

超材料的智能设计研究进展

代铁琳¹⁾, 金刘超²⁾, 尚宸³⁾, 翟晓雅^{1)*}, 傅孝明¹⁾, 刘利刚¹⁾

¹⁾ (中国科学技术大学数学科学学院 合肥 230026)

²⁾ (香港中文大学机械与自动化工程学系 香港 999077)

³⁾ (中国科学技术大学大数据学院 合肥 230026)

(xiaoyazhai@ustc.edu.cn)

摘要: 超材料是一种人工合成材料, 其结构经过精心设计和精密控制, 表现出不同于自然材料的特殊性能, 这些具有独特功能的超材料在光学、电磁学、声学、力学等领域具有重要的应用价值。然而, 传统的超材料设计通常依赖于人工经验, 导致设计周期长, 缺乏灵活性和可调性, 难以实现大规模快速设计与量产。高效设计与性能调控超材料已成为 CAD、机械工程和材料科学的重要研究方向。近年来, 随着人工智能算法的快速发展, 智能算法在超材料设计领域中的应用越来越广泛, 展现出高效优化、生成多样性结构、缩短设计周期等优势。文中对超材料的智能设计研究进展进行综述, 首先介绍超材料的基本概念和发展历史; 然后从实际需求出发, 阐述了超材料的应用领域与设计问题; 提出了智能算法的核心问题是数据的表示与数据集的构建, 针对这 2 方面进行详细的阐述与对比分析; 还介绍了智能优化算法的框架; 最后总结超材料设计领域所面临的高质量数据集匮乏、多目标优化难题、高分辨率超材料的高效计算等挑战, 并展望了该领域未来的发展趋势即面向多样化功能需求的“可表达”“可编辑”“可分析”“可优化”和“可制造”的研究。

关键词: 超材料设计; 智能算法; 几何表示; 结构优化; 超材料数据集

中图分类号: TP391.72

DOI: 10.3724/SP.J.1089.2024-00279

Advances in Intelligent Design of Metamaterials

Dai Tielin¹⁾, Jin Liuchao²⁾, Shang Chen³⁾, Zhai Xiaoya^{1)*}, Fu Xiaoming¹⁾, and Liu Ligang¹⁾

¹⁾ (School of Mathematical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

²⁾ (Department of Mechanical and Automation Engineering, Chinese University of Hong Kong, Hong Kong 999077)

³⁾ (School of Data Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

Abstract: Metamaterials are artificially synthesized materials whose structures are meticulously designed and precisely controlled to exhibit unique properties not found in natural materials. These functional metamaterials have significant applications in fields such as optics, electromagnetics, acoustics, and mechanics. However, traditional metamaterial design often relies on human expertise, resulting in lengthy design cycles, a lack of flexibility, and limited tunability, which hinder the rapid design and mass production of metamaterials. Efficient design and performance tuning of metamaterials have become crucial research directions in mechanical engineering, and materials science. In recent years, with the rapid development of artificial intelligence algorithms, the application of intelligent algorithms in metamaterial design has been expanding,

收稿日期: 2024-06-05; 修回日期: 2024-12-10. 基金项目: 国家自然科学基金青年基金(62402467); 国家自然科学基金面上项目(62025207); 中国科学院战略重点研究计划(XDB0640000); 中央高校青年创新重点科研基金(YD0010002010); 浙江大学计算机辅助设计与图形系统全国重点实验室开放课题(A2303). 代铁琳(2001—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为拓扑优化、机器学习; 金刘超(1999—), 男, 博士研究生, 主要研究方向为 4D 打印、机器学习; 尚宸(2002—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为拓扑优化、机器学习; 翟晓雅(1993—), 女, 博士, 副研究员, CCF 会员, 论文通信作者, 主要研究方向为 CAGD、结构优化; 傅孝明(1988—), 男, 博士, 副教授, 主要研究方向为 CAD&CG; 刘利刚(1975—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 杰出会员, 主要研究方向为 CAD&CG, VR&AR、几何建模等。

demonstrating advantages such as efficient optimization, generation of diverse structures, and shortened design cycles. This paper first introduces the basic concepts and development history of meta materials, and then discusses the application fields and design issues of metamaterials from the perspective of practical needs. The paper identifies the core issues of intelligent design algorithms as data representation and dataset construction, providing a detailed explanation and comparative analysis of these two aspects. Additionally, it reviews the framework of intelligent optimization algorithms. Finally, this paper highlights the challenges in metamaterial design, including the scarcity of high-quality datasets, the complexity of multi-objective optimization, and the computational demands of high-resolution metamaterial analysis. Additionally, it explores future trends in the field, emphasizing the development of metamaterials that are “expressible” “editable” “analyzable” “optimizable” and “manufacturable” to address diverse functional requirements.

Key words: metamaterials design; intelligent algorithms; geometric representation; structural optimization; metamaterial data set

1 超材料发展历史简述

超材料^[1-2]是一种人工复合材料,具有常规材料不具备的超常物理性质,且有望成为一系列变革性技术的源头,其独特的物理性质和功能源于精巧设计的微观结构.超材料不仅具备传统材料的基本特性,如强度和轻质,还展现出一些非常规特性,如负泊松比(即在受力拉伸时横向扩展而非收缩)、高度吸能和抗冲击性能,以及可调节的刚度和形状,使得它们在航空航天^[3]、智能建筑^[4]、生物医学^[5]和防护装备^[6]等多个领域中展现出巨大的潜力和广泛的应用前景.在国际上,超材料技术备受重视.《Science》杂志将其列为本世纪前 10 年的重要科学进展之一^[7],美国国防部将其列为重点关注的“六大颠覆性基础研究领域”之一.超材料的发展受到了美国、日本等发达国家的重点关注与支持,包括波音、雷神等军工企业也相继加入超材料的研究行列.我国同样高度重视超材料技术的发展,《中国制造 2025》纲要明确提出,要大力发展智能材料、超材料等新材料的研发.

现有的超材料研究可以分为 4 个方向^[8]: (1) 研究物理层面的机制.超材料通常与其他物理领域相结合,以实现不同功能材料的主导行为. (2) 设计微观几何结构.超材料以微结构为先导,需要使用计算机辅助方法,如拓扑设计^[9]等工具进行微观材料的排布. (3) 微/纳米尺度上的制造与操纵. (4) 工业应用层面的大批量生产与推广.随着人工智能(artificial intelligence, AI)算法的兴起,一个令人兴奋的研究方向出现了范式转变,即使用 AI 技术设计、优化和表征超材料,该研究方向旨在

解决超材料领域(即设计、分析、制造和工业应用)中的困难.同时,超材料研究呈现出多学科交叉融合的趋势,包括结构分析、材料科学、工程力学、计算机科学和数学等学科.本文从计算机辅助几何设计出发,重点调研超材料设计与优化中的智能计算方法;从超材料的基本概念入手,介绍其发展历史与主要应用领域,并从实际应用需求角度详细阐述对超材料智能算法的研究成果.

文献[10]详细介绍了不同超材料的发展历史;本文将从材料领域和拓扑优化领域 2 个方面,阐述超材料技术的发展及其在不同领域的应用.

1.1 材料领域

超材料发展历史概括为图 1 所示的 4 个阶段: (1) 概念提出阶段.超材料的概念由苏联科学家维克托·韦谢拉戈于 1964 年首次提出,最早特指“左手材料(left-handed metamaterials)”,该材料指一种介电常数和磁导率同时为负值的材料.当电磁波传播时,波矢、电场和磁场之间的关系符合左手定律,因此称为左手材料.随着超材料概念的不断扩展,其种类和范围也在进一步扩大.20 世纪 70 年代左右,出现了频率选择表面技术. (2) 实验验证阶段.1996—2001 年,英国物理学家和美国科学家证明了左手材料的存在.此后,英、美国家掀起了超材料技术研究的高潮. (3) 功能拓展阶段.在 2005—2010 年,超材料的研究逐渐向更多的功能拓展,科学家不断尝试设计和制备具有特定功能和性质的超材料,如超透镜、隐形衣、超导体、声波隔音材料等. (4) 应用推广阶段.自 2010 年以来,超材料的研究重点逐渐从基础科学转向实际应用,并已在通信、医学影像、光电子器件、隐形技术、

军事等多个领域得到应用, 并取得了一系列突破性进展; 同时, 一些大型科研机构和企业也开始投入资金和人力资源进行超材料相关技术的研发和商业化应用. 我国在超材料领域的研究起步较晚, 截止到 1998 年仅发表了 17 篇相关文献, 但自 2003 年以后, 相关研究逐渐增多, 发展迅速, 已有大量科研成果. 2004 年 12 月, 中华人民共和国科学技术部正式启动了名为《新型人工电磁介质的理论与应用研究》的国家重点基础研究发展规划(973)项目. 2016 年 3 月, 国家“十三五”规划纲要提出大力发展超材料等纳米功能材料. 截至目前, 我国在超材料领域发表的文献数量已在世界上占据主导地位.

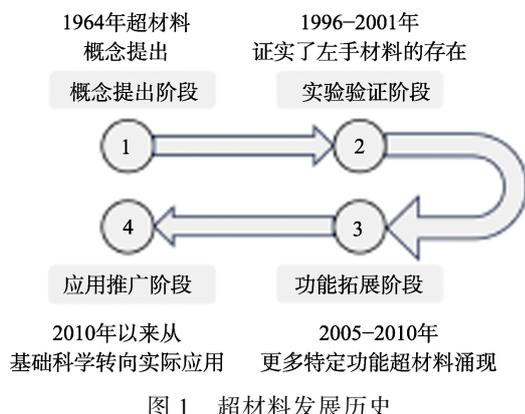


图 1 超材料发展历史

1.2 拓扑优化领域

拓扑优化^[11]是一种数学方法, 用于在给定设计空间、边界条件和负载情况下, 确定结构的最佳材料分布. 拓扑优化广泛应用于机械工程、航空航天、土木工程和生物学工程等领域, 以提高材料利用率、减轻重量和提升结构性能. 超材料的独特结构和性能特点使其成为拓扑优化的理想对象. 关于微结构的拓扑优化的工作最早可追溯到 1988 年, Bendsøe 等^[12]提出数值均匀化方法, 假设材料模型由带有长方形孔洞的无限小的正方形单元组成, 优化其不同边长可得到等效的结构模量; 之后, 该方法得到了广泛的应用和发展^[13-14]. 文献[15]详细地介绍超材料的传统设计方法, 重点总结了超材料的正向设计与逆向优化的相关工作. 图 2 所示为 2001 年以来超材料文献发表情况统计. 可以看出, 2000 年后, 超材料的研究呈现快速增长趋势, 一方面是由于材料领域中左手材料的证实, 另一方面是来自于拓扑优化领域数值均匀化理论的继承与发展.

随着 AI 技术的发展和应用, 超材料的拓扑优化也开始引入智能算法. 机器学习模型可以对超

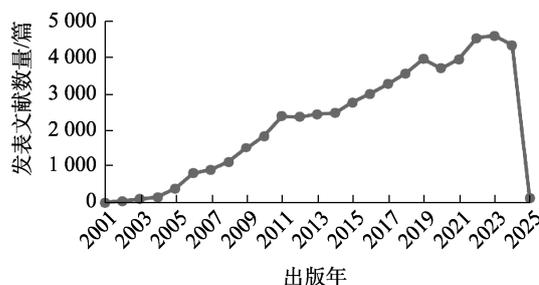


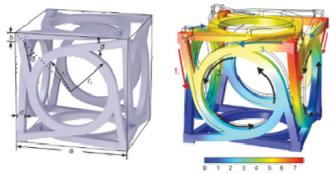
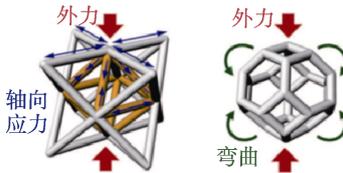
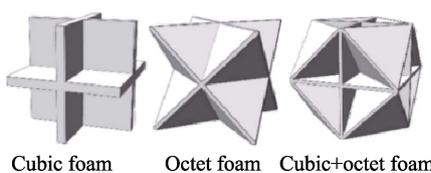
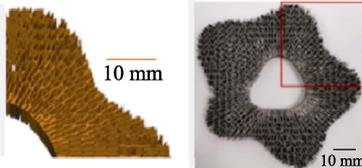
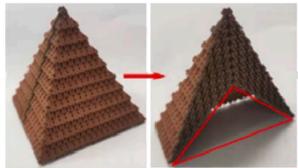
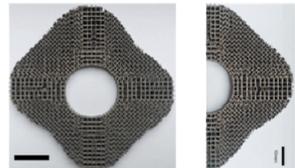
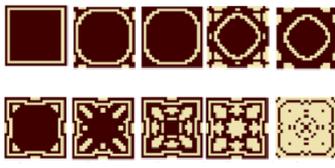
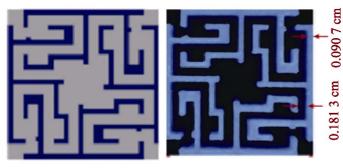
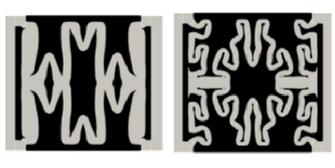
图 2 超材料研究论文统计

材料的性能进行快速且准确的预测, 帮助研究人员在设计阶段评估不同结构的性能, 指导实验和制造. 传统的材料设计方法依赖于理论模型和试错实验, 而机器学习方法可以利用大量的数据来驱动材料设计过程. 通过对材料数据库的分析和挖掘, 机器学习可以发现材料中的潜在规律和特性, 加速新材料的发现和设计; 此外, 机器学习还可以用于优化超材料的结构设计, 达到特定的性能目标和实现超材料设计的自动化和高效率. 机器学习方法在超材料领域的应用发展势头强劲, 为材料设计和研究提供了新的思路 and 工具, 有望加速超材料技术的发展和应.

1.3 主要应用领域

超材料在力学、热学、声学、光学、电磁学、生物学、通信等多个领域都有着广泛的应用, 并为各种不同应用的需求提供了新的解决方案和技术手段, 表 1 所示为一些在不同领域的典型的超材料设计^[16-24]. (1) 力学领域. 如机械减振和冲击吸收, 压力传感器和柔性电子器件等; (2) 热学领域. 如热辐射调控材料可用于太阳能热电转换、热辐射调控、红外夜视技术等; (3) 声学领域. 如声子晶体可用于声波透镜、声波隔离、声波滤波等, 超材料阵列可用于超声成像、声波导等; (4) 电磁学领域. 如电磁波吸收材料可用于电磁波隐身、雷达吸收、天线设计等, 电磁屏蔽材料可用于电磁辐射保护、通信干扰屏蔽等; (5) 光学领域. 如折射率负值材料可用于实现超透镜、超透镜阵列、超透镜天线等, 用于实现超分辨率成像、纳米光学器件等, 此外, 超材料也用于光子晶体、光学调控、表面等离子共振等领域; (6) 生物学领域. 如生物传感器、医学成像、药物释放等, 超材料可用于实现对生物信号的检测、识别和调控, 从而应用于生物学诊断、治疗等领域; (7) 通信与信息技术应用. 如天线设计、光纤通信、微波器件等, 超材料可用于实现对电磁波和光波的调控和传输, 从而应用于通信和信息技术领域等.

