arXiv:2611.29666v1 [cs.CE] 22 Nov 2026

从紧凑型取向分布到织构演化：基于 GSH 初始化的取向感知深度材料网络

Ting-Ju Wei
Special Melted Products Ltd 总裁路，谢菲尔德 S4 7UR，英国 Ting-Ju.Wei@smp.ltd

Chuin-Shan Chen*
土木工程系 材料科学与工程系 国立台湾大学 台北罗斯福路四段1号，10617，台湾
dchen@ntu.edu.tw

2026年11月24日

摘要

取向感知深度材料网络（ODMN）是一种基于微观力学的替代模型，用于代表性体积单元（RVE）的全场晶体塑性模拟。传统ODMN同时学习晶体学取向和相互作用方向，因此复杂织构可能需要大量材料节点，并带来较高的在线计算成本。本研究提出了一种通过广义球谐函数（GSH）初始化的ODMN，称为 GSH-ODMN。通过体积加权 GSH 程序，将初始 RVE织构压缩为深度为 N 的网络中的 2^N 加权取向。它们被分配给材料节点并保持固定，因此离线训练仅需识别相互作用方向。最佳 GSH 截断阶数会随网络深度增加而提高。在线牛顿系统采用树结构的下三角-上三角（LU）分解求解，该分解利用网络的二叉树稀疏性，使每次迭代的计算成本按$O(2^N N^2)$缩放，而稠密求解为 $O(8^N)$。该框架通过两个因科镍 625（IN625）RVE 的全场直接数值模拟进行了验证：其中一个具有近似随机织构，另一个具有轧制织构，分别施加等温和热机械加载-卸载-再加载路径。与传统ODMN相比，GSH-ODMN提升了宏观应力和织构演化的预测效果。在 $N = 8$处，所有情况下预测织构与参考织构之间的归一化织构差异指数均低于 0．03。最后，在双尺度 L形支架模型的每个积分点处嵌入 GSH-ODMN，并施加冷弯和热弯循环；据估算，其成本比并行全场分析低三至四个数量级。

关键词 深度材料网络 · 晶体塑性 · 晶体学织构演变 · 取向分布函数 · 广义球谐函数

1 引言

多尺度模拟将微观结构物理与工程材料的宏观响应联系起来。这一联系是
这对于多晶材料尤其重要，因为其宏观行为源于晶体学各向异性晶粒的非均匀变形，并取决于晶体学取向、晶粒形貌和变形历史。晶体塑性（CP）通过晶体学滑移和晶格旋转来描述晶粒尺度的本构响应 [1, 2, 3, 4]。它不仅能预测各向异性的宏观响应，还能预测局部应力和应变、滑移系活动及织构演化等晶粒尺度的量 [5, 6]。对晶粒尺度场进行均匀化

*通讯作者。

可得代表性体积单元（RVE）上的有效本构响应，这是结构尺度模拟所必需的 [7, 8, 9, 4]。

人们已为多晶材料开发了许多均匀化方案。经典的Taylor模型假设所有晶粒中的变形梯度均匀，并以较低成本预测宏观响应和变形织构 [8]。然而，均匀应变假设忽略了晶粒间相互作用，并对运动学施加了过强约束。平均场方法，尤其是自洽方案，通过将每个晶粒视为嵌入有效介质中的夹杂，改进了Taylor近似 [10, 2, 11]。这类方法兼顾了效率与准确性，但无法解析晶粒内场波动，也无法解析相邻晶粒之间的相互作用。晶粒簇模型通过纳入相邻晶粒间的局部相互作用，在一定程度上弥补了这一局限 [12]。然而，其预测结果可能高度依赖预先设定的簇拓扑，以及用于正则化晶界不相容性的惩罚参数。这些特定于模型的选择可能需要校准，从而限制了模型在不同微观结构和加载条件下的可迁移性。

