arXiv:2305.00003v2 [cs.CE] 3 May 2023

神经网络加速的多晶微观组织工艺设计

Junrong Lin[a], Mahmudul Hasan[b], Pınar Acar[b], Jose Blanchet[c], Vahid Tarokh[a]

[a]杜克大学电气与计算机工程系，美国北卡罗来纳州达勒姆，邮编*27708*[b]弗吉尼亚理工大学机械工程系，美国弗吉尼亚州布莱克斯堡，邮编*24060*[c]斯坦福大学管理科学与工程系，美国加利福尼亚州，邮编*94305*

摘要

计算实验被用于寻找设计良好的加工路径，以优化材料结构并获得期望的性能。这需要通过多尺度方法，理解加工-（微观）结构-性能关联之间的相互作用，该方法将宏观尺度（工艺参数）与介观尺度（均匀化性质）和微观尺度（晶体学织构）联系起来。由于该问题采用多尺度建模，因此随着决策树不断加深，可选的加工路径可能呈指数级增长，而传统模拟器的运行速度也会达到计算阈值。为了减轻在给定加载条件下预测微观结构演化所需的计算负担，我们开发了一种融入物理学约束的神经网络（NN）方法。该神经网络旨在学习每个基本工序下微观结构的演化。我们的方法能够有效且稳健地找到最优加工路径。在本研究中，我们将基于神经网络的方法用于最大化铜微观结构的均质化刚度。研究发现，与传统有限元模拟器相比，在一个包含 10 道工序的实验中，该方法的速度提高了 686 倍，所得均质化刚度的误差为 0.053%。

提交至 *Computational Materials Science* 的预印本 *2023*年*5*月*4*日

1. 引言

随着集成计算材料工程（ICME）范式的引入，针对工艺-结构-性能关系的研究日益普遍。该范式旨在解决复杂的多尺度材料设计问题 [1], 。受 ICME 引入后近期进展的推动，计算材料科学和工艺工程的多个方面均取得了显著进步。例如，研究人员开发了面向 ICME 的新方法，以降低加工新材料所涉及的成本和风险 [2, 3]。计算实验被用于消除传统的试错方法，从而建立材料特征与性能之间的联系。研究工艺-（微观）结构-性能关联，需要采用一种多尺度方法，将宏观尺度（工艺参数）与介观尺度（均匀化性质）和微观尺度（晶体学织构）联系起来。基于物理的材料多尺度建模为实现性能更优材料的最佳设计提供了机会。然而，其高昂的计算成本阻碍了这些多尺度方法在实际材料设计中被工业界广泛采用 [4]。尽管如此，相较于结构-性能问题，工艺-结构问题受到的研究较少，因为工艺-结构问题背后的物理机制通常更为复杂。机器学习工具展现出弥合这一差距的潜力，可通过构建低成本的工艺-结构-性能代理模型来取代计算成本高昂的基于物理的模型 [5]。

多晶微观结构的控制在材料设计、加工和质量控制中至关重要，因为取向相关的材料性能

（例如刚度）可能会随着变形过程中底层微观结构的演变而改变。因此，确定能够制备出具有所需织构和性能材料的最佳加工路线，在材料研究中发挥着重要作用。传统上，人们通常通过反复试验来探索特定织构对应的最佳加工路线，因此过程可能既繁琐又昂贵。为此，人们开发了计算方法，以取代这些实验，从而加快具有所需织构的微观结构设计。快速、准确地预测加工过程中的织构演化，有助于推动当前多晶材料材料设计与制造工作的衔接。

目前，该领域的研究分别聚焦于工艺-结构 [6, 7, 8, 9, 10, 11]关系或结构-性能 [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18] 关系。例如，Sarkar等人 [6]为 ZrO_2增韧 Al_2O_2陶瓷建立了代理模型，根据烧结热处理的工艺参数预测烧结密度和晶粒尺寸。另一项研究中，Tapia等人 [8] 为NiTi形状记忆合金的热处理过程建立了基于高斯过程回归的代理模型。模型输入参数包括热处理温度及其持续时间、初始镍成分，输出则是热处理后的最终镍成分。随后，Acar和Sundararaghavan [12]开发了一种基于线性求解器的多尺度方法，利用降阶建模设计目标微观结构，以优化均匀化材料属性。为学习能够充分表征多晶材料晶体学织构的降阶基函数，Achargee等人 [13]和Ganapathysubramanian等人 [14] 在罗德里格斯取向空间 [19] 中采用适当正交分解（POD）和快照法，创建了一种连续体灵敏度优化技术，用于计算对微观结构敏感的材料属性。

Kalidindi等人 [15]同样设计了中心带有圆孔的薄板微观结构，以最大限度提高薄板的单轴承载能力，同时避免发生塑性变形。文献中还有少量研究探讨了增材制造材料的工艺-结构和结构-性能关系 [20, 21, 22]。最近，Dornheim等人 [23] 开发了一种无模型深度强化学习算法，用于优化目标微观结构的加工路径（最多包含100种组合）。该算法无需预先采集样本，而是可以在优化过程中与加工仿真相连接。他们还将该方法扩展至多目标优化问题。另一项研究中，Honarmandi等人 [24] 提出了一种基于批量贝叶斯优化的新型框架，用于求解逆问题，即利用微观结构数据确定材料加工规范。他们结合低保真度和高保真度相场模型，开发了基于高斯过程回归的代理模型，以替代计算成本高昂的过程模型，并将其集成到逆向设计优化中。

近期研究 [11, 25] 使用一种称为取向分布函数（ODF）的概率表示方法，对多晶材料的织构演化进行建模。该函数描述了微观结构中不同取向晶体的体积密度。预测施加特定变形过程（例如，沿特定方向施加剪切力 1 秒）后微观组织织构的变化，需要求解ODF守恒方程，这是一种微分方程 [25, 26]。传统的基于物理的方法采用有限元法对守恒方程进行求解

数值求解 [26]。加工过程中取向分布函数的变化也会影响微观结构的均匀化（介观尺度）力学性能。在大规模搜索任务中，寻找具有所需取向相关性能的微观结构面临着重大挑战。在此背景下，我们希望通过依次施加不同的变形过程，优化某些均匀化力学性能。最优加工路径可能