表 1 实际应用驱动的超材料设计

领域	超材料设计		
力学	 压扭材料 ^[16]	 超轻超刚超材料 ^[17]	 Cubic foam Octet foam Cubic+octet foam 各向同性极限刚度板结构 ^[18]
热学	 全向热斗篷装置 ^[19]	 3D 热斗篷 ^[20]	 热斗篷传感器 ^[21]
声学	 弯曲波局部共振带隙声学超材料 ^[22]	 共振腔型宽频双负性声学超材料 ^[23]	 特定频率的声学超材料 ^[24]

现有的关于超材料的综述文献更多地关注于传统优化的方法^[25-26]；近 2 年出现了对超材料的智能优化算法的综述，它们更多地注重网络结构的罗列与分析^[8,25,27]。然而，作为超材料智能优化算法的基础问题——数据的几何表示与数据集的构建，以及对快速发展的生成式模型与超材料结合的前景方向的分析等内容的综述文献却相对较少。鉴于此，本文首先引出超材料的基本概念和设计中的研究问题；然后以 CAD 领域中关注的几何表示为重点，总结分析超材料的几何表示类型并分类，对其类型进行详细的对比分析，并针对不同表示类型的数据集的构建进行综述；再简要概括针对不同问题的智能算法的网络结构的设计，分析生成式模型在超材料设计领域的应用前景；最后对目前的超材料设计工作进行详细的研究展望。

2 基本知识与现状

2.1 基本概念

(1) 微结构. 在结构设计领域，微结构定义为人工设计的基本单元，可以通过周期或者非周期排列产生特殊的性能^[28]。通常，通过逆均匀化理论^[29-30]得到微结构的材料分布。在材料领域，微结构定义为 25 倍以上的光学显微镜所能观测到的小尺寸几何结构。需要注意的是，本文中的微结构以

及超材料等定义与物理尺寸无关，均指结构设计的基本单元。由于微结构的几何表示不同，微结构可以分为杆状微结构、壳状微结构和板状微结构，如图 3 所示。根据微结构的基本的对称关系，又可以分为简单立方(simple cubic, SC)结构、体心立方(body-centered cubic, BCC)结构和面心立方(face-centered cubic, FCC)结构。

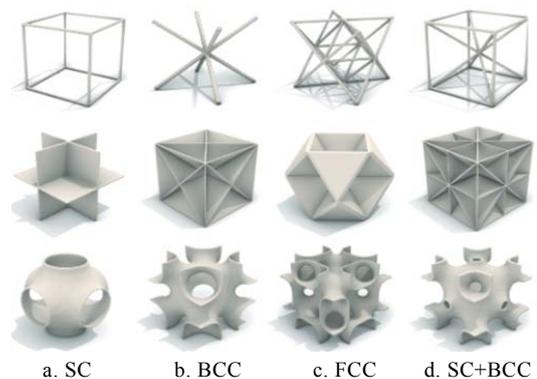


图 3 一些典型的微结构单元示例

(2) 超材料. 是一种具有特殊结构和性质的人造材料，它们的特性通常不同于自然材料，可视为将微结构进行多重组合的材料。超材料的设计和制造是通过精确控制它们的结构，如大小、形状和排列方式，来实现所需特殊性质。因此，超材料的 3 个重要的特征如下：超材料由人工结构组成；超材料具有超常的物理特征；超材料的性质取决于

内部的人工结构, 而非构成的基础材料。

传统材料和超材料在结构、性质和制备方法等方面存在明显的区别。a. 在结构方面, 传统材料通常是由原子或者分子组成, 结构呈现出规则的晶格结构或者无序的非晶格结构。而超材料由人工制造的微观结构组成, 通常具有周期性或者多尺度的结构特征。b. 在物理性质方面, 传统材料的物理性质受到化学成分和结构的限制, 其性质主要受原子间的相互作用和结晶结构的影响。超材料具有常规材料不具备的超常物理性质, 如负折射率、负抗性、超透镜效应等。其中, 负折射率意味着光线或电磁波在超材料中传播时会与普通材料相反的方向弯曲, 为实现先进的光学成像和隐身技术提供了可能; 负抗性则表现为材料在电流、声波或其他波动通过时, 不再阻碍其传播, 反而会加速或增强其效果, 展现出反常的行为, 这种特性在能量吸收和振动控制等应用中具有重要价值; 超透镜效应突破了传统光学透镜的衍射极限, 使得超材料能够实现更高分辨率的成像, 并能够观测到纳米尺度的细节: 这些性质是通过设计和控制超材料的微观结构实现的。c. 在制备方法方面, 传统材料通常通过自然形成或化学合成的方式制备, 制备工艺相对简单, 主要依赖于原材料的性质和化学反应过程。超材料通常通过先进的纳米加工技术、光刻技术、化学合成等手段进行制备, 需要精密的工艺控制和微纳米级的结构设计。图 4 所示为传统材料与超材料的区别。

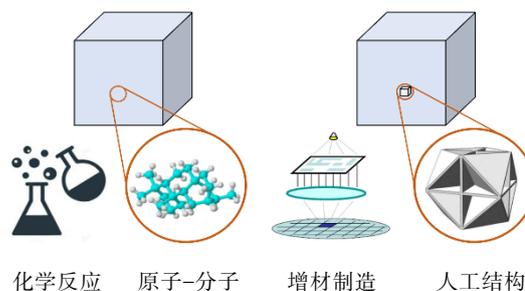


图 4 传统材料与超材料的区别

迄今为止, 功能材料大多建立在对天然材料的性质改进的基础上, 随着对天然材料各种性质及功能的进一步发掘, 其潜在的利用空间趋于极限, 难以再有实质性的提升。超材料的出现, 给先进军用和民用产品、装备研制带来新的发展契机。

(3) 多尺度结构设计。微结构的设计并不是孤立存在的, 一般通过将其进行多重组合装备形成宏观结构。多尺度结构设计指将不同尺度上的结构特征相互耦合, 结合拓扑优化方法实现对材料内部结构的精确调控和优化, 可以有效地综合考虑材料的微观和宏观尺度上的结构特征和性能, 实现材料性能和功能的最优化。Wu 等^[31]详细介绍了拓扑优化领域中的多尺度结构设计的方法, 主要有去均匀化方法^[32]、自下而上优化^[33-34]、自上而下优化^[35]和协同优化^[36]等方法。通过这种方法设计出的材料和结构具有优异的性能, 能够满足复杂的工程需求。多尺度结构设计在各个领域都有应用, 图 5 所示为多尺度结构设计的实例与应用^[37-40]。

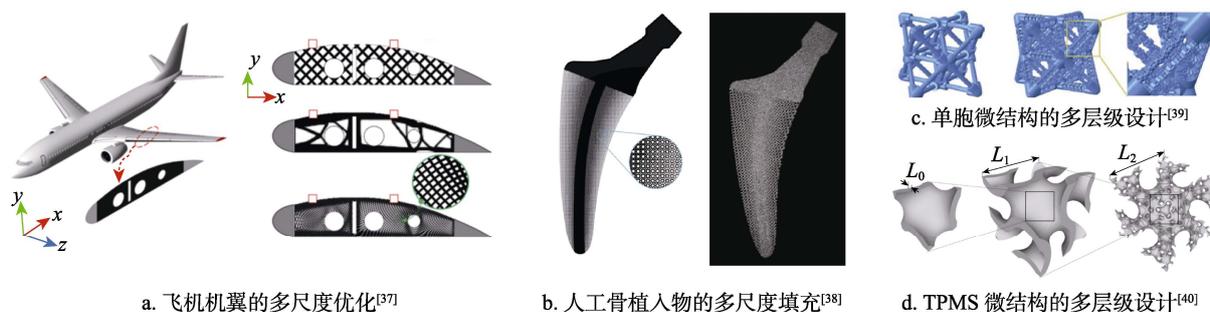


图 5 多尺度结构例子展示

2.2 优化设计要求

在超材料设计过程中, 应考虑其物理性能需求与几何制造要求。

2.2.1 物理性能需求

不同的应用领域对超材料的性能需求各不相同, 本文罗列了在力学、电磁学、声学 and 光学的一些设计需求。

(1) 刚度优化。设计超材料时需要优化其刚

度, 以满足特定应用场景下的机械性能需求。由于不同的应用可能需要不同的刚度水平, 因此要根据具体需求调整超材料的微结构和几何形态, 实现所需的刚度水平。

(2) 泊松比控制。超材料的泊松比是一个重要的物理性能参数, 它反映了材料在受力时的形变特性。通过设计微结构可以控制超材料的泊松比, 实现所需的弹性性质。例如, 负泊松比材料被用于

防护垫、减震器等设备, 这些材料能够有效地吸收和分散能量, 减轻冲击带来的伤害或损坏。

(3) 各向同性和各向异性的平衡. 超材料的设计需要平衡各向同性和各向异性, 满足不同方向上的性能需求. 某些应用可能需要材料在不同方向上具有相似的物理性质, 而其他应用可能需要材料在不同方向上具有不同的性质. 因此, 设计超材料时需要综合考虑各向同性和各向异性, 实现最佳的性能表现和应用效果。

(4) 电磁波透射和反射特性. 超材料的设计需要控制电磁波的透射和反射特性, 实现特定的电磁波调控效果。

(5) 电磁场调控能力. 超材料需要有调控电磁场的能力, 如实现电磁场的聚焦、吸收等功能。

(6) 声波传播和反射特性. 超材料在声学应用中需要控制声波的传播和反射特性, 实现特定的声学效果, 如声学隐形斗篷(声波吸收)、声超构材料(声场调控)等。

(7) 声学透明度. 在特定频率范围内使物体对声波透明, 允许声波穿过物体而不被反射或散射。

(8) 光学透射和反射特性. 超材料的设计需要控制光学波的透射和反射特性, 它描述材料与光相互作用的关键参数, 广泛应用于光学器件、薄膜技术、太阳能电池、光通信等领域。

(9) 光学吸收和散射特性. 超材料在光学应用中需要具有特定的光学吸收和散射特性, 实现光学信号处理、传感等功能。

2.2.2 几何制造要求

(1) 实体连通性. 超材料的微结构应确保实体是连通的, 这对于保持整体结构的完整性和制造过程的可行性至关重要. 连通的微结构有助于材料的均匀性和强度分布, 同时也更容易进行加工和制造。

(2) 空腔连通性. 超材料中的空腔部分也需要保持连通, 避免制造过程中产生残留材料或空腔闭合而导致性能降低. 连通的空腔使材料具有一致的物理性质, 也有利于材料的导热、导电等特性。

(3) 免支撑结构. 在设计超材料时需要尽量避免出现悬空的几何结构, 因为这些悬空结构可能需要额外的支撑材料来保持形状, 增加制造成本和复杂度。

(4) 表面光滑性. 超材料的表面应尽量光滑, 确保其具有连续的力学性质, 并提高渗透性。

2.3 传统方法研究现状

超材料的传统设计方法主要有依赖经验的试

错方法^[41-42]、基于自然启发的仿生方法^[43-45]、经典的拓扑优化方法^[46-48]等. 在依赖经验的试错方法中, 由工程师首先对超材料进行几何建模, 再通过调整参数实现超材料的物理性能变换, 但这种方法难以实现超材料性能的个性化定制. 通过仿生学的手段设计具有特定功能和性能的超材料也是一种设计手段, 然而仿生超材料通常具有复杂的微观或纳米级结构, 对制造技术提出了极高的精度要求, 当前的制造技术难以精确地复制自然界中的复杂结构. 此外, 从自然启发到实现仿生超材料的设计、制造和测试中, 整个研发过程复杂且耗时, 难以快速地实现成果转化. 拓扑优化方法在超材料设计领域具有显著的优势, 如能够找到材料在给定约束下的最佳结构配置; 但该方法需要大量的计算资源, 特别是当涉及三维复杂结构时, 计算成本和时间可能非常高. 综上所述, 本文总结了一些传统方法的局限性问题:

(1) 高计算复杂度. 超材料通常由复杂的微观结构组成, 需要精确地模拟各种物理现象, 如电磁、光学和声学行为. 传统的计算方法, 如有限元分析(finite element analysis, FEA)在处理这些复杂结构时, 需要耗费大量的计算资源和时间. 例如, 拓扑优化过程中经常需要迭代成百上千次才能找到最优解, 计算成本非常高; 使用基于梯度下降的拓扑优化技术时, 在处理多相材料和复杂边界条件时, 可能遇到难以找到可微分的目标函数和合适的约束条件, 导致设计过程不仅耗时且难以达到全局最优。

(2) 设计周期长. 传统的设计流程通常是线性的, 从概念设计到详细设计再到制造和测试, 每个阶段都可能需要长时间的调整和验证. 这种线性流程在面对需要快速迭代的研究和工业应用时, 尤其显得缓慢和低效。

(3) 灵活性有限. 传统设计方法在很大程度上依赖于设计师的经验和直觉, 而不是系统的数据驱动决策, 限制了设计的创新性, 因为非常规的或新颖的设计很难仅凭直觉来预测其行为。

(4) 难以处理多功能目标要求. 现代的超材料设计需要满足多种功能性要求, 如力学、热学和电磁属性的特定组合, 传统方法在同时优化这些多物理场响应方面显得力不从心。

(5) 材料和制造的约束. 传统设计方法没有充分地考虑材料的可获得性和加工技术的限制, 在不考虑这些实际因素的情况下, 设计出的结构可能在实际制造时无法实现, 或者成本过高, 导致不具有实用性。

(6) 缺乏对复杂几何的控制. 传统方法在处理复杂或者高度异质的材料结构, 如多相材料或具有复杂边界条件的材料时常常存在局限, 这些复杂结构在传统的设计工具中难以精确模拟, 影响最终产品的性能和可靠性.

总的来说, 传统的超材料设计方法在处理高维度和多目标优化问题时面临显著挑战, 包括设计灵活性有限、计算成本高昂和长时间的设计周期. 为了应对这些挑战, 现代超材料设计越来越多地采用基于 AI 的方法, 通过从大量数据中学习来预测材料性能, 从而优化设计过程, 减少依赖于直观的试错方法, 提高设计的效率和准确性. 这些“高级”的计算方法不仅可以提高设计的灵活性, 还可以大幅缩短设计周期, 使超材料设计更加适应快速发展的应用需求.

3 超材料的几何表示

超材料的独特性源自其精细设计的微观结构, 这些结构赋予了超材料一些自然界中未见的独特

性质. 超材料的几何表示指将高维的结构投影到低维空间, 因此, 准确的几何表示成为超材料设计中的关键环节, 它直接影响材料功能的实现和性能优化. 在实际应用中, 超材料的几何表示不仅需要精确地描述微观结构的空间布局, 还需要考虑设计过程中的计算成本. 图 6 展示了几何表示方法和数据库的构建流程. 不同的几何表示方法, 如隐函数、参数化及像素/体素表示各有所长, 它们在处理不同的设计挑战和应用需求时展现出独特的优势. 例如, 隐函数表示因能够精细地描述连续几何形态, 被广泛地应用于需要高度定制化的设计中; 参数表示则因其简洁性和易于操作的特点, 常用于工业快速原型制作; 像素/体素表示则在 3D 打印等数字制造技术中发挥重要作用. 因此, 探索和优化超材料的几何表示方法不仅对推动材料科学的理论研究具有重要意义, 更对促进超材料技术的工业应用和商业化转化具有深远影响. 本节将详细讨论超材料的各种几何表示技术, 分析其优缺点, 并探讨如何根据不同的应用需求选择合适的表示方法.

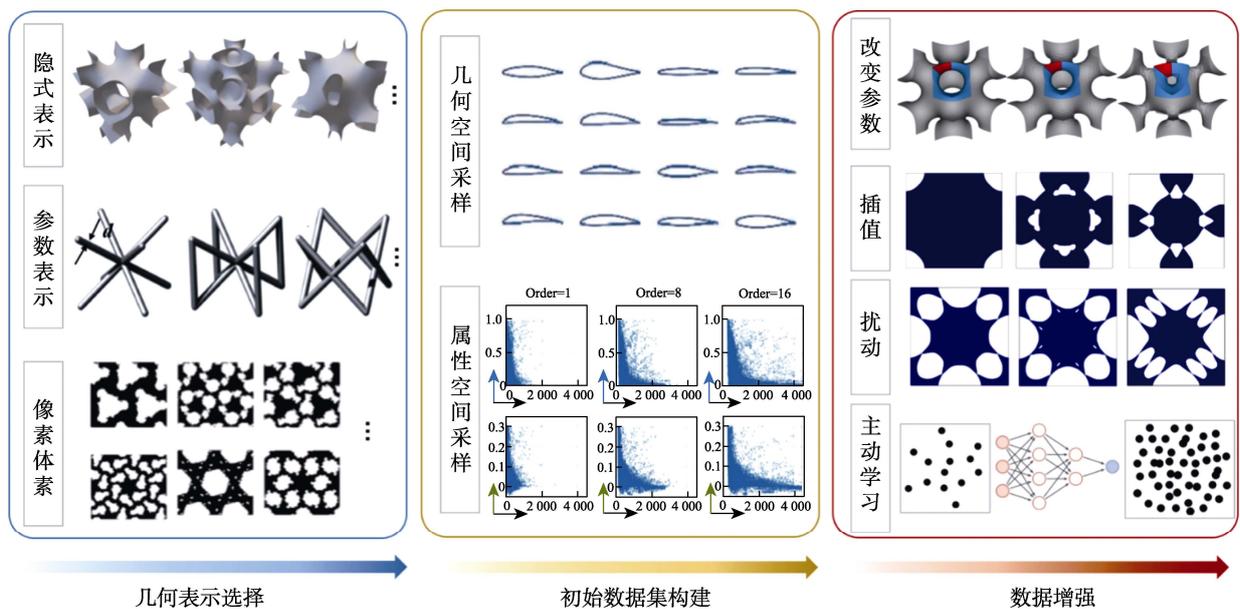


图 6 超材料数据库的构建流程

3.1 表示类型

3.1.1 隐式函数

隐函数表示是一种利用数学函数描述材料结构的方法, 能够精确地控制材料的微观结构, 实现对宏观物理性质的精准调控. 隐函数表示不仅提供了一种强大的工具来模拟和优化复杂的几何形态, 还特别适合用于处理连续的材料属性变化, 这

是传统离散表示方法难以实现的. 例如, 通过调整隐函数中的参数, 设计者可以精确地控制材料的孔隙率、各向异性等特性, 设计出具有特定光学、声学或机械性能的超材料. 这种方法不仅增强设计的灵活性, 也大大提高了设计过程的效率和准确性. 当前, 机器学习与隐式函数表示相结合, 实现了机械超材料设计的自动化. Makatura 等^[19]开

发一种统一的程序图,可以简化超材料的表示,利用表面网格和隐式函数促进更高效的设计工作流程. 隐式函数表示的灵活性有益于设计复杂、非周期结构的材料. Wang 等^[49]通过隐式函数定义非周期表示,实现了非周期超材料结构的逆向设计,对于需要独特材料响应的应用至关重要.

