free Infill Structure Based on Layer Construction for 3D Printing[J]. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2021.
  - [33] Liu Y, Zhang P, Zhang H C, et al. Self-supporting parametric polyhedral structure for 3D printing[J]. Advances in Engineering Software, 2023, 186: 103529.
  - [34] Carr J C, Beatson R K, Cherrie J B, et al. Reconstruction and representation of 3D objects with radial basis functions[C]// Proceedings of the 28th annual conference on Computer graphics and interactive techniques. 2001: 67-76.

- 
- [35] Hu J, Wang S, Li B, et al. Efficient Representation and Optimization for TPMS-Based Porous Structures[J]. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 2020.
  - [36] Pilkey W D, Pilkey D F. Peterson's Stress Concentration Factors, Third Edition[J]. 2008.
  - [37] Yang J, Hu J, Wang S, et al. Differentiable Channel Design for Enhancing Manufacturability of Enclosed Cavities[J]. *Computer-Aided Design*, 2023, 162: 103558.
  - [38] Gilbert E G, Johnson D W, Keerthi S S. A fast procedure for computing the distance between complex objects in three-dimensional space[J]. *IEEE Journal on Robotics and Automation*, 1988, 4(2): 193-203.
  - [39] Svanberg K. The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization[J]. *International journal for numerical methods in engineering*, 1987, 24(2): 359-373.
  - [40] Lu L, Sharf A, Zhao H, et al. Build-to-Last: Strength to Weight 3D Printed Objects[J]. *ACM Trans. Graph.*, 2014, 33(4).
  - [41] Sigmund O, Maute K. Topology optimization approaches: A comparative review[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2013, 48(6): 1031-1055.
  - [42] Bendsøe M P, Sigmund O. Material interpolation schemes in topology optimization[J]. *Archive of applied mechanics*, 1999, 69: 635-654.
  - [43] Xie Y, Steven G. A Simple Evolutionary Procedure for Structural Optimization[J]. 1993, 49: 885-896.
  - [44] Wang M Y, Wang X, Guo D. A level set method for structural topology optimization[J]. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 2003, 192(1-2): 227-246.
  - [45] Guo X, Zhang W, Zhong W. Doing topology optimization explicitly and geometrically—a new moving morphable components based framework[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2014, 81(8).
  - [46] Zhang W, Chen J, Zhu X, et al. Explicit three dimensional topology optimization via Moving Morphable Void (MMV) approach[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 322: 590-614.
  - [47] Mukherjee S, Lu D, Raghavan B, et al. Accelerating large-scale topology optimization: State-of-the-art and challenges[J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2021, 28(7): 4549-4571.
  - [48] Cang R, Yao H, Ren Y. One-shot generation of near-optimal topology through theory-driven machine learning[J]. *Computer-Aided Design*, 2019, 109: 12-21.
  - [49] Kollmann H T, Abueidda D W, Koric S, et al. Deep learning for topology optimization of 2D metamaterials[J]. *Materials & Design*, 2020, 196: 109098.
  - [50] Nie Z, Jung S, Kara L B, et al. Optimization of part consolidation for minimum production costs and time using additive manufacturing[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2020, 142(7): 072001.
  - [51] Chandrasekhar A, Suresh K. TOuNN: Topology Optimization using Neural Networks[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021, 63(3): 1135-1149.
  - [52] Hoang V N, Nguyen N L, Tran D Q, et al. Data-driven geometry-based topology optimization [J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2022, 65(2): 69.

- [53] Woldseth R V, Aage N, Bærentzen J A, et al. On the use of Artificial Neural Networks in Topology Optimisation[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2022, 65(10): 294.
- [54] Li B, Huang C, Li X, et al. Non-iterative structural topology optimization using deep learning [J]. Computer-Aided Design, 2019, 115: 172-180.
- [55] Behzadi M M, Ilieş H T. Real-Time Topology Optimization in 3D via Deep Transfer Learning [J]. Computer-Aided Design, 2021, 135: 103014.
- [56] Park J J, Florence P, Straub J, et al. Deepsdf: Learning continuous signed distance functions for shape representation[C]// Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2019: 165-174.
- [57] Mildenhall B, Srinivasan P P, Tancik M, et al. NeRF: Representing Scenes as Neural Radiance Fields for View Synthesis[C]// ECCV. 2020.
- [58] Xie Y, Takikawa T, Saito S, et al. Neural fields in visual computing and beyond[C]// Computer Graphics Forum: vol. 41: 2. 2022: 641-676.
- [59] Xu B, Zhang J, Lin K Y, et al. Deformable Model-Driven Neural Rendering for High-Fidelity 3D Reconstruction of Human Heads Under Low-View Settings[Z]. 2023. arXiv: [2303.13855 \[cs.CV\]](https://arxiv.org/abs/2303.13855).
- [60] Edelsbrunner H, Harer J, et al. Persistent homology-a survey[J]. Contemporary mathematics, 2008, 453(26): 257-282.
- [61] Le C, Norato J, Bruns T, et al. Stress-based topology optimization for continua[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2010, 41: 605-620.
- [62] Takezawa A, Yoon G H, Jeong S H, et al. Structural topology optimization with strength and heat conduction constraints[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2014, 276: 341-361.
- [63] Maurer C R, Qi R, Raghavan V. A linear time algorithm for computing exact Euclidean distance transforms of binary images in arbitrary dimensions[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2003, 25(2): 265-270.
- [64] Rotman J J. An introduction to algebraic topology: vol. 119[M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [65] Edelsbrunner H, Letscher D, Zomorodian A. Topological persistence and simplification[C]// Proceedings 41st annual symposium on foundations of computer science. 2000: 454-463.
- [66] Ferrari F, Sigmund O. A new generation 99 line Matlab code for compliance topology optimization and its extension to 3D[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2020, 62: 2211-2228.
- [67] Nie Z, Lin T, Jiang H, et al. TopologyGAN: Topology Optimization Using Generative Adversarial Networks Based on Physical Fields Over the Initial Domain[J]. Journal of Mechanical Design, 2021, 143(3): 1-12.
- [68] Mazé F, Ahmed F. Diffusion Models Beat GANs on Topology Optimization[C]// Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2023.
- [69] Guarín-Zapata N, Gómez J. SolidsPy: 2D-Finite Element Analysis with Python[CP/OL]. 1.0.16. 2020. <https://github.com/AppliedMechanics-EAFIT/SolidsPy>.