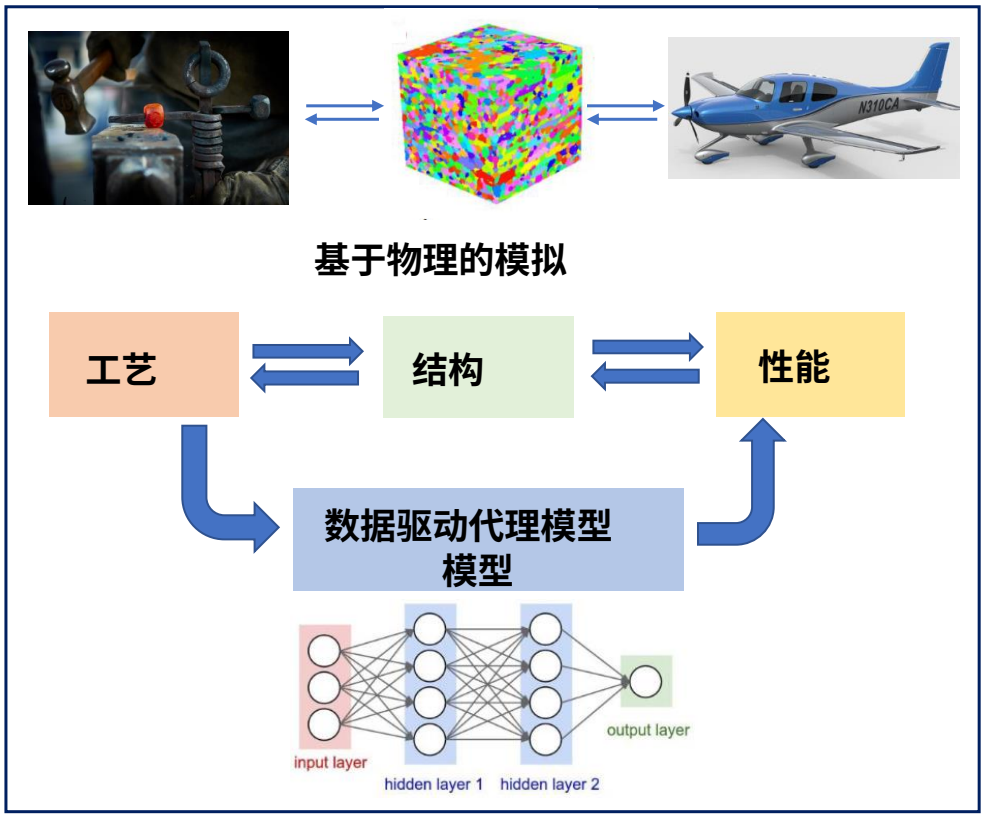


图 1：本研究贡献示意图。针对加工-结构-性能问题，开发数据驱动代理模型，以替代基于物理的模拟器。

通过与微观结构演化过程模拟器相结合的搜索算法找到。然而，在实践中，即使是一个简单的任务（例如，给定任意初始织构以及 5 种不同的变形过程及其组合，找出按顺序应用 10 个过程的精确最优路径），使用传统的基于物理的模拟器求解也可能耗时很长，这是因为模拟耗时，而且可能的加工路径数量呈指数增长。并发多过程建模会进一步增加材料设计的计算复杂度。面对这些任务时，模拟速度便成为瓶颈。因此，本研究开发了一种监督学习方法，并结合局部搜索算法，以探索并建立多晶材料的过程-微观结构-性能关系。

在数据充足的时代，神经网络已被证明是一种革命性的函数逼近器，并已应用于文献中 [27, 28, 29, 30, 31] 研究加工-结构-性能关联，以构建低成本代理模型。受物理信息神经网络（PINN） [32], 的启发，我们将开发一种基于小规模数据集训练的代理神经网络，用于在这项工艺设计任务中取代基于物理的模拟器。本研究的总体贡献总结于图1。预训练神经网络的高速推理特性能够加速算法，从而实现大规模搜索。与有限元（FE）模拟器相比，该方法速度更快，但预测精度略有损失。本文结构安排如下：第2节和第3节分别讨论变形加工和多晶微观结构建模的数学表述。第4节和第5节分别介绍加工-微观结构关系的基于物理的建模和数据驱动建模。

第6节报告了用于提升力学性能的工艺设计神经网络代理模型的表现。最后，第7节对本文进行总结，并讨论未来可能的研究工作。

2. 基于取向分布函数方法的变形过程数学建模

多晶材料由多个具有不同晶体学取向的晶体组成，这些取向决定了微观组织织构，可用取向分布函数（ODF）进行数学描述。在变形过程中，多晶微观组织的织构会在外加载荷作用下发生变化。与计算成本高昂的有限元求解器相比，采用取向分布函数方法对变形过程进行建模，计算效率更高。取向分布函数记为 $A(\mathbf{r}, t)$，表示取向空间中晶体的体积密度；$\mathbf{r}$ 表示某一时刻 t。取向分布函数通过有限元技术在罗德里格斯取向空间中离散化。基于多晶系统的晶体学对称性，可从初始罗德里格斯取向空间中得到一个缩减区域，称为基本区域 Ω。罗德里格斯角轴参数化方法用于描述不同的晶体学取向。与欧拉角表示 [33, 34], 不同，该方法采用轴角表示来表达晶体取向。罗德里格斯参数化通过对旋转轴$\mathbf{n}$进行缩放来描述，即$\mathbf{r} = \mathbf{n}tan(\frac{\theta}{2})$, 其中$\theta$ 为晶体旋转角。关于微观组织解空间的罗德里格斯参数化，感兴趣的读者可参阅文献 [11, 26]。

取向分布函数 A（$\mathbf{r}$，t）可用于计算均匀化弹性刚度 $< C >$

通过对基本区域进行体积积分， Ω:

$$< C >= \int_{\Omega} C(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}, t)\, dV \tag{1}$$

其中， $C(\mathbf{r})$ 包含计算 $< C >$ 所示均匀化弹性刚度值所需的单晶材料性质。通过控制取向分布函数值，可以获得所需的均匀化（介观尺度）属性，如公式（1）所述。然而，取向分布函数（$A(\mathbf{r},\ t) \geq 0$）必须满足体积归一化约束，具体表示如下:

$$\int_{\Omega} A(\mathbf{r}, t)\, dV = 1 \tag{2}$$

微观结构的均匀化（介观尺度、体积平均）性质通过公式（1）中的表达式计算得出。此处，通过考虑晶格旋转$\mathbf{R}$，在基本区域上对均匀化性质进行积分。给定罗德里格斯取向参数$\mathbf{r}$，可通过以下表达式求得旋转$\mathbf{R}$:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{1 + \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}} (I(1 - \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) + 2(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} + I \times \mathbf{r})) \tag{3}$$