(1) 三周期极小曲面(triply periodic minimal surfaces, TPMS). 在材料科学与工程领域, TPMS 因其独特的几何特性被广泛应用. 这类曲面的平均曲率在整个结构上均为 0, 在设计具有高机械强度和复杂微观结构的材料时显得尤为重要^[50], 其也是隐式函数中应用最广泛的一种表示^[51-52]. 图 7 所示为 TPMS 表示具有不同的类别. Wang 等^[53]基于 TPMS 的晶胞数据库为数据驱动的结构设计提供了新的视角, 利用条件生成对抗网络(conditional generation adversarial network, CGAN)不仅能学习 TPMS 结构的分布, 还能模拟其多样化的物理属性, 为材料设计提供了强大的数据支持和预测能力; Xu 等^[54]提出新型 TPMS 表示方法, 通过边界形状的参数化, 显著地提高了设计的灵活性和应用的广度, 不仅解决了传统 TPMS 表示能力有限的问题, 而且能够生成与给定边界条件严格对应的最小曲面结构. 研究表明, TPMS 不仅能覆盖更广泛的属性空间, 而且展现出更佳的各向同性特征. 此外, Feng 等^[55]进一步探讨了 TPMS 多孔结构从多尺度设计、精确的增材制造到多学科应用的全方位发展, 详细讨论了其在制造业中如何实现精确和可控的制造过程, 以及这些结构如何在生物医学、能源存储和结构优化等领域发挥关键作用. 这些技术进展表明, TPMS 在高性能材料创新中扮演着越来越关键的角色, 通过现代计算技术

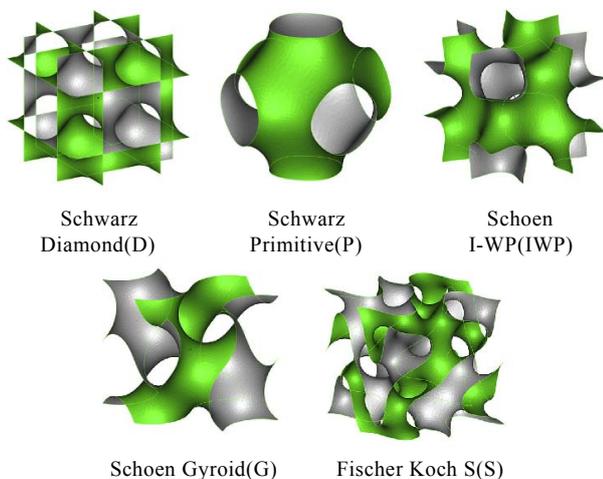


图 7 TPMS 的一些主要类别^[51]

和数学方法的发展, 正不断地拓宽其在先进制造和结构设计中的应用前景.

(2) 符号距离场(signed distance field, SDF). 在微结构拓扑优化领域, SDF 已成为关键工具之一^[56], 尤其在基于学习的方法中扮演着重要角色. 通过定义空间中每个点到最近表面的距离来描述结构, 它适用于表示更复杂精细的结构^[57], 其使得在计算域中对边界和接口进行更精确的控制成为可能, 该特性在与机器学习技术结合时尤为有益. Park 等^[58]提出 DeepSDF 表示, 将 SDF 函数与生成式模型相结合, 通过连续的 SDF 学习表示整个形状类别, 而不仅限于单个形状, 该方法允许模型泛化到新的、未见过的形状, 并能够进行形状间的平滑插值. 这种连续表示比传统的离散方法(如体素或网格)提供了更高的灵活性和泛化能力. SDF 表达的一个直观展示如图 8 所示. 与之前的工作相比, DeepSDF 模型用较小的规模可以表示整个形状类别, 有效地应对了 3D 数据处理和生成的挑战, 提供灵活、高效、富有表现力的 3D 建模能力; 并提高了 3D 形状处理深度学习方法的灵活性和保真度. Hu 等^[59]利用 SDF 灵活的性质, 用持续同调的方法构造一种拓扑的损失函数, 以保证设计微结构的连续性. 此外, 使用 SDF 隐函数还具有可获得任意分辨率网格的优秀性质, 有利于后续对于结构的进一步分析与使用.

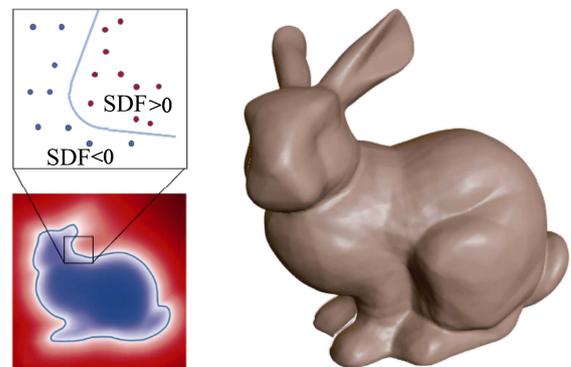


图 8 SDF 表达的一个直观展示^[58]

(3) 旋节线. 受到 Cahn-Hilliard 方程描述的相分离过程的启发, Kumar 等^[60]提出旋节线表示法, 能够生成复杂的非周期性结构和可调各向异性的超材料, 通过一组有限的设计参数来表示复杂的结构, 如图 9 所示. 与常见的构成机械超材料桁架状微结构相比, 旋节线不容易出现因周期性几何缺陷而导致的高应力集中和材料缺陷. 由于这些超材料重量轻, 并且旋节体不易出现缺陷, 多孔又具有良好的可打印性, 因此它们可应用于航空航

天^[61]、生物骨结构设计^[62]等领域. Golnary 等^[63]进行旋节线拓扑的数据驱动分析, 专注于各向异性、逆向设计和弹性张量分布, 强调了这些材料在机械应用中的潜力. 旋节线结构和对应属性构成的数

据库也被用于训练代理模型、预测结构的性质和计算相关的灵敏度, 后续在多尺度设计中, 可以同时优化宏观材料分布和微观结构的设计和方向, 取代在微观尺度上的嵌套有限元计算^[64].

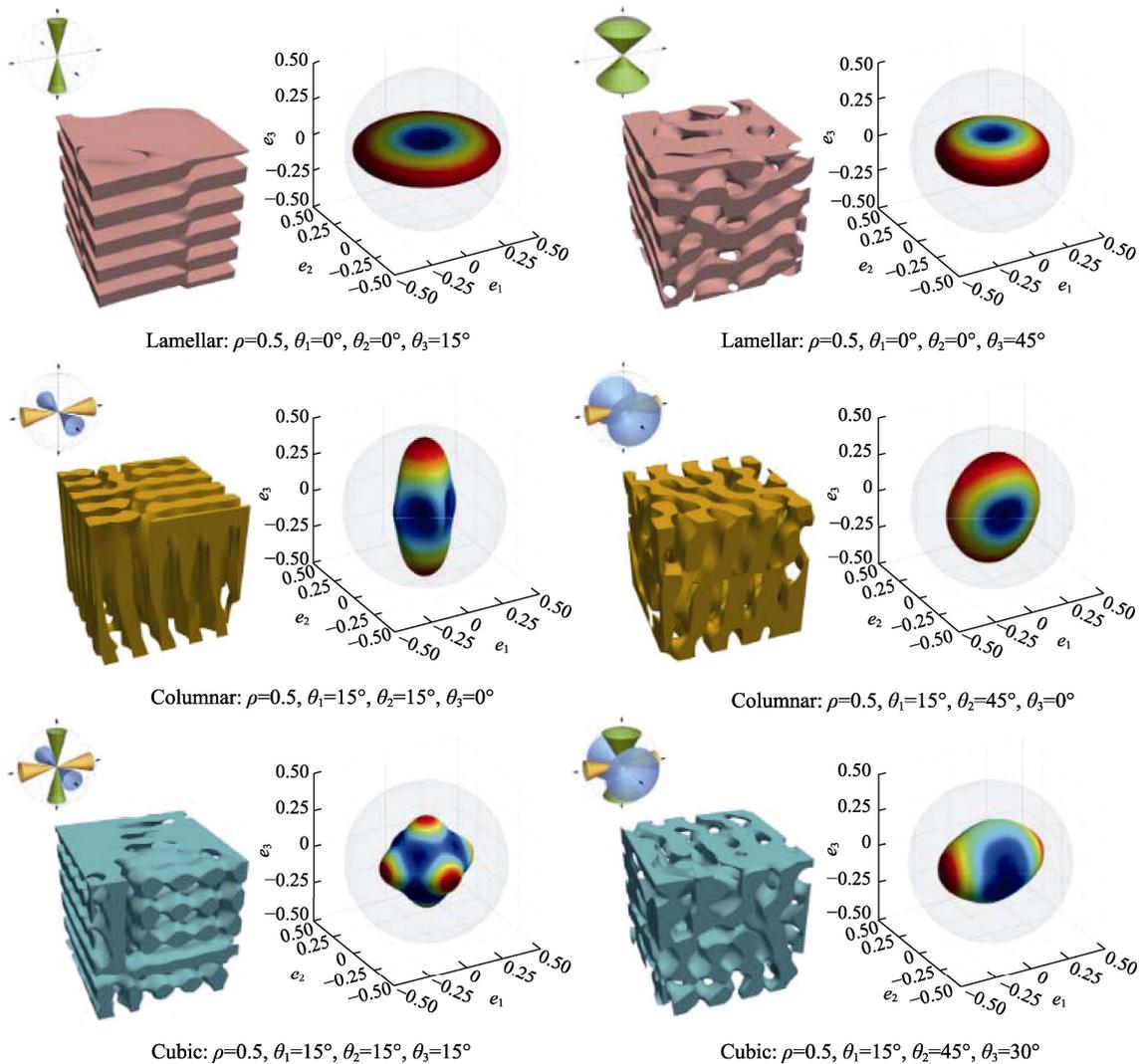


图 9 不同参数(密度及 3 个旋转角度)下生成的旋节线结构^[60]

3.1.2 参数表示

参数表示是一种通过预定义几何形状及其可变参数来定义结构的方法. 这些预定义的几何形状由一些低维的显示参数控制, 如杆的长度、横截面积等. 在超材料设计中, 这种表示形式通过改变如长度、横截面积、角度等基本参数, 来调整杆、板等基础几何形状的尺寸和形状; 这些参数直接影响结构的整体性能和功能, 如其机械、热学或光学特性. 使用参数化方法可以快速地生成大量不同结构, 并评估它们的性能, 该方法非常适合于需要探索广泛设计空间的应用场景. 例如, 在航空航天工业中, 可以通过调整参数设计出满足特定载

重和弹性要求的结构^[65-66]; 在建筑学中, 通过改变结构参数可以优化建筑材料的使用, 实现更高的能效和耐久性^[67-68]. 然而, 参数表示也有其局限性: 由于设计空间和物理性能直接依赖于预设的几何元素和参数, 限制了可实现的结构复杂性和创新. 近年来, 通过集成机器学习和 AI 技术, 新的参数化方法可以从大量设计和测试数据中学习, 自动发现最优化的参数组合, 有效地扩展设计空间并提高设计效率. 下面介绍几种用于参数化表示结构的基础单元.

(1) 杆单元. 是最基本的结构单元之一, 主要承受轴向拉伸或压缩力. 杆单元的设计参数包括

长度、横截面积、材料类型等。杆单元可以是直的还是弯曲的，并且可以具有不同的横截面形状(如圆形、方形或复杂的定制形状)。由杆状单元组成的基础类是参数表示中最早应用的方法。杆状单元定义的表示比较简明，通过改变杆的粗细可以改变结构的体积分数。Wang 等^[69]选取 10 种杆表示的基本结构，包含不同方向的杆的各种组合，通过改变控制每类几何形状的参数可以得到不同的结构，以及对应的体积分数和属性。除了几何参数，晶胞的方向也可以作为设计变量^[70]。鉴于由杆组成的网状桁架^[71-72]结构具有高刚度密度比，主要用作承载结构^[73-74]和吸能材料^[75]；同时，由于重量轻、刚度高的结构容易产生机械振动，因此对具有宽阻带的带隙结构进行适当设计，可以满足晶格结构的刚度和振动衰减的要求^[76]。

(2) 板单元。杆单元主要承受的是轴向应力，而板状单元则可以承受弯曲、剪切和扭转的力。与杆状单元相比，板状单元能增强结构的性能，使得材料具备更高的强度和更强的能量吸收能力。板单元具有相对较大的面积与厚度的比例，在土木、航空航天和汽车工程中，板单元用于设计和分析楼板、机翼、车体等结构^[77-78]。板单元的参数化设计允许优化其厚度、形状和支撑配置，以改善结构性能和材料利用效率。Tancogne-Dejean 等^[79]通过详细的计算分析表明，甚至存在提供近各向同性屈服强度和弹性各向同性的板晶格组合物。板状晶格最显著的特征是，它们的刚度和屈服强度在各向同性多孔固体理论极限的百分之几以内，这意味着各向同性板晶格的刚度比同等质量的最硬桁架晶格的刚度高出 3 倍。在 Liu 等^[80]参数化壳结构设计工作的基础上，Sun 等^[81]将类似的思路应用到板结构上设计参数化板状晶格，展示了板结构晶格相比传统晶格更大的性能空间和更高的刚度，能够接近甚至超越理论刚度上限。

(3) 随机泡沫结构(stochastic foam structures, SFS)。SFS 内部包含随机分布的孔隙或气泡，这种结构在自然界中广泛存在，如骨骼、珊瑚和一些植物组织；它们在工程和设计中的应用越来越广泛，特别是在需要轻质高强度材料的领域。利用 Voronoi 图^[82]生成 SFS 是一种常用的方法。目前，大量的工作^[83-86]利用 Voronoi 图针对 SFS 进行深入的研究，通常是在指定空间中随机分布一系列种子点，这些点的分布可以是完全随机的，也可以遵

循一定的统计分布(如泊松分布)，以模拟不同的材料特性。使用种子点生成 Voronoi 图时，每个种子点会生成一个 Voronoi 单元；通过对生成的泡沫结构进行优化和调整，以满足特定的工程要求，包括调整单元大小、形状以及密度等参数；为生成的几何结构赋予材料属性，并进行性能模拟和测试。利用 FEA 等方法，可以评估泡沫结构在实际应用中的力学性能、能量吸收能力等。

3.1.3 像素/体素表示

在数据驱动的超材料设计中应用最多的就是体素和像素表示，它们可以表示任何结构实例和一些精细复杂的结构。通过与机器学习和深度学习相结合，像素表示可以直接作为模型的输入，在数据驱动的超材料设计中，通常需要构建一个包含大量微结构与相应物理响应数据的数据库，然后使用机器学习模型从数据中学习并预测新结构的性能。Mao 等^[87]利用 GAN 模型，生成了接近各向同性弹性刚度的 Hashin-Shtrikman 上限的结构；Zhu 等^[88]利用体素表示生成一个数据库，用于多尺度的结构设计。

3.2 不同结构表示方法比较

在微结构拓扑优化中，不同结构表示方式用于设计和优化材料的微观特性，以满足特定的性能要求。对不同表示方法优点和缺点的对比如表 2 所示。

(1) 隐式函数。TPMS 通过隐式函数精确地控制整体结构，可以直接利用函数表达式调控孔隙率和比表面积等基本性能；该方法产生的表面非常光滑，避免了尖锐的转折和连接点，结构互相贯通，有利于避免应力集中的现象，结构可以根据特定的设计要求进行定制，从而优化机械性能，如刚度、强度和对外部负载的响应。然而，与简单的蜂窝结构或立方体结构相比，TPMS 内部有大量连通孔洞和曲率变化，这种几何结构的复杂性可能导致流体或应力传递路径的计算更加复杂，对于高分辨率模型设计和优化过程的计算成本较高；此外，该结构的设计自由度也受到一定限制。

SDF 能够提供连续且精确的几何表示，对于精确建模和生成复杂结构尤其重要，它在优化过程中确保有平滑的梯度，有助于改善解的质量，适用于精确建模和复杂结构的生成。然而，SDF 的计算相对复杂且计算量大，对于非常复杂或详细的结构，其计算成本较高。

表 2 不同结构表示方法对比

表示方式	优点	缺点
SDF	几何表示连续精确, 适用于精确建模和复杂结构的生成	计算相对复杂且计算量大, 对非常复杂的结构计算成本较高
隐式函数	旋节线 模仿自然过程, 可以产生结构高效并针对特定承载应用进行优化的材料配置	更适用于描述特定形态材料, 如多孔材料、复合材料等, 能表示的结构有限
	TPMS 结构和基本性能由隐式函数直接精确控制, 表面非常光滑, 互相贯通, 避免应力集中	几何结构复杂, 可能导致对于高分辨率模型计算成本很高, 设计自由度受限
参数表示	设计变量较少, 利于计算	只能限制在预定义的设计空间内探索
像素/体素表示	可以精确地表示结构的细节	设计变量太多, 分辨率提高时计算困难

旋节线结构可以设计具有功能梯度和各向异性特性的材料, 针对特定应用进行微调, 产生具有目标性能特征的更高效的材料, 为 AI 驱动的优化提供了广阔的探索设计空间. 该结构模仿自然过程, 可以产生结构高效并针对特定承载应用进行优化的材料配置, 如仿生骨结构的设计. 但是, 由于旋节线主要用于表示一类特定的结构, 模拟自旋分解过程中形成的结构, 因此更适用于描述具有特定微观形态和物理性质的材料, 如多孔材料、复合材料或某些类型的金属合金, 其应用范围相对有限.

(2) 参数表示. 通过减少设计变量的数量来简化计算过程, 由于限制在预定义的设计空间内进行结构探索, 因此其适用于快速原型制作和初步设计阶段. 该方法对于快速测试不同设计概念非常有用, 但表达能力有限, 大多只能表示某一类结构, 限制了其结构覆盖的物理属性空间.

(3) 像素/体素表示. 允许精确地控制结构的每个细节, 非常适合细节化的设计和复杂结构的生成. 随着分辨率的提高, 这种方法能够展现更多的细节, 但同时也大幅增加了计算的复杂性和成本, 尤其是在分辨率需求提高时.