全场晶体塑性方法通过对代表性体积单元进行空间离散并求解相应的边值问题，克服了其中许多局限。晶体塑性有限元法（CPFEM）和晶体塑性快速傅里叶变换（CPFFT）方法能够解析晶粒内部及晶界处的非均匀应力、应变、滑移系活动和晶格旋转 [13, 14, 15, 16]。全场方法虽然精确，但计算成本高昂。非线性本构方程必须在大量材料点处积分，而且每个加载增量都必须对整个代表性体积单元迭代求解力学平衡。在并发多尺度模拟中，这一计算负担尤为沉重，因为需要在宏观模型的每个积分点处求解一个代表性体积单元边值问题 [17, 18, 19, 20]。对于具有大变形、复杂加载路径和大量宏观自由度的工业过程模拟，计算成本可能高到难以承受，从而限制了全场晶体塑性模型在深拉深和车削等成形及机械加工过程中的应用。微观—宏观解耦方案通过预先利用代表性体积单元的数值材料试验，确定假定宏观本构模型的参数，从而降低这一成本 [21]。

数据驱动代理模型也已成为全场 CP 均匀化的高效替代方案。前馈神经网络已用于根据微观组织描述符和加载条件预测均匀化本构响应或空间分布的变形场 [22]。卷积神经网络已用于近似铝合金的晶体塑性有限元法响应 [23]。循环神经网络（如线性化最小状态单元）能够再现路径相关材料行为，并在双尺度分析中取代重复的 CPFFT 模拟，例如哑铃形试样在单轴加载下的分析 [24, 25]。近期，有研究提出结合图网络与循环神经网络的混合架构，用于预测泰勒假设下多晶材料的均匀化响应，同时考虑晶粒尺度相互作用 [26]。这些代理模型显著降低了计算成本，但其中许多模型学习的是从微观结构和加载历程到宏观应力的直接映射。因此，它们需要大量非线性晶体塑性仿真，以采样相关的微观结构和加载路径。此外，材料状态通常由缺乏微观力学解释的隐变量表示，这使得难以以物理一致的方式演化历史相关内变量和晶体学织构。对于训练域之外的微观结构、加载路径或本构模型，其准确性也可能下降。

与纯数据驱动替代模型不同，深度材料网络（DMN）为计算均匀化提供了基于物理的框架 [27, 28, 29, 30]。DMN 以经典均匀化理论为基础，采用层次树架构，其中叶节点表示组成相，内部构建模块执行解析均匀化运算。因此，网络参数具有几何和物理意义，例如组成体积分数和平衡方向。DMN 仅使用线弹性数据离线训练，随后在在线模拟中预测非线性材料响应 [31, 32]。DMN 最初是为短纤维复合材料开发的 [27, 33, 28, 29, 34, 35], ，此后已扩展应用于其他非均质材料，包括多孔材料 [36, 37] 和机织复合材料 [38], ，也扩展到多物理场均匀化，包括热力耦合 [39, 40] ，以及近期在复合材料中的机电耦合 [41]。对于多晶材料，取向感知交互式深度材料网络（ODMN）将晶体学取向纳入网络，并预测织构演化 [42, 43, 44]。

当前 ODMN 存在两项局限。首先，要准确预测织构演化，需要使用大量材料节点来表示晶体学取向的初始分布。网络规模增大会降低计算加速效果，限制 ODMN 在大型工业模拟中的效率。其次，现有公式仅适用于力学均匀化，无法考虑热力学加载。这对于本构响应强烈依赖温度的变形过程尤为重要，而热激活位错介导塑性中通常会出现这种情况。