微观结构取向空间的有限元离散如图 2 所示。这里，有限元网格中的每个独立节点都代表与相应晶体学取向关联的唯一取向分布函数值。对于包含 N 个独立节点的有限元离散，且每个单元有 N_{elem} 个积分点（N_{int}），在给定时刻，公式（1）可近似表示如下:

t:

$$
\begin{aligned}
< C > &= \int_{\Omega} C(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}, t)\, dV \\
&= \sum_{n=1}^{N_{elem}} \sum_{m=1}^{N_{int}} C(\mathbf{r_m}) A(r_m) \omega_m |J_n| \frac{1}{(1 + r_m . r_m)^2}
\end{aligned}
\tag{4}
$$

其中， A（r_m）是 n^{th} 单元中全局坐标为 r_m（取向向量）的 m^{th} 积分点处的取向分布函数值。 $|J_n|$ 是 n^{th} 单元的雅可比行列式， ω_m 是 m^{th} 积分点的积分权重。

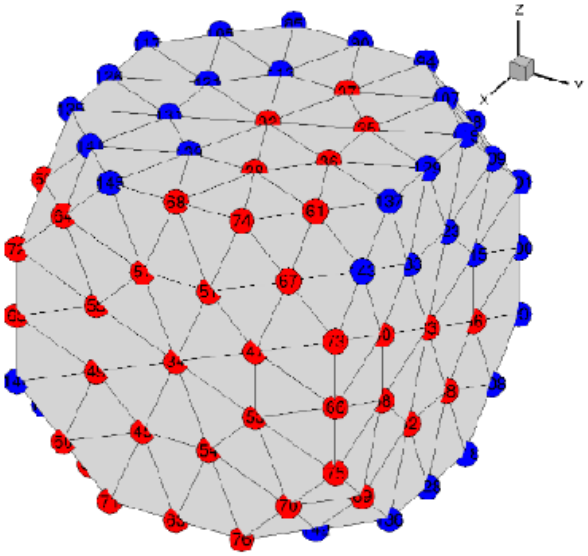


图 2：面心立方（FCC）微观结构取向空间的有限元离散。红色节点表示独立的取向分布函数值，蓝色节点则表示受晶体对称性影响的相关取向分布函数。

考虑到晶体学对称性，公式（4）中的均匀化性质也可以用以下线性形式近似表示： $< C > = P^T \mathbf{A}$，其中P 是性质矩阵，由单晶材料性质与取向空间的有限元离散相乘得到

，而**A** 是有限元网格独立节点的取向分布函数值列向量（本研究使用 76 个独立节点来模拟面心立方微观结构）（见图 2）。此外，取向分布函数应满足归一化约束（见公式 2）。从数学上看，归一化约束等价于：微观结构中所有可能晶体学取向出现的概率之和必须为一。

在变形过程中，晶粒重新取向会导致取向分布函数发生变化。它从初始取向分布函数（t=0）演化为最终变形后的取向分布函数（t=t）。取向分布函数值的演化由取向分布函数守恒方程支配，该方程满足式（2）的体积归一化约束。式（5）给出了晶体学取向空间中守恒方程的欧拉速率形式，其中梯度算子为 [25]:

$$\frac{\partial A(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla A(\mathbf{r},t)\cdot v(\mathbf{r},t) + A(\mathbf{r},t)\nabla\cdot v(\mathbf{r},t) = 0 \tag{5}$$

其中， $v(\mathbf{r}, t)$为重新取向速度。

织构演化可通过微观结构本构模型，根据速度梯度（**L**）定义计算（见下文式（6））；该定义通过泰勒宏观—微观连接假设与 $v(\mathbf{r}, t)$相关联。泰勒假设认为，晶体速度梯度等于宏观速度梯度 [25]。为计算重新取向速度，采用率无关本构模型。利用本构模型和罗德里格斯取向空间的有限元表示，求解由 $A(\mathbf{r}, 0)$（初始织构）演化而来的 $A(\mathbf{r}, t)$（当前织构）。

每种变形过程（如拉伸/压缩和剪切）在施加载荷一段时间后，都会产生相应的取向

分布函数（ODF）作为输出。将特定过程的宏观速度梯度**L**作为输入提供给晶体塑性求解器，以研究该过程中的取向分布函数演化。在设计加工序列以获得所需织构时，将描述加工路线（加工类型和顺序以及应变率）的宏观速度梯度作为设计变量求解。取向为**r**的晶体的速度梯度可表示为

$$\mathbf{L} = S + \mathbf{R}\sum_{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha}\bar{\mathbf{T}}^{\alpha}\mathbf{R}^{T}, \tag{6}$$

其中， S 表示晶格自旋，R表示晶格旋转， $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 和 $\bar{\mathrm{T}}^{\alpha}$分别表示滑移系 α的剪切速率和施密德张量。这里，晶体速度梯度定义为变形梯度随时间的变化率。方程（6）表明，速度梯度可分解为两个分量。第一个分量——晶格自旋 S——与弹性变形梯度相关；这里假设变形梯度（F）分解为弹性部分（F^{e}）和塑性部分（F^{p}），即：$\mathrm{F} = \mathrm{F}^{e}\mathrm{F}^{p}$。具体而言，晶格自旋等于$\mathrm{R}^{e}$ R^{e}，其中R^{e} 通过对弹性变形梯度进行极分解求得：$\mathrm{F}^{e} = \mathrm{R}^{e}\mathrm{U}^{e}$，其中$\mathrm{U}^{e}$是极分解 [35]的酉矩阵。方程（6）中的第二个分量表示旋转后的塑性速度梯度（$\mathrm{RL}^{p}\mathrm{R}^{T}$）。这里，$\mathrm{L}^{p}$ 表示塑性速度梯度，与滑移系的组合剪切有关，其表达式为 $\sum_{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha}\bar{\mathrm{T}}^{\alpha}$。

不同变形过程对应的式（6）中的宏观速度梯度表达式也可以写成式（7）所示的矩阵形式。为简洁起见，这里省略从式（6）推导至式（7）的详细过程；该表达式可以

见参考文献 [25]。

$$\mathbf{L} = \alpha_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 0 \\ 0 & 0 & -0.5 \end{bmatrix} + \alpha_2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \alpha_3 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \alpha_4 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \alpha_5 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

式（7）中的每个矩阵都定义了一种变形过程，例如拉伸/压缩（α_1）、平面应变压缩（α_2）和剪切模式（α_3、 α_4、 α_5）。

我们以下述自回归模式定义一个包含n 个步骤的加工路径，每一步的变形持续时间固定为Δt。 $\phi_{F_i}(A)$ 表示对由取向分布函数 ODF 描述的多晶微观结构 $A(r, i\Delta t)$，在时刻$i\Delta t$施加持续 Δt 的载荷为 F_i 的变形过程（例如，在有限元模拟中通过速度梯度$\mathbf{L}$定义的拉伸/压缩和剪切模式）：