4 超材料数据集的构造

在数据驱动设计中, 需要一个数据点稠密且覆盖广泛属性的大型预计算单元格数据库. 前者可以为特定的属性提供众多不同的候选, 有助于形成兼容的边界; 而后者可以在多尺度设计中实现更大的自由度. 初始数据集的来源分为从几何空间中采样和从属性空间中采样.

4.1 初始数据集的来源

4.1.1 从几何空间中采样

有了表示结构的参数就可以从参数空间中随机采样获得初始结构. 例如, 像素表示中可以随机

采样来确定每个像素的材料组成^[25], 再通过 FEA 方法计算对应的属性. 另一种常用的采样方法是使用高斯随机场生成结构图像^[89-90]. 除了以上常用的从参数空间中采样, 还有其他随机生成结构的方法. Mao 等^[87]提出一种基于区域生长的拓扑生成算法来设计多样化的结构, 在初始阶段, 设计域被所有实心像素填充; 然后空像素种子被随机分配到结构的一个像素中, 通过边界蚀刻算法, 空隙种子随机生长成空隙; 当空像素总数达到设定值时, 生长终止, 得到指定体积分数下随机生成的结构.

4.1.2 从属性空间中采样

仅在形状空间采样可能导致属性空间有偏差和空缺, 由于可达属性空间的边界是先验未知的, 因此可以利用拉丁超立方采样构建初始数据库. Wang 等^[91]沿属性空间的每个维度在 10 个层次上采样一个单位超立方体, 得到一个包含 1 000 个目标属性的矩形网格; 然后利用 SIMP 方法搜索每个采样目标^[92]对应的单胞, 在不同体积分数下搜索对应的单胞选出最优的结构; 最终, 1 000 个目标属性只找到了 358 个可行单元, 这在很大程度上是由于采样的网格与理论上不可行的属性区域重叠, 同时 SIMP 方法对初始优化结构敏感且受到体积分数的限制. 另一种方法是先估计出属性的范围. Chen 等^[93]利用 Andreassen 等^[94]的方法进行拓扑优化, 寻找边界属性上的结构, 依靠在连续优化和离散随机搜索之间交替的采样算法逐步扩展范围^[88], 这 2 个步骤都随机选择属性域边界附近的结构作为初始猜测. 其中, 连续优化阶段将结构沿着梯度方向推过所探索的属性域边界, 而离散随机阶段通过不遵循梯度的跳跃来逃避局部最小值. 在优化过程中, 除了采用上述方法解决非凸问题的优化, Zhang 等^[95]提出用三角函数覆盖初始密度场解决优化过程中的局部极小值问题; Yang 等^[96]以模量为目标函数, 在不同体积约束下构建高分辨率的体素表示的数据集.

4.2 数据增强

当表示方法和初始数据集确定后, 下一步需要从稀疏的数据集中通过数据增强得到大量的数据, 用于后续特定任务中提取出特定数据集. 如图 10 所示, Wang 等^[91]通过数据增强的方式大大增加了数据集在属性空间中的覆盖范围. 数据集的质量显著地影响着数据驱动的超材料设计中下游任务的质量, 通过数据增强可以获得覆盖广泛属性空间的高质量数据集. 数据增强常用的方法有参数改变、插值、扰动和主动学习.

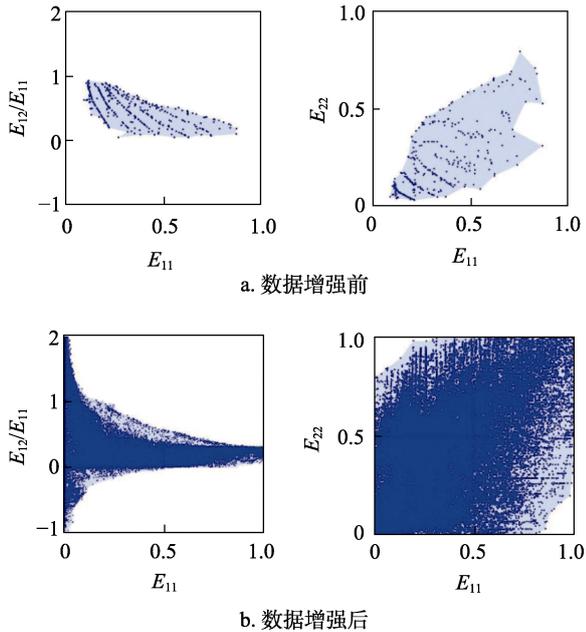


图 10 数据增强效果示意图^[91]

(1) 参数改变. 通过改变控制结构几何形状的参数来改变结构, 密集的参数选取可以得到大量的结构. 参数改变是使用最广泛的数据增强策略^[53,60,70,97-99]. 如图 11 所示, Wang 等^[70]通过改变杆的 4 种宽度参数生成其 2D 杆表示的数据集. 尽管该方法得到了广泛的应用, 但其也存在缺陷, 参数改变方法的设计自由度较小, 因为改变仅在选定的种子类内进行, 所以无法桥接多个类; 随着维数的增加, “维数灾难”导致空间采样的密度急剧下降^[100]: 仅在形状空间采样时, 即使参数改变得很密集, 也会导致属性空间的巨大偏差.

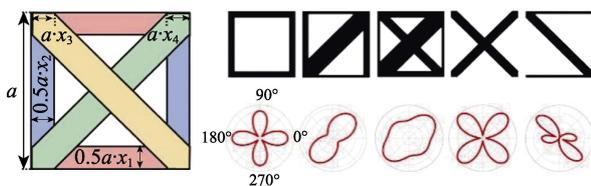


图 11 通过参数改变生成数据集^[70]

(2) 插值. 通过插值可以有效地从现有的少量数据样本生成新的数据点, 这些新数据点保持了原始数据类的关键特征和结构属性. 跨类插值提供了一条从少量初始类中生长出大型形状库的途径, 插值通过多个类共同生成一个新结构^[101-102]. 在微结构拓扑优化问题中, 由于微结构的表示空间并不方便直接进行插值, 因此尤其是对于像素/体素的表示, 常用的插值方式是将微结构形状先通过变分自编码器 (variational auto-encoder, VAE) 等方式映射到一个潜空间, 再由潜变量的插值完成结构的插值, 可以隐式地在一定程度上保证插值出结构的形状与性质的连续性.

(3) 扰动. 基于扰动的结构生成利用数据扩展的启发式方法, 其核心思想是在形状空间中对它们施加几何扰动来扩充数据集的范围, 在迭代到当前步时, 在给定数据集的属性空间中查找边界上的结构. Wang 等^[91]利用几何扰动对属性边界处的结构和稀疏处的结构进行扰动来扩展属性的边界和增加对应属性附近的结构; 但是, 扰动产生的结构使得结构表面出现凹凸不平的现象, 不利于制造. Zhang 等^[103]提出一种路径查找的方法, 实验结果表明, 在拉胀材料数据集上, 该方法比传统的扰动方式可以得到一致性更好的杨氏模量分布, 更适用于拉胀材料设计.

(4) 主动学习. 是一种特别的机器学习技术, 允许模型主动地从未标记的数据中选择它认为最有用的样本来请求标签. 该方法可以大大地减少需要标注的数据量, 节约时间和成本. 在扩充数据集的过程中, 主动学习具有较高价值, 它能够有针对性地选择那些对模型改进最有帮助的数据进行标注. 主动学习的步骤如下: 首先在一个初始的已标注数据集上进行模型训练; 然后对未标注的数据进行评估, 确定哪些数据最可能影响学习结果, 模型根据数据的不确定性或模型预测的边际效益选择数据; 之后, 选择的数据被专家标注, 并加入训练集中. 这个过程会循环进行, 直到达到预定的性能标准或数据标注预算耗尽为止. 通过这种方式, 主动学习使得模型能够更高效地学习, 因为它只关注对提高模型性能最有帮助的数据, 这在处理大规模数据集, 特别是在资源有限的情况下显得尤为重要. 因此, 主动学习是数据驱动的超材料设计中一种常用而有效的方法, 先通过生成式网络产生新的结构, 再利用 FEA 获得这些结构对应的属性, 最后将这些数据加入数据库中^[104-105].

4.3 数据集的分析

不同的数据集侧重不同的数据表达范围, 可以更好地应用于不同的任务中, 如表 3 所示. Chen 等^[93]构建一组分辨率为 $64 \times 64 \times 64$ 的体素表示的微结构, 有效地生成了大量具有负泊松比特性的微结构, 可以较好地应用于吸能等功能超材料的多尺度设计中; Wang 等^[102]生成一组有 250 000 个结构的二维正交各向异性微观结构数据库. 在其他的几何表示方面, Wang 等^[53]创建了 900 多个由 TPMS 表达的晶胞组成的材料库, 该材料库在属性空间中覆盖了较大的范围. 这些覆盖属性范围广泛且数据量巨大的数据库, 为后续的多尺度设计提供了数据集. Wang 等^[70]还运用杆表示对于 4 种形状空间属性进行采样, 生成了大量杆表示结构的形状-属性对应数据集. Chan 等^[106]创建的数据集专注于应对超材料设计中设计空间巨大、数据分布不平衡带来的数据集构建的挑战, 该数据集强调形状和物理属性的多样性, 促进机器学习过程中新结构的探索. 有的数据集是由主动学习技术生成的任务感知数据集^[107], 其中数据在针对特定任务的同时又平衡了数据的分布, 针对的是尚未评估属性的早期设计过程. 在超材料设计中, 数据集的选择关键在于其与设计目标的对应关系.

表 3 现有的一些数据集的分析

文献	表示	特色
[93]	体素	负泊松比特性微结构较多; 经过聚类、参数简化等后处理更便于使用
[102]	像素	有近 250 000 个微结构, 数目庞大, 在 VAE 生成网络训练中得以验证
[53]	TPMS	924 个 TPMS 表示的微结构, 在属性空间中覆盖范围较大
[70]	杆状单元	通过对每组杆的宽度进行采样生成了大量数据, 得到其形状参数和属性的对应关系

(1) 性质预测数据集. 适用于需要快速预测超材料性质和优化结构的场景, 此类数据集通常包含大量从实验模拟中获得的材料性质数据, 如材料的多种物理特性, 以及对应的结构信息. 通过使用深度学习或其他机器学习算法进行训练, 可以用此类数据集上的模型来预测新材料的性质, 如使用 VAE 学习材料微结构和性质之间的映射关系, 有助于快速地预测新设计的性能^[98].

(2) 多尺度设计数据集. 适用于设计宏观测量上表现优异的材料系统, 且数据集应足够大, 能够

覆盖广泛的属性范围, 具有多样性. 这样才能保证多尺度设计中有合适的微结构来填充单元, 确保相邻微结构边界的兼容性.

(3) 特定性能超材料设计的数据集. 适用于特定应用需求的材料设计, 如超高强度、特定波长的光学响应或特殊的热电性能. 此类数据集集中于与特定性能相关的性质, 如力学、光学、热学或电学性质, 通常包含大量特定条件下的测试结果和模拟数据.

为了应对未来超材料设计的挑战, 超材料设计领域的数据集还有更广阔的探索空间. 在增强数据集的多样性和广度方面, 需要采集更多实验和模拟数据, 特别是非常规或新颖材料的性能探索; 利用自动化高通量实验和仿真技术快速地生成数据, 以扩展数据集包含更广泛的材料类型和更复杂的微结构, 确保数据集可以覆盖更大的设计空间; 在利用机器学习优化数据集上, 可以开发和部署更高级的算法(如深度学习、迁移学习和强化学习), 以更有效地从现有数据中学习并预测新材料的性能; 通过机器学习技术优化数据集的构建和使用, 如通过生成模型创造合成数据来解决实验数据稀缺的问题; 在实现多尺度和多物理场集成方面, 可探索创建能够同时考虑多个物理过程和尺度的综合数据集; 对于任务特定的动态数据集的开发, 可以利用条件生成网络等技术, 根据设计的具体需求动态地生成和调整数据集内容.

5 面向超材料的网络设计

超材料的网络设计作为一个重要的研究方向, 在材料科学和工程领域引起了广泛关注, 其核心任务是通过构建合适的网络结构来描述和分析超材料的微观结构, 实现对其性能的精确控制和优化. 超材料的网络设计不仅需要考虑其微观结构的调控, 还需要优化材料的宏观性能, 如电磁、声学、光学等特性.

5.1 超材料网络设计的瓶颈与智能化突破

传统的超材料设计方法通常涉及复杂的计算, 尤其是在进行多物理场模拟时, 计算成本极高. 机器学习方法, 如深度学习通过训练神经网络模型, 可以快速、精确地预测材料的性能响应, 大大缩短了设计周期. Peng 等^[108]采用数据驱动方法, 利用卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)结构快速均匀化平行六面体微结构, 达到了比数

值均匀化快数百倍的速度;贾宇翔等^[109]对传统超材料设计中计算复杂度高、设计周期长等问题进行研究,提出一种基于遗传算法的智能设计方法,以加速超材料设计过程.深度学习等机器学习技术已用于声学 and 光学超材料的设计中,可以通过输入频域特性快速地返回物理域的设计参数,极大地缩短设计周期并提高了设计精度.例如,在声学超材料的设计中,深度神经网络能够基于希望达到的频带中心频率和带宽,返回最优设计参数.

在超材料设计中,控制微观结构和优化材料性能涉及多个复杂的挑战.(1)超材料的独特性能依赖其精细的微观几何结构,特别是在纳米尺度下的结构形态,决定了其光学、声学或力学特性.然而,实现如此复杂且精确的微观结构对制造工艺提出了极高要求,微小的制造误差都可能导致材料性能偏离预期目标.(2)超材料设计通常涉及多目标优化问题,不仅需要特定性能(如带隙、声波吸收)上进行优化,还必须兼顾其他性能指标(如机械强度、轻量化),而这些性能之间往往存在冲突.因此,在不同目标之间找到最优平衡点,是设计中的关键挑战.

超材料的设计通常需要多种材料的结合,涉及材料间的相容性问题,不同材料的物理、化学特性可能相互影响,进而影响整体材料的功能表现.材料的选择与组合需要精确地调控,以满足多重功能需求.制造精度与尺度效应也是关键问题,当微观结构的尺寸达到纳米级时,量子效应、表面效应等微观物理现象可能会改变材料的宏观行为,增加了设计的复杂性.

随着智能化需求的提升,许多超材料设计要求具备动态可调性,即通过外部刺激(如电场、磁场或温度变化)实时调整材料性能,这不仅对材料的响应速度和灵敏度提出要求,还需保证其结构在动态变化过程中的力学稳定性.因此,超材料设计不仅是物理特性优化的问题,还涉及多学科、多层次的复杂工程挑战,包括材料科学、纳米制造技术、物理学和多目标优化等领域的融合.

综上所述,超材料设计面临着从微观结构精确调控、材料组合相容性、多目标优化到制造工艺等诸多复杂且互相关联的难题,解决这些问题对于实现超材料的预期性能和广泛应用至关重要.

为了克服这些设计和制造的挑战,研究者正在探索使用 AI 和机器学习技术优化设计流程,通

过分析大量数据预测材料的性能,加速设计周期,提高设计的精确性和效率.

机器学习还支持逆向设计过程,使设计师能从期望的性能出发反向推导出结构设计,这种方法在设计分裂环超材料和超材料微腔时表现出色,通过预训练的网络能够快速预测这些结构的光学响应^[110].这种快速反馈循环加快了从概念到原型的转化速度,使设计过程更加灵活和高效.

在处理复杂或高维度的设计问题时,传统方法受限于计算资源和技术,而机器学习方法可以处理大量的数据和复杂的设计变量,使得设计师能够探索过去因技术限制而无法实现的设计方案.例如,机器学习可以优化多目标功能,如增强材料的力学性能同时改进其电磁特性,开发出具有革命性功能的新材料.Lee 等^[111]针对传统超材料设计方法在微结构调控和材料性能优化方面的局限性,提出一种基于机器学习的智能设计框架,可以更高效地设计超材料微结构.机器学习模型的使用,特别是在设计参数和性能预测方面增加了设计过程的透明度和可重复性,不仅有助于科学研究的标准化,还提高了工业应用中设计验证的效率和准确性.通过优化材料使用和生产过程,机器学习有助于实现更环保的设计解决方案,也可以帮助研究人员探索出更新颖的超材料设计.Mohsenizadeh 等^[112]探讨了 AI 在超材料发展中的应用,如可以通过算法预测和优化材料的使用,减少废料和能耗,支持可持续发展目标.智能算法尤其适合定制化设计,能够根据特定应用需求快速地调整和优化设计参数,在医疗、航空航天等要求高度个性化解决方案的行业中尤为重要.

综上所述,智能算法,特别是基于机器学习的方法,为超材料设计提供了一种新途径,能有效地克服传统设计方法的多种局限性,并对未来的超材料创新和应用开辟了新的方向.

5.2 网络设计工具的分析

智能化的超材料网络设计利用机器学习方法从数据中提取有用信息,为设计过程提供指导.如图 12 所示,这些方法包括监督学习、无监督学习、半监督学习和强化学习,它们在超材料设计中发挥着重要作用.目前,已有大量基于机器学习的超材料网络设计工作^[113-142],表 4 所示为部分相关研究.