- [70] He K, Zhang X, Ren S, et al. Deep residual learning for image recognition[C]//Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2016: 770-778.
- [71] Kingma D P, Welling M, et al. An introduction to variational autoencoders[J]. Foundations and Trends® in Machine Learning, 2019, 12(4): 307-392.
- [72] Wightman R. PyTorch Image Models[Z]. <https://github.com/rwightman/pytorch-image-models>. 2019. DOI: [10.5281/zenodo.4414861](https://doi.org/10.5281/zenodo.4414861).
- [73] Rahaman N, Baratin A, Arpit D, et al. On the spectral bias of neural networks[C]//International Conference on Machine Learning. 2019: 5301-5310.
- [74] Park J J, Florence P, Straub J, et al. Deepsdf: Learning continuous signed distance functions for shape representation[C]//Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2019: 165-174.
- [75] Van Dijk N, Langelaar M, Van Keulen F. Explicit level-set-based topology optimization using an exact Heaviside function and consistent sensitivity analysis[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2012, 91(1): 67-97.
- [76] Maria C, Boissonnat J D, Glisse M, et al. The gudhi library: Simplicial complexes and persistent homology[C]//Mathematical Software–ICMS 2014: 4th International Congress, Seoul, South Korea, August 5-9, 2014. Proceedings 4. 2014: 167-174.
- [77] Rezatofighi H, Tsoi N, Gwak J, et al. Generalized intersection over union: A metric and a loss for bounding box regression[C]//Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2019: 658-666.

## 致 谢

衷心感谢导师 ××× 教授和物理系 ×× 副教授对本人的精心指导。他们的言传身教将使我终生受益。

在美国麻省理工学院化学系进行九个月的合作研究期间，承蒙 Robert Field 教授热心指导与帮助，不胜感激。

感谢 ××××× 实验室主任 ××× 教授，以及实验室全体老师和同窗们学的热情帮助和支持！

本课题承蒙国家自然科学基金资助，特此致谢。

## 声 明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名： \_\_\_\_\_ 日 期： \_\_\_\_\_

## 个人简历、发表的学术论文与科研成果

### 个人简历

197×年××月××日出生于四川××县。

1992年9月考入××大学化学系××化学专业，1996年7月本科毕业并获得理学学士学位。

1996年9月免试进入清华大学化学系攻读××化学博士至今。

### 在学期间完成的相关学术成果

#### 学术论文：

- [1] Yang Y, Ren T L, Zhang L T, et al. Miniature microphone with silicon-based ferroelectric thin films[J]. Integrated Ferroelectrics, 2003, 52:229-235.
- [2] 杨轶, 张宁欣, 任天令, 等. 硅基铁电微声学器件中薄膜残余应力的研究 [J]. 中国机械工程, 2005, 16(14):1289-1291.
- [3] 杨轶, 张宁欣, 任天令, 等. 集成铁电器件中的关键工艺研究 [J]. 仪器仪表学报, 2003, 24(S4):192-193.
- [4] Yang Y, Ren T L, Zhu Y P, et al. PMUTs for handwriting recognition. In press[J]. (已被 Integrated Ferroelectrics 录用)

#### 专利：

- [5] 任天令, 杨轶, 朱一平, 等. 硅基铁电微声学传感器畴极化区域控制和电极连接的方法: 中国, CN1602118A[P]. 2005-03-30.
- [6] Ren T L, Yang Y, Zhu Y P, et al. Piezoelectric micro acoustic sensor based on ferroelectric materials: USA, No.11/215, 102[P]. (美国发明专利申请号.)