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r}, \Delta t) &= \phi_{F_0}(A(\mathbf{r}, 0)) \\ A(\mathbf{r}, 2\Delta t) &= \phi_{F_1}(A(\mathbf{r}, \Delta t)) \\ &\vdots \\ A(\mathbf{r}, n\Delta t) &= \phi_{F_{n-1}}(A(\mathbf{r}, (n-1)\Delta t)) \end{aligned} \quad (8)$$

其中， $F_i \in \mathrm{F}$ 从预先指定的集合 $\mathrm{F} := \{ f_1、 \ldots\ldots、 f_k\}$ 中选取（例如，可在每一步施加的一组剪切力 $\{xy、 xz、 yz\}$）。对于初始取向分布函数 $P^*\mathbf{r}, 0)$，最优加工路径 A 是一系列变形过程，可在时间 $n\Delta t$ 达到最佳取向分布函数集合 $A^*\mathbf{r}, n\Delta t$。 $A\mathbf{r}, n\Delta t$ 由所需的取向相关性能进行评估，该性能是一个积分

取A 与单晶材料性质矩阵（权重函数） $C\mathbf{r}$在基本区域 Ω 上的积分（如公式（1）所示）。

$$\begin{aligned} \max_{A} F = \sum_{i}^{6} \omega_{ii} < C_{ii} > + \sum_{i<j}^{6} \omega_{ij} < C_{ij} > \\ \text{subject to} \int_{\Omega} A(\mathbf{r}, i\Delta t) dV = 1 \\ A(\mathbf{r}, i\Delta t) \geq 0 \end{aligned} \tag{9}$$

其中，复合目标函数（F）包含对各向异性均匀化弹性刚度矩阵（$< C_{ii} >, <C_{ij} >$）中常数项的求和，这些常数是使用公式（1）所给的公式计算得出的。在此问题中，假设均匀化刚度矩阵（$< C_{ii} >$）的对角项更为重要，因此乘以权重因子 $\omega_{ii} = 1$；而交叉对角项（$< C_{ij} >$）则乘以权重因子$\omega_{ij} = \frac{1}{2}$。请注意，对称项（$< C_{ij} >$和 $< C_{ji} >$）在求和公式中仅计入一次（通过目标函数第二项中的 $i < j$ 条件）。这一复合目标函数的基本思路是改善微观结构在不同方向上的均匀化弹性刚度，而非仅提高某一特定方向上的刚度。

为解决这一任务，我们需要：1）一个高效的变形模拟器 $\phi_F(A)$；2）一种路径搜索算法。针对这类局部搜索问题，已有许多相关研究。这些算法通过依次在局部作出决策来优化目标函数，模拟退火是其中一种广为人知的方法。在本研究中，我们重点探讨一种利用神经网络构建 $\phi_F(A)$ 的新方法。作为函数逼近器，神经网络能够从数据中准确学习不同变形的行为，并快速进行预测，从而加速工艺设计。选择这种方法是为了应对这一挑战

该挑战源于加工设计问题在数值计算上的难处理性，以及传统模拟器的速度瓶颈。

3. 使用神经网络进行端到端变形预测

我们的目标是开发一种高效的神经网络，以替代有限元预测器来计算变形结果。在这种数据驱动方法中，我们不再着重求解第 2 节中提出的守恒方程，而是利用一些物理约束来构建代理神经网络。该神经网络旨在近似变形过程 ϕ_F:

$$A(\mathbf{r}, \Delta t) = \phi_F(A(\mathbf{r}, 0)), \quad \mathbf{r} \in \Omega \tag{10}$$

其中， $A(\mathbf{r}, 0)$ 表示变形前的取向分布函数， $A(\mathbf{r}, \Delta t)$ 表示施加持续时间为 Δt 的变形 F 后的取向分布函数。

我们将 $NN_F(A; \theta)$ 定义为具有 θ 个参数的代理神经网络模型。在这项工作中，我们采用多层感知机 (MLP) 来近似 $\phi_F(A)$。对于具有 L 个隐藏层的多层感知机，有:

$$\begin{aligned} a^{(0)} &= x \\ z^{(i+1)} &= M^{(i)} a^{(i)} + b^{(i)} \\ a^{(i+1)} &= \varphi^{(i+1)}(a^{(i)}) = \xi^{(i+1)}(z^{(i+1)}) \\ NN_F &= \varphi^{(L)} \circ \cdots \circ \varphi^{(1)} \end{aligned} \tag{11}$$

其中，x 是模型输入， ξ^{i+1} 表示第i层的激活函数。考虑到 ODF 表示取向空间的概率密度，因此必须满足取向分布函数非负性和体积归一化约束。采用 ReLU 后接归一化层，该层将每个通道除以一个

材料特定的体积分数常数与前一层输出之间的加权和，以确保网络输出在物理上可行。

通过最小化精确取向分布函数与网络预测结果之间的误差，可以学习模型参数。一种常见做法是使用平方误差来匹配二者。这里，我们引入特定的目标值权重，为不同的弹性刚度常数赋予不同的重要性。考虑到公式（1）中均匀化性质在离散基本区域上的积分可用加权和（公式（4））很好地近似，因此加权均方误差（WMSE）应是更合适的选择：

$$WMSE = \frac{1}{B} \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i \| y_i - y_i^* \|_2^2}{\sum_{i=1}^{n} w_i} \tag{12}$$

其中，y 和 y* 分别表示真实和预测的取向分布函数值，w_i 是用于计算所需目标材料性质的取向权重，B 是批量大小。

本节中，我们在刚度优化任务上评估我们的方法。与传统有限元方法相比，我们发现预测的取向分布函数和目标性质值之间的差异极小。此外，神经网络的预测速度比传统方法快数百倍，因此能够进行大规模搜索。

3.1. 模型设置

我们考虑一项刚度优化任务：通过应用 31 种不同的潜在变形加工模式，找出最佳织构演化路径（分别沿 xy、xz 和 yz 轴进行拉伸、压缩和剪切，以及这些模式的组合，但不包括未选择任何模式的情况）。基本区域是离散的，共有 76 种可能结果（面心立方微观结构由 76 个独立的取向分布函数值建模

）。每一步只能应用一种变形过程，每步持续 0.1 秒。演化路径由按顺序执行的 10 个子过程组成。我们选择弹性刚度作为要最大化的目标力学性能，研究材料为铜（Cu）。铜（Cu）采用以下单晶性能：$C_{11} = C_{22} = C_{33} = 168$吉帕、 $C_{12} = C_{21} = C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 121.4$ 吉帕和 $C_{44} = C_{55} = C_{66} = 75.4$ 吉帕 [25]。目标函数定义为均匀化弹性刚度常数（C）之和，采用复合函数定义：弹性刚度矩阵的对角项（C_{ii}）权重为 1，非对角项（$C_{ij}, i \neq j$）权重为 0.5。对称的非对角项（$C_{ij}, i \neq j$）只计算一次。大小为 5000 的合成数据集采用均匀初始化并进行归一化，以确保取向分布函数满足单位体积归一化约束（式（2））。每个初始取向分布函数对应的变形模式结果由有限元求解器生成。在接下来的实验中，随机选择数据点用于训练和测试。数据集也按 80%/20% 的训练测试比例随机划分。