在监督学习中,训练的机器学习模型用来预测感兴趣的属性.机器学习模型是在数据-标签对

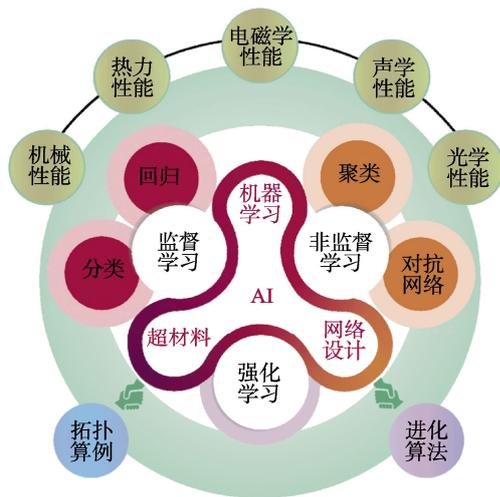


图 12 基于机器学习的超材料网络设计

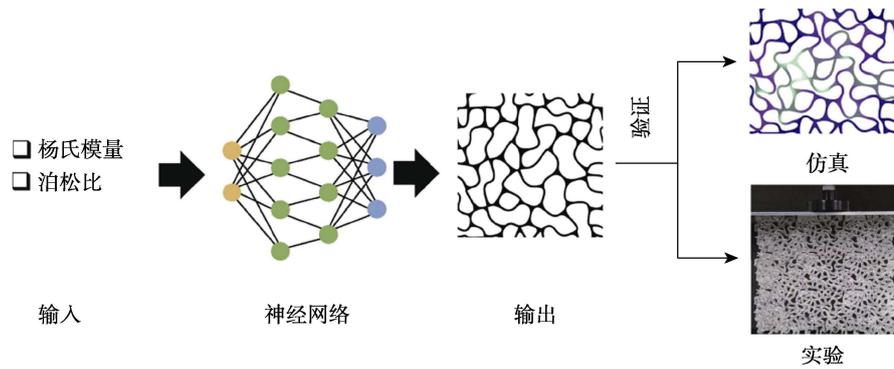
表 4 智能优化在超材料网络设计中的相关研究

机器学习类型	优化方法	文献	优化目标
监督学习	ANN+GA	[116]	可调应力应变曲线
	ANN+GA	[117]	可调应力应变曲线
	NN	[118]	可调应力应变曲线
	ANN+EA	[119]	可调泊松比
	CNN	[120]	可调泊松比
	CNN	[121]	可调泊松比
	BPNN+GA	[122]	零泊松比
	CNN	[75]	负泊松比
	DNN	[60]	负泊松比
	CGAN	[110]	可调杨氏模量和泊松比
	DNN	[123]	可调杨氏模量
	NN+GA	[124]	可调带隙
	CNN	[125]	可调带隙
	BPNN+MPGA	[126]	负水合膨胀
	NN	[127]	轻量化
非监督学习	CNN+GA	[128]	冲击实验中最大化弹性刚度, 最小化穿过的波速
	ResNet	[129]	在磁驱动下可调全局应变
	GAN	[130]	轻量化
	VAE	[131]	元等离子体生物传感器建模的光学特性
	VAE	[102]	机械性能
半监督学习	VAE	[132]	时域响应模式
	VAE	[133]	可调刚性、拉胀、类五模态和定制非线性
强化学习	GNN	[134]	机械性能
	DQN	[135]	低散射
	DRL	[136]	可调非线性变形响应
	DRL	[137]	可调变形和迟滞特性
	RL	[138]	能量吸收能力
	RL	[139]	高表面积

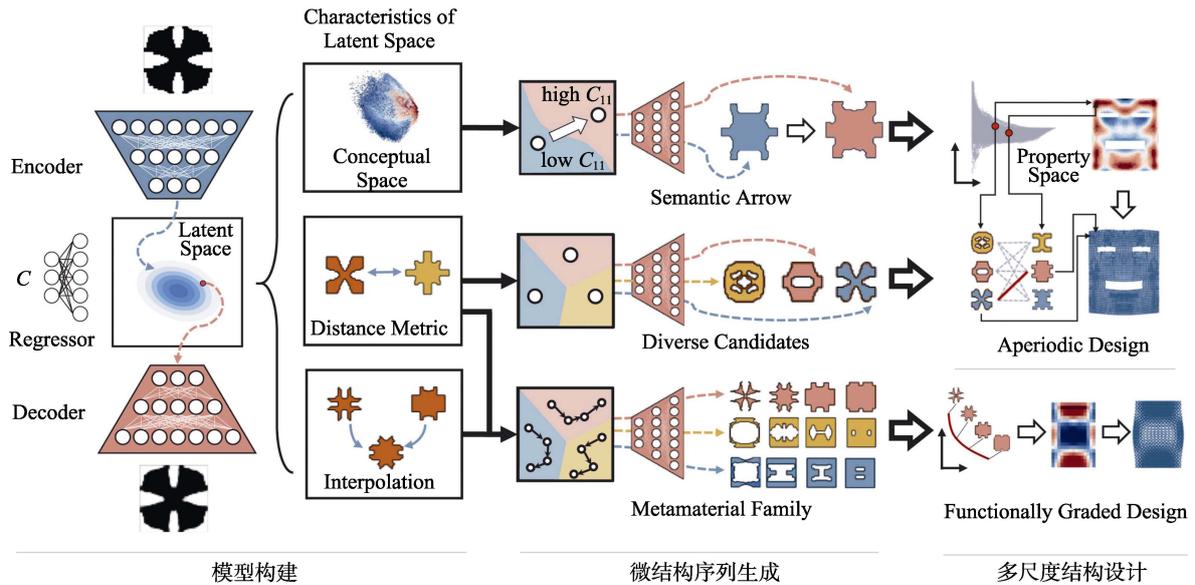
应的集合上训练的, 数据可以采取各种形式, 如场、向量、图像和图形. 根据标签的类型, 监督学习通常分为回归和分类 2 大类. 在数据驱动的超材料设计背景下, 监督学习最常用于创建形状和性能之间的关系. 数据对描述一个形状, 并将其用参数化表示, 描述感兴趣的量, 如弹性组分或响应谱. 监督学习是用更快的替代模型替换资源密集型的单元格评估过程, 模型的类型主要基于神经网络, 有时也基于高斯过程. 一旦在大量数据上训练完成, 数据驱动模型就可以即时预测未见单元格的有效属性. Zheng 等^[113]提出一种使用深度学习的负泊松比超材料逆向设计方法, 如图 13a 所示, 通过 CGAN 可以生成具有用户定义的泊松比和杨氏模量的一批辅助超材料, 而无须先验. 该网络基于有监督学习, 使用由 Voronoi 图生成的大量几何图案进行训练.

与监督学习相反, 无监督学习从未标记的数据中提取信息, 主要应用于学习复杂超材料几何形状的表达或分布. 常用的无监督学习模型包括 VAE 和 GAN. 自编码器是一种使用编码器-解码器架构提取输入数据的低维潜在变量的神经网络类型, 在超材料设计中, 用于降低超材料几何形状或高维响应(如散射参数)的维度. VAE 是一种深度生成模型, 通过采样低维且遵循良定义分布的潜在变量来生成新数据, 因此, 与原始的超材料设计表示相比, VAE 学习到的潜在表示通常更高效和可解释, 特别是在考虑高设计复杂性和自由度的情况下. Wang 等^[102]提出一种基于深度生成建模的数据驱动超材料设计框架, 旨在解决超材料的逆向设计和多尺度系统设计中面临的挑战. 如图 13b 所示, 该框架使用 VAE 和属性预测回归器同时在大型超材料数据库上进行训练, 将复杂的微结构映射到低维、连续且有组织的潜空间中. GAN 可以生成新的超材料并学习高效的表示. 与 VAE 相同, GAN 也可以生成高质量的样本. Gurbuz 等^[114]提出一种基于 GAN 的方法来设计声学超材料, 生成网络根据所需的超材料传输行为提出一个单元候选方案. 虽然 VAE 和 GAN 通常用于无监督学习, 但先前的工作提出了这些模型的变体, 如 CGAN 和条件 VAE, 它们需要监督学习.

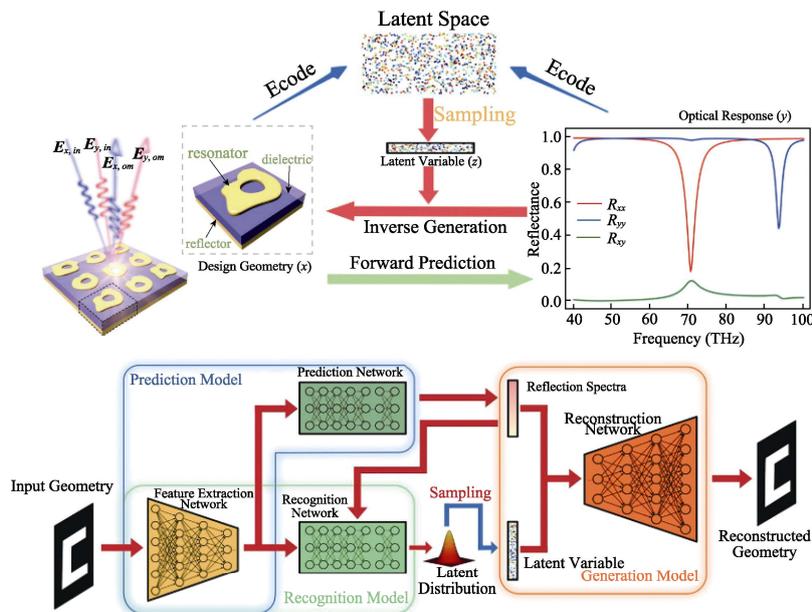
半监督学习作为一种机器学习方法, 是在部分标记的数据上进行训练, 以便模型可以预测未标记数据的标签. 与纯粹的监督学习和无监督学习相比, 半监督学习的优势在于可以利用未标记数据提供的额外信息改善模型的性能. 在超材料



a. 使用深度学习的拉胀超材料的可控逆向设计^[113]



b. 基于深度生成建模的超材料系统设计^[102]



c. 基于半监督学习策略的深度生成模型的超材料概率表示和逆向设计^[115]

图 13 基于机器学习的超材料网络设计

设计中, 半监督学习的有效性已在一些工作中得到了证明. Ma 等^[115]提出在概率生成方式下表示超材料并建模逆向设计问题的方法, 能够有效地研究复杂的结构-性能关系, 解决了在确定性模型中难以处理的一对多映射问题, 如图 13c 所示.

强化学习是超材料设计领域中的一种重要的机器学习方法. 强化学习系统一般包括策略、奖励、价值和模型 4 个要素, 其核心思想是通过与环境的持续交互, 优化决策策略. 在这一过程中, 模型在不同的状态下采取行动, 并根据环境反馈获得相应的奖励; 模型的目标是通过不断尝试, 学习到一套能够使累计奖励最大化的策略. 在超材料设计中, 通过定义设计空间(如材料的几何结构或属性)和性能目标, 强化学习能够让模型自主探索并优化设计方案, 减少人工干预, 提升效率. 强化学习方法可以自动地发现满足特定需求的超材料设计方案, 为超材料领域的研究和应用提供了新的思路. Han 等^[140]提出一种用强化学习设计新颖的双功能超材料的方案, 这种材料不仅能够有效地抑制特定频率的波(带隙特性), 还具有较好的吸能特性. 进化算法通常与机器学习结合使用, 进行超材料网络的逆向设计. 在超材料设计中, 进化算法可以作为一种优化方法, 通过模拟自然界的进化过程搜索最优的超材料结构. 该优化方法中, 机器学习用于学习超材料网络与性能之间的关系, 建立预测模型, 能够准确、高效地预测超材料网络的性能特征, 更好地辅助进化算法的优化. 将进化算法应用于逆向设计超材料网络, 以达到所期望的性能. 通过模拟自然选择和遗传机制, 进化算法能够在超材料设计空间中搜索最优的结构, 满足特定的性能要求. 通过在设计过程中迭代地调整和优化超材料结构的参数和拓扑, 进化算法可以找到性能更优的超材料结构, 实现期望的超材料性能. Deng 等^[141]提出一种通过进化算法逆向设计超材料的方法, 引入一个神经网络, 该网络提供了描述几何参数与相应应力-应变响应之间的高效计算关系; 然后将神经网络与进化策略相结合, 可以高效地识别出导致广泛目标非线性机械响应的几何形状, 并设计出优化的吸能系统、软体机器人和形变结构.

除了遗传算法, 拓扑优化也是超材料网络逆向设计的另一种重要方法, 通过调整材料的空间分布实现所需的性能和功能. 在拓扑优化中, 设计空间被分割成一个网格, 其中每个单元代表一个

材料的位置; 通过在这个网格上进行迭代优化调整材料的分布, 以最大化或最小化某个目标函数, 如材料的刚度、最小的应力集中, 或者特定频率下的模态形状; 根据需要设定不同的约束条件和目标函数, 实现所需的性能和功能. 在遗传算法中, 机器学习可以视为其前提; 而在拓扑优化的过程中, 机器学习的作用是辅助提升的. 通过机器学习, 系统可以利用大量的数据和模式识别技术辅助拓扑优化过程, 机器学习可以更加灵活地探索设计空间, 并且可以在较短的时间内找到更优的设计方案. 因此, 机器学习在拓扑优化中的作用是为优化算法提供更精确、更高效的设计方案, 提高优化的速度和性能. Kollmann 等^[142]开发了一个基于 CNN 的深度学习模型, 用于预测最佳的超材料设计, 该模型可以根据目标功能进行优化, 包括最大化体积模量、最大化剪切模量, 或者最小化泊松比(包括负值). 这种基于数据驱动模型在准确性上表现出较高的水平, 可以加速更为计算密集的设计问题, 如多尺度超材料系统的设计.

5.3 生成式 AI

近年来, 生成式 AI 技术在科技领域呈现出迅猛的发展势头, 为各行业带来了许多创新应用. 在自然语言处理领域, GPT(generative pre-trained Transformer)这样的生成式 AI 模型取得了巨大的成功, 该模型能够生成高质量的文本内容, 实现自然语言理解、文本摘要、语言翻译等多项任务. 此外, 生成式 AI 在图像生成、视频合成、音乐创作等领域也取得了令人瞩目的成就, 为创意产业注入了新的活力.

生成式 AI 依赖于诸如 Transformers, 扩散模型, flow matching, GANs 和 VAEs 等神经网络技术; 与其不同, 其他类型的 AI 技术则使用 CNN、循环神经网络和强化学习等技术. 生成式 CNN 通常从一个提示开始, 该提示允许用户或数据源提交一个起始查询或数据集来引导内容生成, 可以是一个迭代的过程, 用于探索内容的变化. 另一方面, 传统 AI 算法通常遵循预定义的规则来处理数据并产生结果.

在超材料网络设计中, 可以将超材料看作带有某种物理特性的几何数据, 对超材料的探索, 可以认为是带有预定义或者条件的生成算法. 生成式 AI 可以生成大量创新性的超材料结构设计, 为设计空间的拓展提供了无限可能性. 通过学习大量的原始数据, 生成式 AI 能够理解和模仿人类的

创造力,生成各种形态丰富、性能优异的超材料网络结构.另外,生成式 AI 的快速响应和高效性使其成为设计过程中的工具,人类可以与生成式 AI 进行实时交互,快速地获取设计建议和反馈,辅助人类进行实时决策,为设计方案的调整和优化提供指导和建议,加速设计迭代的速度和效率.

目前,生成式 AI 在超材料的设计领域的研究较少,这是由于超材料设计涉及多个因素的复杂交互,包括材料的物理特性、结构拓扑、几何形状等,因此这些因素的组合和调整需要高度的灵活性和多样性.Chen 等^[143]提出利用基于 Transformer 的深度学习模型逆向设计宽带太阳能超材料吸收器的方法,克服传统深度学习中过拟合的严重问题,并显著地提高了学习能力;Bastek 等^[144]提出一种利用视频去噪扩散模型逆向设计非线性机械超材料的方法,实验结果表明,通过对周期性随机

单胞结构的全场数据进行训练,视频扩散生成模型可以成功地预测和调节其在大应变范围内的非线性变形和应力响应,包括屈曲和接触.

6 未来研究趋势

智能算法在超材料设计中的应用已经展现出巨大的潜力,为超材料设计带来了新的思路和方法.未来,随着智能算法的不断发展和完善,将进一步推动超材料设计的研究和应用.当前,在超材料设计领域中还存在一些亟待解决的开放性问题.本节以超材料的多样化应用挑战为出发点,从实际应用的角度引出超材料的设计要求为“可表达”“可编辑”“可分析”“可优化”和“可制造”,如图 14 所示.满足上述要求之后,超材料的多模态“可扩展”将是一个新兴的研究方向.

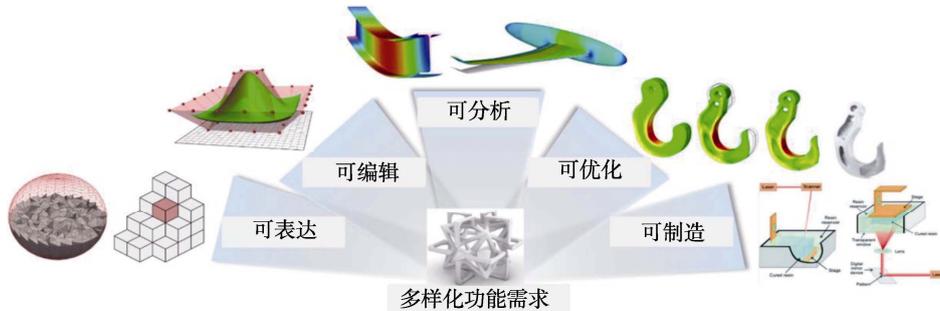


图 14 未来研究趋势

6.1 多样化需求

超材料由于其独特的电磁、声学、热学等物理特性,被广泛研究和应用于各种领域.然而,目前结合智能优化算法大多用于力学、热学材料的简单设计(多数集中在二维和简单三维情况),对于更广泛的应用场景需要更多的探索.随着超材料应用领域的多样化,未来的研究将更加注重如下方面.