3.2. 搜索算法和网络结构

由于组合优化问题的复杂性，即使使用快速神经网络，计算所有 31^{10} 结果也不切实际。因此，我们采用一种启发式算法，从根据各阶段预测值构建的多项分布中进行采样，以寻找最优工艺路径。

算法 1指数权重算法

要求： RESTART $= N$, STEPS $= M$, BASE $= \beta$

对于 $i = 1$ 至 N，**执行**

$A_0 = initial\ ODF$

对于 $j = 1$至 M，**执行**

通过神经网络模拟 31 种可能的结果

$A_1[1:31] \leftarrow NN_F(A_0)$

目标值差异 $\leftarrow W(A_1[1:31] - A_0)$

如果目标值差异 $\preceq 0$ **则**

中断

else

$weights \leftarrow$ SoftMax(目标值差异; β)

$k \leftarrow multinominal$(*weig*小时*ts*)

$PATH[i][j] \leftarrow k$

$A_0 \leftarrow A_1[k]$

返回找到的最佳解

该神经网络包含1个隐藏层，其中有760个神经元，使用双曲正切激活函数，最后一层除外。最后一层采用ReLU和归一化以满足物理约束。网络使用大小为128的小批量进行训练。网络训练使用带热重启的ADAM [36] 。搜索时，对每个初始织构以权重基数 $\beta = 5$ 重新启动1000次。

3.3. 网络性能和搜索样本

图3展示了加工过程中不同时间步下神经网络预测结果与有限元模拟器获得的织构对比。加载条件如下：图3（a）和（d）为 YZ

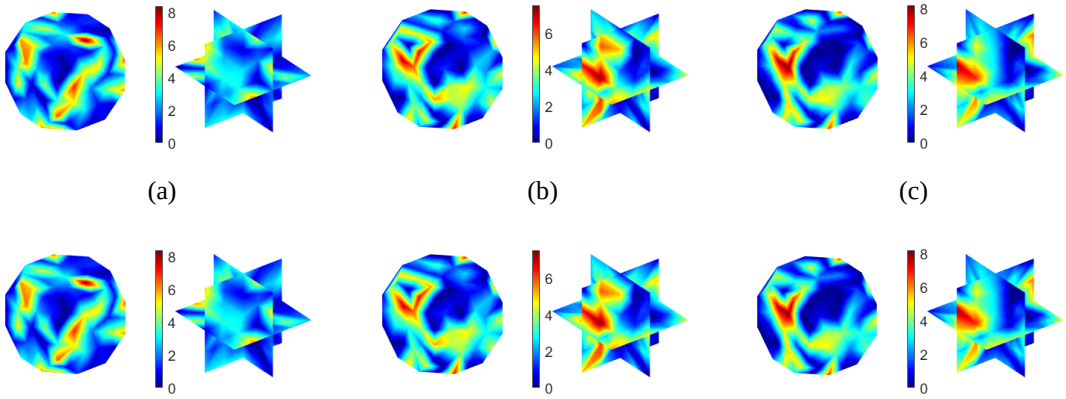


图3：神经网络模型（a、b 和 c）与有限元晶体塑性模型（d、e 和 f）在时间步 t=0.3 秒（a 和 d）、t=0.8 秒（b 和 e）以及 t=1秒（c 和 f）下预测的织构对比。

平面内的剪切力；图3（b）和（e）为 XZ 和 YZ 平面内拉伸、压缩和剪切的合力；图3（c）和（f）为 YZ 平面内拉伸、压缩和剪切的合力。图4和表1也显示了神经网络的性能，其中列出了不同变形模态下基本区域内独立取向分布函数的相对平均误差。

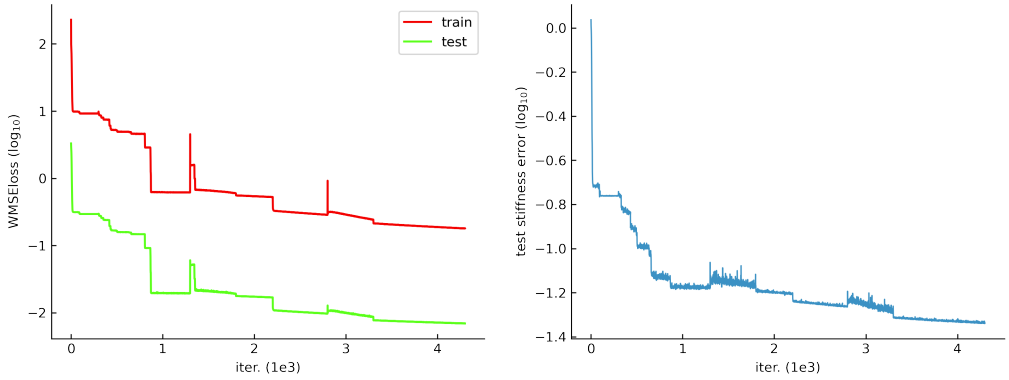


图4：合成数据集上的训练误差和测试误差（左）。31个模态的平均刚度误差（右）。

10000	01000	00100	00010	00001	11000	10100	10010
0.034% / 0.041	0.036% / 0.048	0.041% / 0.048	0.038% / 0.046	0.039% / 0.048	0.044% / 0.052	0.035% / 0.044	0.038% / 0.041
10001	01100	01010	01001	00110	00101	00011	11100
0.046% / 0.053	0.033% /0.044	0.044% /0.051	0.041% / 0.045	0.045% / 0.051	0.040% / 0.045	0.043% / 0.048	0.0314% / 0.043
11010	11001	10110	10101	10011	01110	01101	01011
0.043% /0.045	0.0476% / 0.049	0.0347% / 0.044	0.0323% / 0.043	0.037% / 0.047	0.033% / 0.043	0.033% / 0.042	0.041% /0.044
00111	11110	11101	11011	10111	01111	11111	
0.035% / 0.049	0.030% / 0.039	0.031% / 0.041	0.045% / 0.051	0.034% / 0.046	0.033% / 0.046	0.032% / 0.044	