(1) 多功能性需求.随着技术的发展,超材料不仅要满足单一功能,还需要具有多功能性,能够在多个领域和应用中发挥作用,这就需要研究者更多地关注超材料领域的多目标优化问题.智能算法能有效地处理多目标优化问题,为超材料设计提供更多的可能性.

(2) 极端环境下的超材料需求.例如,在高温环境下,传统材料可能会失去结构稳定性、强度和耐热性,超材料可以设计用于高温环境的新型结构和复合材料,保持其性能和稳定性;在低温环境下,材料可能会变得脆性,丧失弹性和韧性,超材

料可以通过精密设计提供更好的耐寒性和抗冲击性等.因此,特定场景的定制化性能需求将是一个重要的研究方向.

(3) 贴合实际应用的反物理需求,如负泊松比结构、负折射材料等.反物理超材料可以用于制造隐形设备,使物体在电磁或声波等波段上呈现出反常的散射或吸收特性,实现对电磁波或声波的屏蔽或隐藏,这种技术在军事、航空航天和通信领域有广泛应用.如何打破常规惯性思维,发掘超材料背后的反物理需求,将是一个关键的研究方向.

(4) 构造仿生超材料,多方位理解自然探索自然.仿生学是一种通过模仿自然界中的生物系统设计和制造新型材料和技术的方法.通过研究蝴蝶的翅膀、鸟类的羽毛以及其他生物体的结构,研究可以借鉴自然界的设计原则,设计出具有类似特性的超材料.因此,利用超材料建模类自然结构,然后进行仿真测试应用,从而解释自然、理解自然,也将会是一个非常重要的研究方向.

6.2 可表达——多样化表达

目前, 智能算法的超材料数据分析大多集中在二维超材料, 三维特定表示的结构(如板结构、壳结构、杆结构等), 对于更一般的结构表示的探索仍然较少. 高维超材料的表达的发展受到以下因素影响: (1) 三维超材料^[145]具有复杂的微观结构和多种物理性质, 使得生成全面、准确和可靠的数据集变得具有挑战性. 不同的超材料类型、结构参数和应用需求都需要特定的数据生成和验证, 增加了数据集的复杂性和多样性. (2) 大量的计算资源需求. 由于三维超材料的复杂性, 因此需要大量的计算资源进行高分辨率的模拟和建模. 高性能计算(high performance computing, HPC)、大规模并行处理和高效的算法是生成三维超材料数据集的关键, 由于这些资源和技术通常限制在专业的 HPC 中心, 因此, 单 GPU 下的高分辨率三维微结构的高效计算将是一个非常重要的研究方向. LIVE3D 框架^[95]目前仅提供了力学超材料的优化, 更多功能性超材料的设计还有待开发与扩展.

除此之外, 超材料的多材料优化也是一种设计策略, 通过组合 2 种或更多不同类型的材料来实现所需的特定性质和功能. 该方法旨在优化超材料的性能, 同时克服单一材料的局限性. 通过合理地组合不同类型的材料, 多材料设计可以显著地增强超材料的性能, 如电磁、声学、光学和热学等性能. 多材料设计框架具有很高的扩展性, 可以适应不同规模和复杂度的制造需求, 进行多材料设计时需要考虑多个因素, 如材料性质、制备技术、成本和可持续性, 并进行合适的材料选择和优化. 总的来说, 超材料的多材料设计, 为实现高性能、多功能和经济可行的超材料提供了一个强大的工具和策略. 随着材料科学、制造技术和应用需求的不断发展, 多材料设计将在超材料研究和应用中发挥重要的作用.

6.3 可编辑——交互设计

针对目前超材料表示方式的局限性, 优化得到的超材料大多基于密度法即 0-1 分布, 无法直接进行交互设计, 进而无法直接分析对力学行为的直观作用. 文献[19]提出了统一的超材料的设计流程, 其中, 设计师编辑一部分超材料结构的, 然后利用算法进行全局生成. 另外, 如何将多种优化方法的结果转化为工业界通用的 CAD 标准, 从而实现实时的设计与修改, 这也是一个重要的研究方向. 设计师可以通过 CAD 界面直观地编辑超材料的微观结构, 快速验证设计方案并进行调整. CAD

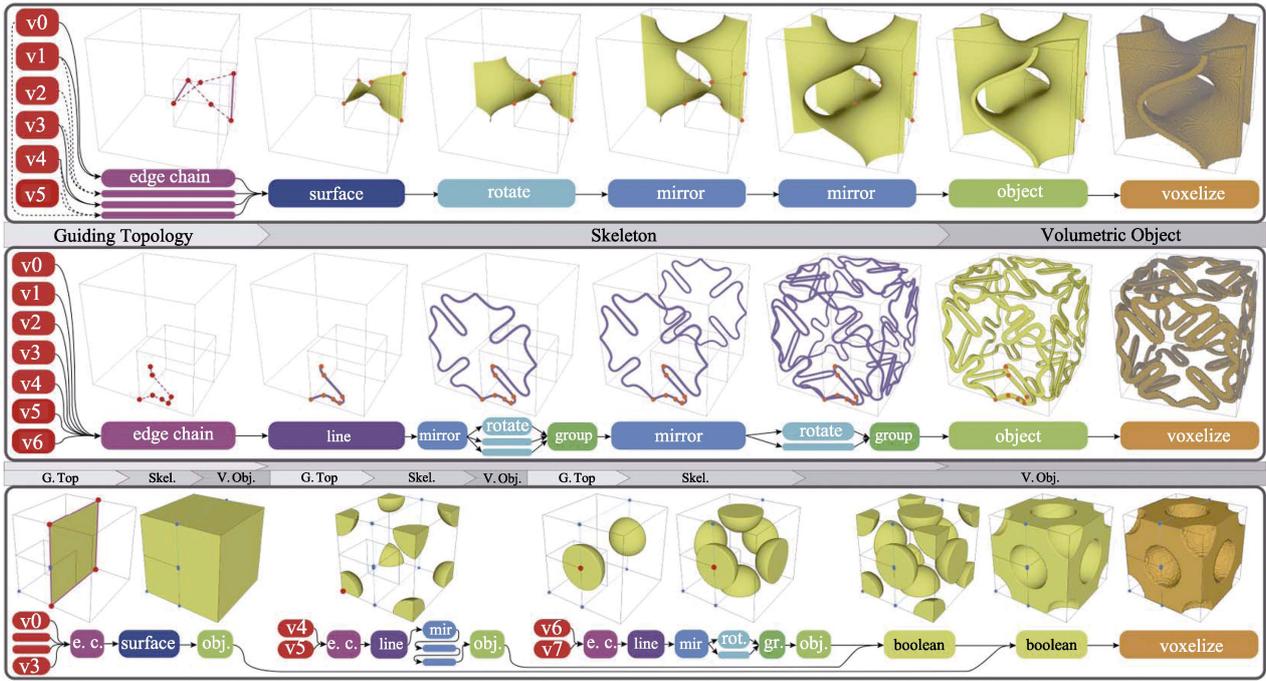
软件通常具有强大的可视化和分析功能, 与超材料的可编辑性集成, 可以为设计师提供更直观、更深入的分析工具. 设计师可以通过 CAD 软件对超材料结构的性能进行可视化展示和分析, 更好地理解材料的行为和特性. 文献[146]提出了利用 Bézier 表示的负泊松比超材料, 通过调控控制点的位置即可实现结构的泊松比变化, 用于后续的制造与测试. 图 15 所示为可编辑超材料的 2 个相关工作.

6.4 可分析——高精度高效求解

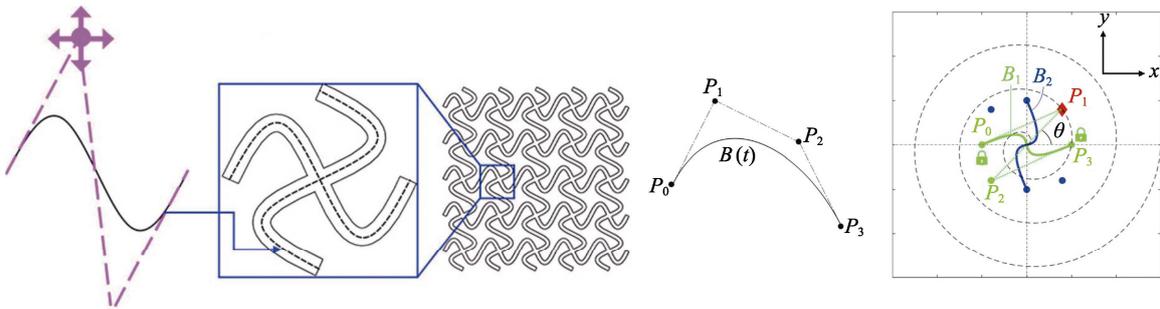
可分析包括 2 个层面: (1) 计算精度有保证. 精确的计算是确保设计产品、结构或系统安全可靠性的关键, 高精度计算可以帮助工程师更准确地评估设计方案的性能和稳定性, 降低工程项目的风险. (2) 计算效率要在可控范围内. 在大规模的科学计算、工程设计和优化过程中, 减少计算时间意味着能够更快地获得结果, 提高生产效率和降低成本.

在非线性问题中, 高精度计算显得尤为重要, 其精确的计算结果可以用于优化产品设计和制造过程, 提高效率 and 性能. 通过精确地模拟和分析, 工程师可以找到最佳的设计参数和制造方法, 从而节约时间和成本, 提高产品质量. 常用的高精度计算手段包括: (1) 细化的线性网格剖分^[147]. 该方法将产生大量的计算单元, 增加了计算量, 降低了计算效率. (2) 高阶的网格剖分. 将原始设计域剖分成高阶单元, 如 Bézier 单元^[148]. (3) 高阶的求解基函数. 通过将求解基函数升阶以保证求解精度, 其也是一种常见的高精度求解手段^[149]. 在 CAGD 领域中, 等几何分析方法^[150-151]是一种常见的高精度计算手段, 能够对复杂的结构和边界条件进行高精度的模拟和分析. 图 16 所示为上述 3 种高精度求解方法的相关工作.

HPC 在科学研究、工程设计和数据分析等领域中发挥着关键作用. 在拓扑优化领域, 目前已经有一系列的 HPC 的工作, 如利用多 CPU 并行优化进行超高分辨率的机翼模型的轻量化优化^[152], 利用 GPU 加速的拓扑优化求解^[153], 利用多重网格法的高效 PDE 求解^[154], 利用自适应网格剖分的加速算法^[155]等. 通过并行计算和加速优化算法, HPC 能够加速数据生成和处理的速度, 支持复杂的模型和算法; 同时, 合理地设计高效的数据生成策略, 能够生成高质量、一致性和多样性的数据集, 尤其是对三维数据集的开发将有重要的研究意义. HPC 在三维全尺度分析中具有关键作用. 三维全

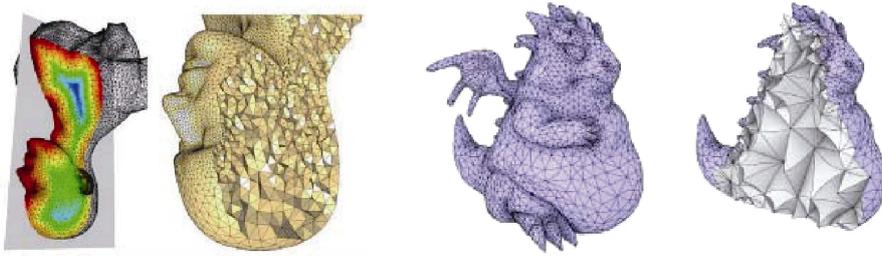


a. 统一的超材料设计流程^[19]



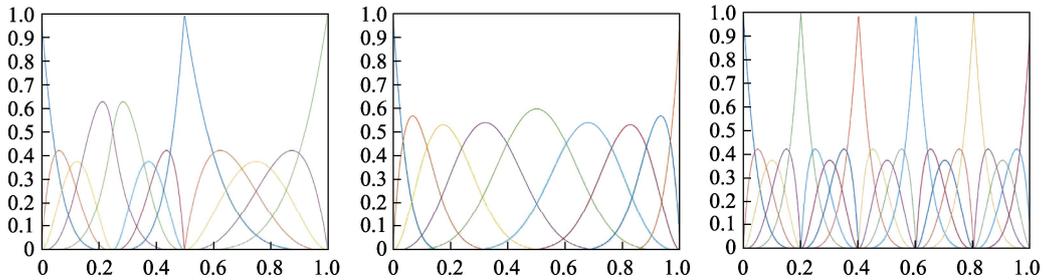
b. 基于Bézier表示的负泊松比超材料^[146]

图 15 可编辑超材料设计相关工作



a. 四面体网格生成^[147]

b. 高阶网格生成^[148]



c. 高阶的插值基函数^[149]

图 16 高精度求解方法

尺度分析需要处理大量的数据和复杂的模型, 通常需要大量的计算资源和处理能力, HPC 提供了必要的计算能力, 使得研究人员和工程师能够进行更复杂、更详细的分析, 获得更准确的结果. HPC 可以进行高度并行的计算, 同时处理多个任务和数据集, 大大加快了分析速度; HPC 还支持更复杂的模型和算法, 使得研究人员能够模拟和分析更真实、更全面的系统. 这对于理解复杂的物理现象、优化设计和解决实际问题至关重要. 图 17 所示为 HPC 方法在拓扑优化领域的相关工作.



图 17 HPC 方法

6.5 可优化——快速设计周期

计算资源(内存&时间)和初始值设置仍然是高

分辨率的超材料的优化瓶颈, 然而, 生成式模型能够自动生成具有特定特性的候选超材料结构, 极大地减少了人工设计的时间和成本. 优化设计方法则可以在这些候选结构中快速筛选出性能最优的结构. 此外, 生成式模型, 特别是基于深度学习的模型, 如 GANs, VAEs 和扩散模型, 能够从有限的中学习有价值的信息, 这对于超材料研究具有重要意义, 可以探索传统方法难以覆盖的设计空间, 发现新的超材料结构和性能组合. 一些先进的生成式模型具备实时生成和优化的能力, 可以根据实时反馈动态地调整设计, 在需要快速响应和迭代的应用场景中尤为重要. 随着技术的不断发展, 生成式模型将在更广泛的科学研究和工程应用中发挥重要作用.

6.6 可制造——高效高精度制造与测试

设计超材料时, 制造过程的可行性和效率也是需要考的因素. 设计的超材料需要能够通过现有的制造技术和方法实现, 超材料的高效高精度制造是实现其在多个应用领域中广泛应用的关键. 用先进的制造技术, 如 3D 打印、光刻、纳米制造技术等, 可以实现对超材料微观结构的精确控制和复杂几何形状的制造. 图 18 所示为超材料的常用制备方法, 采用高精度的质量控制和检测技术, 如光学显微镜、扫描电子显微镜和原子力显微镜等, 可以对超材料的微观结构和性能进行精确的检测和评估.