表 1：神经网络预测结果与有限元模拟器在各变形模态下的平均相对 L2 误差/刚度误差。我们使用长度为 5 的二进制字符串表示不同的代理网络。每位数字代表一种变形加工模式（拉伸、压缩以及 xy、xz、yz 剪切）。若应用该模式，则记为 1；否则记为 0（例如，10010 表示该网络学习的是同时施加拉伸和 xz 剪切时的变形过程）。

神经网络根据任意一组初始取向分布函数值预测全部 31 种变形模态结果，计算耗时为 0.2213s；而传统有限元模拟器在采用 31 进程并行运行时，平均耗时为 152s。神经网络的预测速度快 686.85 倍。神经网络的预测是在 NVIDIA(R)

Tesla P100-16G 上生成的，使用单核 Intel(R) Xeon(R)@2.3Ghz；模拟器则运行于 AMD(R) EPYC C2D-highcpu-32@2.45 Ghz。经过 10 个进程后，基于物理的模型与神经网络的弹性刚度预测值平均相差 0.4663 吉帕。

基于神经网络的代理模型取代了基于物理的有限元

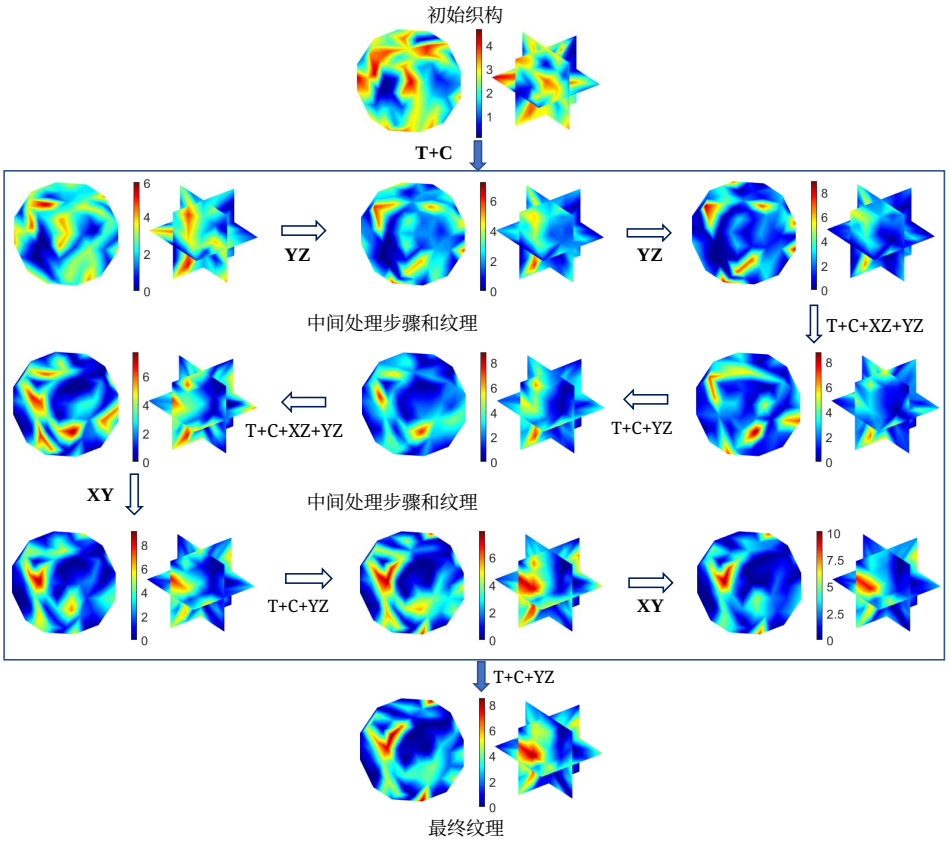


图 5：通过神经网络代理模型预测最优加工路径中的织构演化。该图展示了变形加工的不同步骤，从初始织构到使铜微观结构均匀化弹性刚度常数的目标函数达到最大值的最终最优织构。T 和 C 分别代表拉伸和压缩，XY、XZ 和 YZ 则代表相应的剪切过程。

单元模型用于寻找最优加工路径。前文已提到，建立了一个优化问题，目标是使铜的弹性刚度常数之和最大化。该优化问题的解给出了最大目标函数值及其对应的织构，也提出了一条获得最优织构的最优加工路线。我们

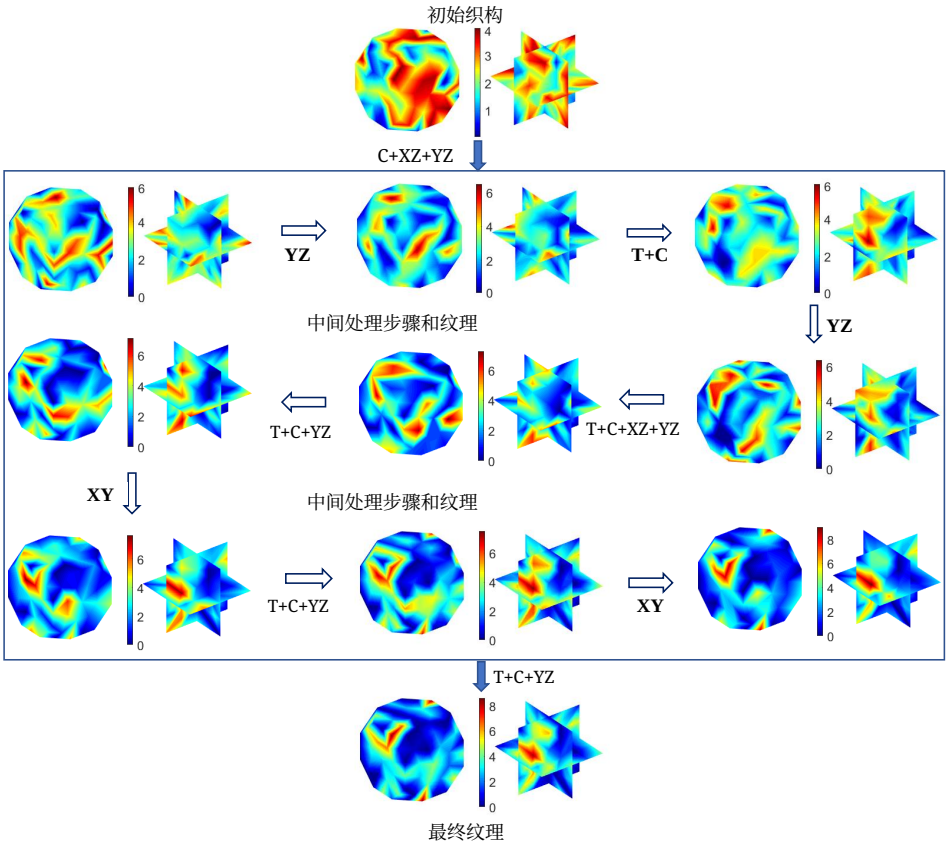


图6：基于物理的模拟器通过最优加工路径实现的织构演化。该图展示了变形加工的各个步骤，从初始织构到最终最优织构；后者使针对铜微观结构均匀化弹性刚度常数所定义的目标函数达到最大值。T 和 C 分别表示拉伸和压缩，XY、XZ 和 YZ 表示相应的剪切过程。