高效、高精度的制造技术不仅可以保证超材料的优异性能, 还可以提高生产效率并降低制造成

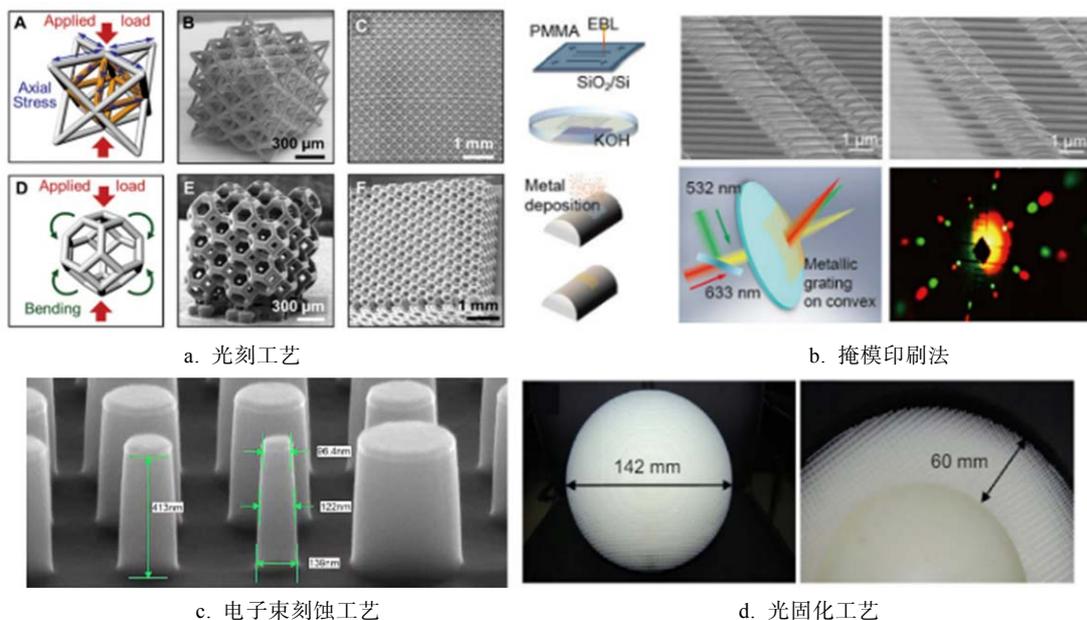


图 18 高精度制造方法

本。然而，超材料的高效高精度制造是一个复杂且具有挑战性的过程，尽管已有许多先进的制造技术和方法，但仍然存在一些瓶颈，限制了其在实际应用中的广泛应用。在制造方面，先进的制造技术和设备往往需要大量的投资；选择合适的材料和优化其性能，是制造高效高精度超材料的关键。但是，当前的材料库无法满足所有应用的需求，需要进一步地研究和开发。尽管已有许多先进的制造技术，但仍然需要精确地控制工艺参数，以实现所需的微观结构和性能，而这可能需要长时间的优化和调试。在测试方面，超材料的复杂性使得制造过程的可重复性可能会受到影响，导致在不同的试验条件下得到不同的结果。

结合智能算法可以使超材料的高精度高效制造变成现实，利用 AI 技术优化超材料的制造过程，包括材料合成、加工和成型等环节；通过监控和分析制造过程中的数据，该技术可以识别出潜在的优化点，并提出优化方案，提高制造效率和质量。基于 AI 技术建立智能制造平台，集成材料设计、制造过程优化、智能材料选择、过程监控与质量控制等功能，实现超材料的全流程智能化管理和控制，这样的平台可以提高超材料的制造效率和质量。

6.7 可扩展——多模态

将超材料的设计与当代日益发展的图形学、视觉技术结合，也将是一个有意义的发展方向。例如，文本生成超材料是一个新兴的研究方向，其核心是利用自然语言处理和机器学习技术设计和优化超材料结构，通过将文本描述转化为超材料的物理参数，为超材料设计提供了一种全新的途径。通过合理地编码文本语言，希望可以快速地生成各种复杂的超材料设计，同时减少传统设计中烦琐的参数调整过程。然而，这种方法也面临着一些挑战，例如，如何准确地将文本描述转化为物理参数，以及如何确保生成的超材料满足实际应用需求。此外，草图生成超材料也是一个少有研究但能够高效、便捷地设计超材料的途径。该方法将草图设计技术与计算方法相结合，旨在通过简单的手绘草图或轮廓来快速地生成超材料结构，提供了一个直观、高效的方式，使非专家用户也能参与超材料的设计过程中。

为了解决这些问题，需要进一步地研究和创新，开发新的技术和方法，提高设计/制造效率和精度，降低成本，满足超材料在各种应用领域的需求。随着智能算法在超材料设计中的应用，跨学科合作将更加密切，为超材料技术的创新和推广打

开了新的可能性。通过不同学科领域专家的共同努力，可以更好地理解超材料的性质和应用，推动超材料技术向前发展。

7 总结与展望

在超材料设计领域，智能设计正逐渐成为新的研究热点。通过结合 AI 技术，研究人员能够更高效地发现新的超材料结构和性质。智能算法在该领域有 3 点优势：(1) 探索和预测未知的超材料性质。通过机器学习和数据挖掘技术，研究人员可以从大量的实验数据中提取有价值的信息，识别隐藏的模式和趋势，为新的超材料设计提供有用的见解和指导；(2) 超材料的性能。通过在设计过程中考虑指定的目标函数和约束条件，智能算法可以帮助研究人员找到更加优化的超材料结构，满足特定的应用需求，如材料的轻质化需求、高刚度力学性能需求、能量损耗最小化需求等；(3) 加速超材料的设计过程。传统的超材料设计方法需要大量的实验和迭代，而智能算法可以自动化这个过程，从而大大提高效率。因此，智能算法在正向预测到反向优化到加速求解 3 个设计的环节中，都发挥着重要作用。

本文从超材料基本概念出发，以超材料的研究问题背景为切入点，详细介绍超材料的实际应用需求，重点阐述超材料的几何表示和超材料的数据集构造，分析了目前所涉及的网络设计算法与生成式模型结合的前景展望。通过对智能算法超材料现有工作的详细分析，对现有工作进行了跨学科范围的综述。

本文基于目前多物理场、多功能的超材料研究，从方法论的层面提出超材料的设计要求为“可表达”“可编辑”“可分析”“可优化”和“可制造”，并针对每个要求进行分析讨论。满足上述要求之后，超材料的多模态可扩展将是一个新兴的研究方向。总之，超材料的智能设计是一个充满潜力和挑战的研究领域，其前景需要交叉型复合人才共同研究，以不断地推动其发展和应用。

超材料设计与大模型结合的发展非常广阔，涉及材料科学、计算机科学和工程学等多个领域。随着技术的不断发展和交叉学科的融合，有望看到更多创新和突破，为人类社会带来更多价值。例如，利用大模型的能力，可以加速超材料的设计和优化过程；通过对大量材料参数和性能数据进行训练，可以建立高效的模型，预测出具有特定性能

的超材料结构. 因此, 将超材料设计与大模型结合可以极大地缩短传统试错方法所需的时间和成本. 此外, 大模型可以帮助实现智能超材料的优化和控制, 通过与传感器和反馈系统结合, 超材料可以根据外部环境的变化自动地调整其性能和结构, 实现最佳效果. 这种自适应性对于许多应用, 如电磁波隐身技术和声学隔离, 都具有重要意义.

参考文献(References):

- [1] Cui T J, Smith D R, Liu R P. *Metamaterials*[M]. New York: Springer, 2010
- [2] Liu Y M, Zhang X. *Metamaterials: a new frontier of science and technology*[J]. *Chemical Society Reviews*, 2011, 40(5): 2494-2507
- [3] Palma G, Mao H N, Burghignoli L, *et al.* *Acoustic metamaterials in aeronautics*[J]. *Applied Sciences*, 2018, 8(6): Article No.971
- [4] Abramovič V. *Artificial life approach to interactive architecture*[D]. Czech: Czech Technical University, 2019
- [5] Venkatesan R, Singaravelu R. *An overview of metamaterials in biomedical applications*[OL]. [2024-06-05]. https://www.researchgate.net/publication/265298316_An_Overview_of_Metamaterials_in_Biomedical_Applications
- [6] Zheludev N I, Kivshar Y S. *From metamaterials to metadevices*[J]. *Nature Materials*, 2012, 11(11): 917-924
- [7] Wood J. *The top ten advances in materials science*[J]. *Materials Today*, 2008, 11(1-2): 40-45
- [8] Jiao P C, Alavi A H. *Artificial intelligence-enabled smart mechanical metamaterials: advent and future trends*[J]. *International Materials Reviews*, 2021, 66(6): 365-393
- [9] Dong Zhetong, Lin Hongwei. *Computer aided topological design—survey on geometric design and processing based on persistent homology*[J]. *Journal of Graphics*, 2022, 43(6): 957-966(in Chinese)
(董哲同, 蔺宏伟. 计算机辅助拓扑设计——持续同调在几何设计和处理中的应用[J]. *图学学报*, 2022, 43(6): 957-966)
- [10] Kumar R, Kumar M, Chohan J S, *et al.* *Overview on metamaterial: history, types and applications*[J]. *Materials Today: Proceedings*, 2022, 56: 3016-3024
- [11] Bendsøe M P, Sigmund O. *Topology optimization: theory, methods, and applications*[M]. 2nd ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004
- [12] Bendsøe M P, Kikuchi N. *Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method*[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1988, 71(2): 197-224
- [13] Bendsøe M P. *Optimal shape design as a material distribution problem*[J]. *Structural Optimization*, 1989, 1(4): 193-202
- [14] Zhou M, Rozvany G I N. *The COC algorithm, Part II: topological, geometrical and generalized shape optimization*[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1991, 89(1-3): 309-336
- [15] Gao J, Cao X F, Xiao M, *et al.* *Rational designs of mechanical metamaterials: formulations, architectures, tessellations and prospects*[J]. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2023, 156: Article No.100755
- [16] Frenzel T, Kadic M, Wegener M. *Three-dimensional mechanical metamaterials with a twist*[J]. *Science*, 2017, 358(6366): 1072-1074
- [17] Zheng X Y, Lee H, Weisgraber T H, *et al.* *Ultralight, ultrastiff mechanical metamaterials*[J]. *Science*, 2014, 344(6190): 1373-1377
- [18] Berger J B, Wadley H N G, McMeeking R M. *Mechanical metamaterials at the theoretical limit of isotropic elastic stiffness*[J]. *Nature*, 2017, 543(7646): 533-537
- [19] Makatura L, Wang B H, Chen Y L, *et al.* *Procedural metamaterials: a unified procedural graph for metamaterial design*[J]. *ACM Transactions on Graphics*, 2023, 42(5): Article No.1168
- [20] Xiao M, Sha W, Zhang Y, *et al.* *CMTO: configurable-design-element multiscale topology optimization*[J]. *Additive Manufacturing*, 2023, 69: Article No.103545
- [21] Sha W, Xiao M, Huang M Z, *et al.* *Topology-optimized free-form thermal metamaterials for omnidirectionally cloaking sensors*[J]. *Materials Today Physics*, 2022, 28: Article No.100880
- [22] Hedayatrasa S, Abhary K, Uddin M. *On topology optimization of acoustic metamaterial lattices for locally resonant bandgaps of flexural waves*[OL]. [2024-06-05]. <https://arxiv.org/abs/1611.06242>
- [23] Dong H W, Zhao S D, Wei P J, *et al.* *Systematic design and realization of double-negative acoustic metamaterials by topology optimization*[J]. *Acta Materialia*, 2019, 172: 102-120
- [24] Noguchi Y, Matsushima K, Yamada T. *Level set-based topology optimization for the design of labyrinthine acoustic metamaterials*[J]. *Materials & Design*, 2022, 219: Article No.110832
- [25] Abueidda D W, Almasri M, Ammourah R, *et al.* *Prediction and optimization of mechanical properties of composites using convolutional neural networks*[J]. *Composite Structures*, 2019, 227: Article No.111264
- [26] Jiao P C, Mueller J, Raney J R, *et al.* *Mechanical metamaterials and beyond*[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): Article No.6004
- [27] Chen J, Hu S S, Zhu S N, *et al.* *Metamaterials: from fundamental physics to intelligent design*[J]. *Interdisciplinary Materials*, 2023, 2(1): 5-29
- [28] Bostanabad R, Zhang Y C, Li X L, *et al.* *Computational microstructure characterization and reconstruction: review of the state-of-the-art techniques*[J]. *Progress in Materials Science*, 2018, 95: 1-41
- [29] Hassani B, Hinton E. *A review of homogenization and topology optimization II—analytical and numerical solution of homogenization equations*[J]. *Computers & Structures*, 1998, 69(6): 719-738
- [30] Sigmund O. *Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem*[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1994, 31(17): 2313-2329
- [31] Wu J, Sigmund O, Groen J P. *Topology optimization of multi-scale structures: a review*[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021, 63(3): 1455-1480
- [32] de Kruijf N, Zhou S W, Li Q, *et al.* *Topological design of structures and composite materials with multiobjectives*[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2007, 44(22-23):

- 7092-7109
- [33] Radman A, Huang X, Xie Y M. Topological optimization for the design of microstructures of isotropic cellular materials[J]. *Engineering Optimization*, 2013, 45(11): 1331-1348
- [34] Huang X, Radman A, Xie Y M. Topological design of microstructures of cellular materials for maximum bulk or shear modulus[J]. *Computational Materials Science*, 2011, 50(6): 1861-1870
- [35] Wang L W, Boddapati J, Liu K, *et al.* Mechanical cloak via data-driven aperiodic metamaterial design[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2022, 119(13): Article No.e2122185119
- [36] Gao J, Luo Z, Xia L, *et al.* Concurrent topology optimization of multiscale composite structures in Matlab[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2019, 60(6): 2621-2651
- [37] Li D W, Liao W H, Dai N, *et al.* Anisotropic design and optimization of conformal gradient lattice structures[J]. *Computer-Aided Design*, 2020, 119: Article No.102787
- [38] Garner E, Kolken H M A, Wang C C L, *et al.* Compatibility in microstructural optimization for additive manufacturing[J]. *Additive Manufacturing*, 2019, 26: 65-75
- [39] Lv W T, Li D, Dong L. Study on mechanical properties of a hierarchical octet-truss structure[J]. *Composite Structures*, 2020, 249: Article No.112640
- [40] Zhang L, Hu Z H, Wang M Y, *et al.* Hierarchical sheet triply periodic minimal surface lattices: design, geometric and mechanical performance[J]. *Materials & Design*, 2021, 209: Article No.109931
- [41] Jueptner M, Frith C D, Brooks D J, *et al.* Anatomy of motor learning. II. Subcortical structures and learning by trial and error[J]. *Journal of Neurophysiology*, 1997, 77(3): 1325-1337
- [42] Wang H T, Pan C, Zhao H Y, *et al.* Design of a metamaterial film with excellent conformability and adhesion for bandage substrates[J]. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2021, 124: Article No.104799
- [43] Zhang E T, Liu H, Ng B F. Mechanics of re-entrant anti-trichiral honeycombs with nature-inspired gradient distributions[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2023, 259: Article No.108597
- [44] Ashok D, Raju Bahubalendruni M V A, Johnney Mertens A, *et al.* A novel nature inspired 3D open lattice structure for specific energy absorption[J]. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering*, 2022, 236(6): 2434-2440
- [45] Kim M S, Lee Y, Ahn J, *et al.* Skin-like omnidirectional stretchable platform with negative Poisson's ratio for wearable strain-pressure simultaneous sensor[J]. *Advanced Functional Materials*, 2023, 33(3): Article No.2208792
- [46] Sigmund O. Systematic design of metamaterials by topology optimization[M] //Pyrz R, Rauhe J C. *IUTAM Symposium on Modelling Nanomaterials and Nanosystems*. Dordrecht: Springer, 2009: 151-159
- [47] Diaz A R, Sigmund O. A topology optimization method for design of negative permeability metamaterials[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2010, 41(2): 163-177
- [48] Gao J, Xiao M, Zhang Y, *et al.* A comprehensive review of isogeometric topology optimization: methods, applications and prospects[J]. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 2020, 33(1): Article No.87
- [49] Wang J, Callanan J, Ogunbodede O, *et al.* Hierarchical combinatorial design and optimization of non-periodic metamaterial structures[J]. *Additive Manufacturing*, 2021, 37: Article No.101710
- [50] Nguyen B D, Han S C, Jung Y C, *et al.* Design of the *P*-surfaced shellular, an ultra-low density material with micro-architecture[J]. *Computational Materials Science*, 2017, 139: 162-178
- [51] Al-Ketan O, Lee D W, Rowshan R, *et al.* Functionally graded and multi-morphology sheet TPMS lattices: design, manufacturing, and mechanical properties[J]. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2020, 102: Article No.103520
- [52] Yan Xin, Tian Lihao, Peng Hao, *et al.* Design and applications of triply periodic minimal surfaces: a survey[J]. *Journal of Computer-Aided Design & Computer Graphics*, 2023, 35(3): 329-340(in Chinese)
(闫鑫, 田李昊, 彭昊, 等. 三周期极小曲面结构设计及应用综述[J]. *计算机辅助设计与图形学学报*, 2023, 35(3): 329-340)
- [53] Wang J, Chen W, Da D C, *et al.* IH-GAN: a conditional generative model for implicit surface-based inverse design of cellular structures[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 396: Article No.115060
- [54] Xu Y L, Pan H, Wang R N, *et al.* New families of triply periodic minimal surface-like shell lattices[J]. *Additive Manufacturing*, 2023, 77: Article No.103779
- [55] Feng J W, Fu J Z, Yao X H, *et al.* Triply periodic minimal surface (TPMS) porous structures: from multi-scale design, precise additive manufacturing to multidisciplinary applications[J]. *International Journal of Extreme Manufacturing*, 2022, 4(2): Article No.022001
- [56] Lee D, Chan Y C, Chen W, *et al.* t-METASET: task-aware acquisition of metamaterial datasets through diversity-based active learning[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2023, 145(3): Article No.031704
- [57] Attar H R, Foster A, Li N. Implicit neural representations of sheet stamping geometries with small-scale features[J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2023, 123: Article No.106482
- [58] 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. Los Alamitos: IEEE Computer Society Press, 2019: 165-174
- [59] Hu J B, He Y, Xu B X, *et al.* IF-TONIR: iteration-free topology optimization based on implicit neural representations[J]. *Computer-Aided Design*, 2024, 167: Article No.103639
- [60] Kumar S, Tan S, Zheng L, *et al.* [J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6(1): Article No.73
- [61] McMillan K L, Öztürk D S, Acar P. Inverse design of 2D-mechanical metamaterials with spinodal topologies under uncertainty[OL]. [2024-06-05]. <https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2022-0811>
- [62] Vafaefar M, Moerman K M, Vaughan T J. Experimental and computational analysis of energy absorption characteristics of three biomimetic lattice structures under compression[J]. *Jour-*

- nal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 2024, 151: Article No.106328
- [63] Golnary F, Asghari M. Data-driven analysis of spinodoid topologies: anisotropy, inverse design, and elasticity tensor distribution[J]. *International Journal of Mechanics and Materials in Design*, 2024, 20(5): 1029-1051
- [64] Zheng L, Kumar S, Kochmann D M. Data-driven topology optimization of spinodoid metamaterials with seamlessly tunable anisotropy[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 383: Article No.113894
- [65] Raja V, Kokkolaras M, Isaksson O. A simulation-assisted complexity metric for design optimization of integrated architecture aero-engine structures[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2019, 60(1): 287-300
- [66] De S. Structural modeling and optimization of aircraft wings having curvilinear spars and ribs (SpaRibs)[D]. Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute and State University, 2017
- [67] Laghi V, Palermo M, Gasparini G, *et al.* Computational design and manufacturing of a half-scaled 3D-printed stainless steel diagrid column[J]. *Additive Manufacturing*, 2020, 36: Article No.101505
- [68] Liao Y, Krishnan S. Geometric design and kinematics of spatial deployable structures using tripod-scissor units[J]. *Structures*, 2022, 38: 323-339
- [69] Wang L W, van Beek A, Da D C, *et al.* Data-driven multiscale design of cellular composites with multiclass microstructures for natural frequency maximization[J]. *Composite Structures*, 2022, 280: Article No.114949
- [70] Wang L W, Liu Z, Da D C, *et al.* Generalized de-homogenization via sawtooth-function-based mapping and its demonstration on data-driven frequency response optimization[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 395: Article No.114967
- [71] Wadley H, Dharmasena K, Chen Y, *et al.* Compressive response of multilayered pyramidal lattices during underwater shock loading[J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2008, 35(9): 1102-1114
- [72] Glaesener R N, Bastek J H, Nonon F, *et al.* Viscoelastic truss metamaterials as time-dependent generalized continua[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2021, 156: Article No.104569
- [73] Mizzi L, Spaggiari A. Lightweight mechanical metamaterials designed using hierarchical truss elements[J]. *Smart Materials and Structures*, 2020, 29(10): Article No.105036
- [74] Yang J X, Chen X H, Sun Y X, *et al.* Rational design and additive manufacturing of grain boundary-inspired, multi-architecture lattice structures[J]. *Materials & Design*, 2023, 235: Article No.112448
- [75] Wilt J K, Yang C, Gu G X. Accelerating auxetic metamaterial design with deep learning[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2020, 22(5): Article No.1901266
- [76] An X Y, Lai C L, Fan H L, *et al.* 3D acoustic metamaterial-based mechanical metalattice structures for low-frequency and broadband vibration attenuation[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2020, 191-192: 293-306
- [77] Sahu A R, Behera S, Mukharjee B B, *et al.* Parametric study on dynamic responses of stiffened sandwich composite bridge deck panel[J]. *Journal of Engineering and Applied Science*, 2022, 69(1): Article No.30
- [78] Zhu L, Li N, Childs P R N. Light-weighting in aerospace component and system design[J]. *Propulsion and Power Research*, 2018, 7(2): 103-119
- [79] Tancogne-Dejean T, Diamantopoulou M, Gorji M B, *et al.* 3D plate-lattices: an emerging class of low-density metamaterial exhibiting optimal isotropic stiffness[J]. *Advanced Materials*, 2018, 30(45): Article No.1803334
- [80] Liu P Q, Sun B T, Liu J K, *et al.* Parametric shell lattice with tailored mechanical properties[J]. *Additive Manufacturing*, 2022, 60: Article No.103258
- [81] Sun B T, Yan X, Liu P Q, *et al.* Parametric plate lattices: modeling and optimization of plate lattices with superior mechanical properties[J]. *Additive Manufacturing*, 2023, 72: Article No.103626
- [82] Aurenhammer F. Voronoi diagrams—a survey of a fundamental geometric data structure[J]. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 1991, 23(3): 345-405
- [83] Podestá J M, Mendéz C G, Toro S, *et al.* Material design of elastic structures using Voronoi cells[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2018, 115(3): 269-292
- [84] Stanković T, Shea K. Investigation of a Voronoi diagram representation for the computational design of additively manufactured discrete lattice structures[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2020, 142(11): Article No.111704
- [85] Zheng X Y, Zhang X B, Chen T T, *et al.* Deep learning in mechanical metamaterials: from prediction and generation to inverse design[J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(45): Article No.2302530
- [86] Bolshakov P, Kharin N, Agathonov A, *et al.* Extension of the Voronoi diagram algorithm to orthotropic space for material structural design[J]. *Biomimetics*, 2024, 9(3): Article No.185
- [87] Mao Y W, He Q, Zhao X H. Designing complex architected materials with generative adversarial networks[J]. *Science Advances*, 2020, 6(17): Article No.eaaz4169
- [88] Zhu B, Skouras M, Chen D S, *et al.* Two-scale topology optimization with microstructures[J]. *ACM Transactions on Graphics*, 2017, 36(5): Article No.164
- [89] Jiang Z, Chen W, Burkhart C. Efficient 3D porous microstructure reconstruction via Gaussian random field and hybrid optimization[J]. *Journal of Microscopy*, 2013, 252(2): 135-148
- [90] Mao Y W, Yang Z J, Jha D, *et al.* Generative adversarial networks and mixture density networks-based inverse modeling for microstructural materials design[J]. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 2022, 11(4): 637-647
- [91] Wang L W, Chan Y C, Liu Z, *et al.* Data-driven metamaterial design with Laplace-Beltrami spectrum as “shape-DNA”[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020, 61(6): 2613-2628
- [92] Xia L, Breitkopf P. Design of materials using topology optimization and energy-based homogenization approach in Matlab[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2015, 52(6): 1229-1241
- [93] Chen D S, Skouras M, Zhu B, *et al.* Computational discovery of extremal microstructure families[J]. *Science Advances*, 2018, 4(1): Article No.eaao7005

- [94] Andreassen E, Lazarov B S, Sigmund O. Design of manufacturable 3D extremal elastic microstructure[J]. *Mechanics of Materials*, 2014, 69(1): 1-10
- [95] Zhang D, Zhai X Y, Liu L G, *et al.* An optimized, easy-to-use, open-source GPU solver for large-scale inverse homogenization problems[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2023, 66(9): Article No.207
- [96] Yang Y Y, Wang L L, Zhai X Y, *et al.* Guided diffusion for fast inverse design of density-based mechanical metamaterials[OL]. [2024-06-05]. <https://arxiv.org/abs/2401.13570>
- [97] Wang L W, Tao S Y, Zhu P, *et al.* Data-driven topology optimization with multiclass microstructures using latent variable Gaussian process[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2021, 143(3): Article No.031708
- [98] An S S, Fowler C, Zheng B W, *et al.* A deep learning approach for objective-driven all-dielectric metasurface design[J]. *ACS Photonics*, 2019, 6(12): 3196-3207
- [99] Inampudi S, Mosallaei H. Neural network based design of metagratings[J]. *Applied Physics Letters*, 2018, 112(24): Article No.241102
- [100] Bishop C M. *Pattern recognition and machine learning*[M]. New York: Springer, 2006: 645-678
- [101] Chan Y C, Da D C, Wang L W, *et al.* Remixing functionally graded structures: data-driven topology optimization with multiclass shape blending[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2022, 65(5): Article No.135
- [102] Wang L W, Chan Y C, Ahmed F, *et al.* Deep generative modeling for mechanistic-based learning and design of metamaterial systems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 372: Article No.113377
- [103] Zhang C H, Ridard A, Kibsey M, *et al.* Variant design generation and machine learning aided deformation prediction for auxetic metamaterials[J]. *Mechanics of Materials*, 2023, 181: Article No.104642
- [104] Chen C T, Gu G X. Generative deep neural networks for inverse materials design using backpropagation and active learning[J]. *Advanced Science*, 2020, 7(5): Article No.1902607
- [105] Wang Z H, Xian W K, Baccouche M R, *et al.* Design of phononic bandgap metamaterials based on Gaussian mixture beta variational autoencoder and iterative model updating[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2022, 144(4): Article No.041705
- [106] Chan Y C, Ahmed F, Wang L W, *et al.* METASET: an automated data selection method for scalable data-driven design of metamaterials[C] // *Proceedings of the International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*. New York: ASME, 2020: Article No.V11AT11A021
- [107] Lee D, Chan Y C, Chen W, *et al.* t-METASET: task-aware generation of metamaterial datasets by diversity-based active learning[C] // *Proceedings of the International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*. New York: ASME, 2022: Article No.V03AT03A011
- [108] Peng H, Liu A, Huang J C, *et al.* PH-net: parallelepiped microstructure homogenization via 3D convolutional neural networks[J]. *Additive Manufacturing*, 2022, 60: Article No.103237
- [109] Jia Yuxiang, Wang Jiafu, Chen Wei, *et al.* Research progress on rapid optimization design methods of metamaterials based on intelligent algorithms[J]. *Journal of Radars*, 2021, 10(2): 220-239(in Chinese)
(贾宇翔, 王甲富, 陈维, 等. 基于智能算法的超材料快速优化设计方法研究进展[J]. *雷达学报*, 2021, 10(2): 220-239)
- [110] Lan G Q, Wang Y, Ou J Y. Optimization of metamaterials and metamaterial-microcavity based on deep neural networks[J]. *Nanoscale Advances*, 2022, 4(23): 5137-5143
- [111] Lee D, Chen W, Wang L W, *et al.* Data - driven design for metamaterials and multiscale systems: a review[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(8): Article No.2305254
- [112] Mohsenizadeh M, Gasbarri F, Munther M, *et al.* Additively-manufactured lightweight metamaterials for energy absorption[J]. *Materials & Design*, 2018, 139: 521-530.
- [113] Zheng X Y, Chen T T, Guo X F, *et al.* Controllable inverse design of auxetic metamaterials using deep learning[J]. *Materials & Design*, 2021, 211: Article No.110178
- [114] Gurbuz C, Kronowetter F, Dietz C, *et al.* Generative adversarial networks for the design of acoustic metamaterials[J]. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2021, 149(2): 1162-1174
- [115] Ma W, Cheng F, Xu Y H, *et al.* Probabilistic representation and inverse design of metamaterials based on a deep generative model with semi-supervised learning strategy[J]. *Advanced Materials*, 2019, 31(35): Article No.1901111
- [116] Wang Y Z, Zeng Q L, Wang J Z, *et al.* Inverse design of shell-based mechanical metamaterial with customized loading curves based on machine learning and genetic algorithm[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 401: Article No.115571
- [117] Dong J Q, Qin Q H, Xiao Y. Nelder-Mead optimization of elastic metamaterials via machine-learning-aided surrogate modeling[J]. *International Journal of Applied Mechanics*, 2020, 12(1): Article No.2050011
- [118] Ha C S, Yao D S, Xu Z P, *et al.* Rapid inverse design of metamaterials based on prescribed mechanical behavior through machine learning[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): Article No.5765
- [119] Wang M H, Sun S, Zhang T Y. Machine learning accelerated design of auxetic structures[J]. *Materials & Design*, 2023, 234: Article No.112334
- [120] Tian J, Tang K K, Chen X Y, *et al.* Machine learning-based prediction and inverse design of 2D metamaterial structures with tunable deformation-dependent Poisson's ratio[J]. *Nanoscale*, 2022, 14(35): 12677-12691
- [121] Jiang X H, Liu F, Wang L F. Machine learning-based stiffness optimization of digital composite metamaterials with desired positive or negative Poisson's ratio[J]. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2023, 13(6): Article No.100485
- [122] Chang Y F, Wang H, Dong Q X. Machine learning-based inverse design of auxetic metamaterial with zero Poisson's ratio[J]. *Materials Today Communications*, 2022, 30: Article No.103186
- [123] Pahlavani H, Amani M, Saldivar M C, *et al.* Deep learning for the rare-event rational design of 3D printed multi-material mechanical metamaterials[J]. *Communications Materials*, 2022, 3(1): Article No.46

- [124] Wu L L, Liu L, Wang Y, *et al.* A machine learning-based method to design modular metamaterials[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2020, 36: Article No.100657
- [125] Zhang K, Guo Y Y, Liu X B, *et al.* Deep learning-based inverse design of lattice metamaterials for tuning bandgap[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2024, 69: Article No.102165
- [126] Qiu Y S, Ye H F, Zhang H W, *et al.* Machine learning-driven optimization design of hydrogel-based negative hydration expansion metamaterials[J]. *Computer-Aided Design*, 2024, 166: Article No.103631
- [127] Oddiraju M, Behjat A, Nouh M, *et al.* Efficient inverse design of 2D elastic metamaterial systems using invertible neural networks[C] //Proceedings of the AIAA AVIATION Forum. San Diego: AIAA, 2021: Article No.3065
- [128] Garland A P, White B C, Jensen S C, *et al.* Pragmatic generative optimization of novel structural lattice metamaterials with machine learning[J]. *Materials & Design*, 2021, 203: Article No.109632
- [129] Ma C P, Chang Y L, Wu S, *et al.* Deep learning-accelerated designs of tunable magneto-mechanical metamaterials[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, 14(29): 33892-33902
- [130] Challapalli A, Patel D, Li G Q. Inverse machine learning framework for optimizing lightweight metamaterials[J]. *Materials & Design*, 2021, 208: Article No.109937
- [131] Moon G, Choi J R, Lee C, *et al.* Machine learning-based design of meta-plasmonic biosensors with negative index metamaterials[J]. *Biosensors and Bioelectronics*, 2020, 164: Article No.112335
- [132] Wang W D, Cheney W, Amirkhizi A V. Generative design of graded metamaterial arrays for dynamic response modulation[J]. *Materials & Design*, 2024, 237: Article No.112550
- [133] Zheng L, Karapiperis K, Kumar S, *et al.* Unifying the design space and optimizing linear and nonlinear truss metamaterials by generative modeling[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): Article No.7563
- [134] Guo K, Buehler M J. A semi-supervised approach to architected materials design using graph neural networks[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2020, 41: Article No.101029
- [135] Shah T, Zhuo L W, Lai P, *et al.* Reinforcement learning applied to metamaterial design[J]. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2021, 150(1): 321-338
- [136] Brown N K, Garland A P, Fadel G M, *et al.* Deep reinforcement learning for the rapid on-demand design of mechanical metamaterials with targeted nonlinear deformation responses[J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2023, 126: Article No.106998
- [137] Brown N K, Deshpande A, Garland A, *et al.* Deep reinforcement learning for the design of mechanical metamaterials with tunable deformation and hysteretic characteristics[J]. *Materials & Design*, 2023, 235: Article No.112428
- [138] Rosafalco L, De Ponti J M, Iorio L, *et al.* Reinforcement learning optimisation for graded metamaterial design using a physical-based constraint on the state representation and action space[J]. *Scientific Reports*, 2023, 13(1): Article No.21836
- [139] Oliva S B, Bölle F T, Las A T, *et al.* Reinforcement learning-based design of shape-changing metamaterials[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2023, 11(39): 21036-21045
- [140] Han S H, Han Q, Ma N F, *et al.* Design and reinforcement-learning optimization of re-entrant cellular metamaterials[J]. *Thin-Walled Structures*, 2023, 191: Article No.111071
- [141] Deng B L, Zareei A, Ding X X, *et al.* Inverse design of mechanical metamaterials with target nonlinear response via a neural accelerated evolution strategy[J]. *Advanced Materials*, 2022, 34(41): Article No.2206238
- [142] Kollmann H T, Abueidda D W, Koric S, *et al.* Deep learning for topology optimization of 2D metamaterials[J]. *Materials & Design*, 2020, 196: Article No.109098
- [143] Chen W, Gao Y, Li Y Y, *et al.* Broadband solar metamaterial absorbers empowered by transformer-based deep learning[J]. *Advanced Science*, 2023, 10(13): Article No.2206718
- [144] Bastek J H, Kochmann D M. Inverse design of nonlinear mechanical metamaterials via video denoising diffusion models[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2023, 5(12): 1466-1475
- [145] Kadic M, Milton G W, van Hecke M, *et al.* 3D metamaterials[J]. *Nature Reviews Physics*, 2019, 1(3): 198-210
- [146] Álvarez-Trejo A, Cuan-Urquizo E, Roman-Flores A, *et al.* Bézier-based metamaterials: synthesis, mechanics and additive manufacturing[J]. *Materials & Design*, 2021, 199: Article No.109412
- [147] Si H. TetGen, a delaunay-based quality tetrahedral mesh generator[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 2015, 41(2): Article No.11
- [148] Liu Z Y, Su J P, Liu H, *et al.* Error-bounded edge-based remeshing of high-order tetrahedral meshes[J]. *Computer-Aided Design*, 2021, 139: Article No.103080
- [149] Beck J, Tamellini L, Tempone R. IGA-based multi-index stochastic collocation for random PDEs on arbitrary domains[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 351: 330-350
- [150] Hughes T J R, Cottrell J A, Bazilevs Y. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2005, 194(39-41): 4135-4195
- [151] Nguyen V P, Anitescu C, Bordas S P A, *et al.* Isogeometric analysis: an overview and computer implementation aspects[J]. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2015, 117: 89-116
- [152] Aage N, Andreassen E, Lazarov B S, *et al.* Giga-voxel computational morphogenesis for structural design[J]. *Nature*, 2017, 550(7674): 84-86
- [153] Challis V J, Roberts A P, Grotowski J F. High resolution topology optimization using graphics processing units (GPUs)[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2014, 49(2): 315-325
- [154] Wu J, Dick C, Westermann R. A system for high-resolution topology optimization[J]. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 2016, 22(3): 1195-1208
- [155] Stainko R. An adaptive multilevel approach to the minimal compliance problem in topology optimization[J]. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 2006, 22(2): 109-118