确定五种不同初始织构的加工路线。尽管最优解随初始织构而异，但所有情况下得到的目标函数值几乎相同。根据神经网络代理模型，铜的最大刚度常数之和的平均值为 885.2 吉帕，而基于有限元的工艺模型所得数值为 884.9 吉帕。

神经网络预测了最优加工路径，并给出了每一步之后的织构演化，以便从某一初始织构出发，在最后获得最优织构，如图5所示。类似地，图6展示了基于物理的模型针对另一种初始织构得到的最优加工路线及织构演化。这里，T 和 C 分别表示拉伸和压缩，XY、XZ 和 YZ 表示相应的剪切过程。所有步骤的应变率均为恒定值（即 $1\ s^{-1}$）。加工过程允许采用

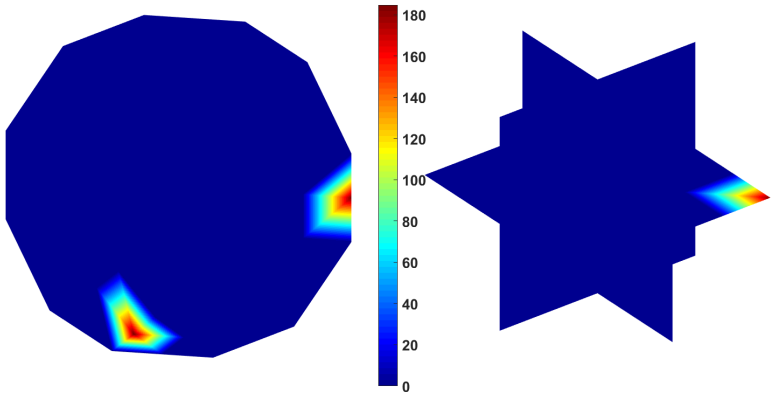


图 7：通过线性规划，在不考虑加工的情况下，获得了使均匀化弹性刚度常数最大化的单晶最优织构。

如图5和图6所示的单一加载条件或组合加载条件。发现这两种模型均能以多晶织构作为最优解。

如果使用线性规划求解同一优化问题，但不考虑加工过程（仅考虑结构-性能问题），则会得到单晶织构作为最优取向分布函数解（见图7）。在这种情况下，目标函数的最大值为896.2吉帕，这代表了目标函数理论上的最大值。另一方面，考虑了加工过程的神经网络代理模型（加工-结构-性能问题）得出的最优织构，其目标函数值为885.2吉帕（高于随机取向织构对应的目标函数值878.4997吉帕）。然而，结构-性能问题的理论解为单晶解，而使用神经网络和基于物理的模型求解加工-结构-性能问题时，得到的解均为多晶织构。尽管单晶织构能使弹性刚度常数达到理论可能的最大值，但其制造难度较大。另一方面，加工-结构-性能问题中的多晶织构可以通过本文提出的简单变形加工模式轻松制造。因此，考虑加工的影响对于制造以及衔接材料设计与制造至关重要 [37]。

这项工作可以为相关文献增添有价值的内容，有助于研究多晶微观结构的加工—结构—性能关联。神经网络代理模型计算速度更快且准确，因此可替代基于物理的模拟器。此外，经过加工获得的最优织

构是代理模型预测的，仍可使力学性能（例如弹性刚度）接近理论最大值。

4. 结论

本研究开发了一种代理神经网络模型，用于加速多晶微观结构的工艺设计。研究发现，传统的基于物理的有限元模拟器难以高效完成大规模搜索任务。凭借神经网络的表征能力，经过预训练的网络能够快速、准确地预测变形后的取向分布函数（ODF）。我们通过一个设计问题示例，求解出使铜的均匀化弹性刚度常数所定义的目标函数最大化的最佳加工路线。结果表明，基于物理的模拟器与神经网络代理模型的预测结果吻合良好。关于神经网络累积误差分析的研究将留待未来开展。未来工作还可探索整合类似的数据驱动建模策略，以实现对金属构件的并发多尺度建模。

5. 致谢

本文所述研究部分由空军科学研究办公室通过项目编号 FA9550-20-1-0397 提供支持。MH 和 PA 还感谢空军科学研究办公室青年研究员计划（资助编号 FA9550-21-1-0120）以及美国国家科学基金会（项目编号 2053840）提供的支持。

6. 数据可用性

目前无法共享复现这些研究结果所需的原始/处理后数据，因为这些数据也是一项正在进行的研究的一部分。数据将在收到请求后提供。

参考文献

[1] J. Allison, D. Backman, L. Christodoulou, 《集成计算材料工程：全球材料行业的新范式》，Jom 58 (11) (2006) 25–27。

[2] B. A. Cowles, D. G. Backman, R. E. Dutton, 《航空航天应用中 ICME 方法和模型验证与确认的推荐最佳实践更新》，Integrating Materials and Manufacturing Innovation 4 (1) (2015) 16–20。

[3] V. Venkatesh, R. Green, J. O'Connell, I. Cernatescu, R. Goetz, T. Wong, B. Streich, V. Saraf, M. Glavicic, D. Slavik 等, 《用于在转子部件设计中纳入体残余应力的 ICME 框架》，Integrating Materials and Manufacturing Innovation 7 (4) (2018) 173–185。

[4] G. H. Harrington、C. Kelly、V. Attari、R. Arroyave、S. R. Kalidindi, 《应用链式人工神经网络学习 $Mg_2Si_xSn_{1-x}$ 旋节线分解中的工艺—组织映射》，《材料与制造创新集成》（2022），1–17。

[5] D. B. Brough, D. Wheeler, J. A. Warren, S. R. Kalidindi，微观结构 -

基于知识的系统，用于捕捉工艺—结构演变之间的关联，《固体与材料科学最新观点》21（3）（2017）129–140。

[6] D. Sarkar, B. S. Reddy, B. Basu，实施统计建模方法以开发超细晶生物陶瓷：氧化锆增韧氧化铝案例，《美国陶瓷学会会刊》101 (3) (2018) 1333–1343。

[7] Y.C. Yabansu, P. Steinmetz, J.H¨otzer, S.R. Kalidindi, B.Nestler，从相场模拟中提取降阶工艺-结构关联，《材料学报》124 (2017) 182–194。

[8] G. Tapia, L. Johnson, B. Franco, K. Karayagiz, J. Ma, R. Arroyave, I. Kara- man, A. Elwany，镍钛形状记忆合金基于物理的析出模型的贝叶斯校准与不确定性量化，《制造科学与工程杂志》139 (7) (2017)。

[9]A. Cecen, H. Dai, Y. C. Yabansu, S. R. Kalidindi, L. Song，利用三维卷积神经网络研究材料结构-性能关联，《材料学报》146(2018) 76–84。

[10] I. Hassinger, X. Li, H. Zhao, H. Xu, Y. Huang, A. Prasad, L. Schadler, W. Chen, L. Catherine Brinson，开发一种用于预测非平衡加工条件下纳米复合材料分散状态的定量工具，《材料科学杂志》51 (9) (2016) 4238–4249。

[11] P. Acar、V. Sundararaghavan，《带工艺约束的微观结构设计线性求解方案》，AIAA期刊 54(12)（2016）4022–4031。

[12] P. Acar、V. Sundararaghavan，《用于微观结构多尺度设计与优化的线性求解器》，AIAA期刊 54(5)（2016）1751–1759。

[13] S. Acharjee, N. Zabaras，《罗德里格斯空间中用于微观结构模型降阶的正交分解方法及其在微观结构敏感材料性能最优控制中的应用》，《材料学报》51 (18) (2003) 5627–5646。

[14]S. Ganapathysubramanian, N. Zabaras，跨长度尺度设计：用于控制微观结构敏感材料性能的多晶塑性降阶模型，《计算力学与工程方法》193 (45-47) (2004) 5017–5034。

[15] S. R. Kalidindi, J. R. Houskamp, M. Lyons, B. L. Adams，承受拉伸载荷的正交各向异性板的微观结构敏感设计，《国际塑性学报》20 (8-9) (2004) 1561–1575。

[16] S. Kalidindi，S. Schoenfeld，关于晶体塑性模型对面心立方多晶体屈服面的预测，《材料科学与工程：A辑》293 (1-2) (2000) 120–129。

[17] E. Wargo，A. Hanna，A. Cecen，S. Kalidindi，E. Kumbur，用于燃料电池材料传输孔隙尺度分析的代表性体积单元选择，《电源》197（2012）168–179。

[18] D. T. Fullwood、S. R. Niezgoda、B. L. Adams、S. R. Kalidindi，《材料科学进展》55 (6) (2010) 477–562：《面向性能优化的微观结构敏感设计》。

[19] A. Morawiec、D. Field，《取向分布与错取向分布的罗德里格斯参数化》，Philosophical Magazine A 73 (4) (1996) 1113–1130。

[20] W. Yan、S. Lin、O. L. Kafka、C. Yu、Z. Liu、Y. Lian、S. Wolff、J. Cao、G. J. Wagner、W. K. Liu，增材制造的工艺-结构-性能关系建模，《Frontiers of MechanicalEngineering》13（4）（2018）482–492。

[21] S. M. Hashemi、S. Parvizi、H. Baghbanijavid、A. T. Tan、M. Nematol- lahi、A. Ramazani、N. X. Fang、M. Elahinia，金属增材制造中工艺–结构–性能–表现关系的计算建模：综述，《International Materials Reviews》67（1）（2022）1– 46。

[22] E. Popova、T. M. Rodgers、X. Gong、A. Cecen、J. D. Madison、S. R. Ka- lidindi，使用数据科学方法建立工艺–结构关联：在模拟增材制造数据中的应用，《Integrating materials and manu- facturing innovation》6（1）（2017）54–68。

[23] J. Dornheim、L. Morand、S. Zeitvogel、T. Iraki、N. Link、D. Helm，《用于结构引导加工路径优化的深度强化学习方法》，Journal of Intelligent Manufacturing 33(1) (2022) 333–352。

[24] P. Honarmandi、V. Attari、R. Arroyave，《利用批量贝叶斯优化加速材料设计：从材料微观结构到工艺规范的逆问题求解案例》，《计算材料科学》210（2022）111417。

[25] V. Sundararaghavan、N. Zabaras，论织构分类与变形工艺序列选择在控制织构依赖性性能方面的协同作用，《材料学报》53(4)（2005）1015–1027。

[26] A. Kumar、P. Dawson，基于罗德里格斯空间的面心立方变形织构计算建模，《材料学报》48 (10) (2000) 2719–2736。

[27] M. Hasan、P. Acar，利用机器学习增强材料性能闭合关系的微观组织敏感预测，Computational Materials Science 210 (2022)110930。

[28] A. Mann、S. R. Kalidindi，开发稳健的卷积神经网络模型，以捕捉微观组织—性能关联并构建支持材料设计的性能闭合关系，Virtual MaterialsDesign (2022) 879614107。

[29] Y. Han、W. Zeng、Y. Shu、Y. Zhou、H. Yu，使用前馈神经网络预测锻造Ti–10V–2Fe–3Al钛合金的力学性能，Computational Materials Science 50 (3) (2011) 1009–1015。

[30] M. Abbod、D. Linkens、Q. Zhu、M. Mahfouf，铝合金热机械加工的基于物理原理与神经模糊混合建模，Materials Scienceand Engineering: A333 (1-2) (2002) 397–408。

[31] S. Fang、M. Wang、M. Song，Al–Zn–Mg–Cu系合金时效工艺优化方法，《材料与设计》30（7）（2009）2460–2467。

[32] M. Raissi、P. Perdikaris、G. E. Karniadakis，《物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题与逆问题的深度学习框架》，《计算物理学杂志》378（2019）686–707。

[33] H.-J. Bunge, 《材料科学中的织构分析：数学方法》, Elsevier, 2013。

[34] H. R. Wenk, 《变形金属与岩石中的择优取向：现代织构分析导论》, Elsevier，2016。

[35] P. Acar、V. Sundararaghavan、M. De Graef, 《在立方堆积空间中对晶体学织构演化进行计算建模》, 《材料科学与工程建模与仿真》26 (6) (2018) 065012。

[36] I. Loshchilov、F. Hutter, 《解耦权重衰减正则化》, 载于：第七届国际学习表征会议，ICLR 2019，美国路易斯安那州新奥尔良，2019年5月6日至9日，OpenReview.net，2019。网址 https://openreview.net/forum?id=Bkg6RiCqY7

[37] M. Hasan、Y. Mao、K. Choudhary、F. Tavazza、A. Choudhary、A. Agrawal、P. Acar, 《面向立方微观结构弹性性能的数据驱动多尺度建模与优化》, 《材料与制造创新集成》11 (2) (2022) 230–240。