为解决第一个局限，本文采用 Marki 和 Knezevic [45], 基于广义球谐函数（GSH）提出的织构压缩流程，构建一组紧凑的加权晶体学取向

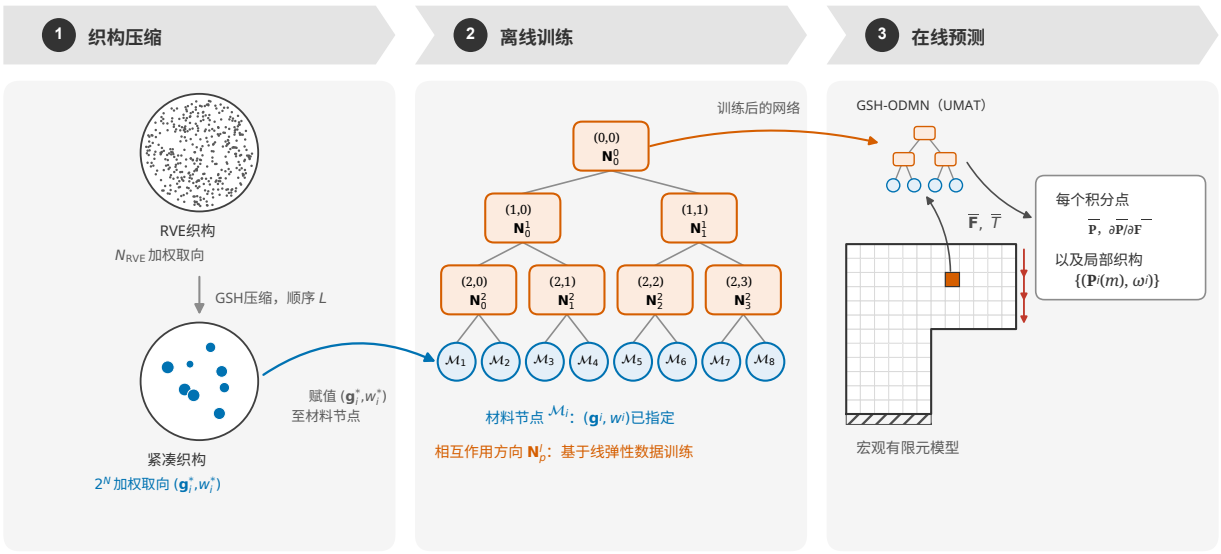

图 1：GSH-ODMN 三阶段框架。(1) 将 RVE织构进行 GSH压缩，得到 2^N 加权取向（$\mathbf{g}_i^*, w_i^*$）。(2) 对二叉树网络进行离线训练（显示深度 $N = 3$）。材料节点 $\mathcal{M}_i$ 由紧凑织构规定，相互作用方向 $\boldsymbol{N}_p^l$ 是唯一经过训练的参数。(3) 在宏观有限元模型的每个积分点处，通过用户材料子程序（UMAT）对训练后的网络进行在线评估。

以表示初始取向分布。该流程在 GSH 系数空间中优化取向及其权重，从而用少得多的材料节点表示初始织构。本文将 ODMN 的取向感知机制改写为 Bunge 欧拉角形式；这种约定在材料科学的织构描述中十分常用，同时消除了原始表述中所需的矩阵逆。为解决第二个局限，本文将 ODMN 扩展至热力学加载，其中给定的宏观温度历程驱动材料节点发生热膨胀，并影响其温度相关弹性。此外，在线阶段的牛顿系统采用树结构的下三角-上三角（LU）分解求解，该方法利用网络的二叉树稀疏性，使深度为 N 的网络中每次迭代的计算成本由稠密求解的 $O(8^N)$ 降至 $O(2^N N^2)$。所得框架称为 GSH-ODMN，并通过两种代表性体积单元的 CPFFT 仿真进行了验证：一种包含等轴晶粒且织构近乎随机，另一种包含扁平晶粒且具有轧制织构；验证路径为有无温度循环的加载-卸载-再加载（LUR）路径。最后，本文将 GSH-ODMN 应用于商用有限元软件 Abaqus 中 L形支架的双尺度热力学模拟。

本文其余部分的组织如下。第 2 节介绍基于 GSH 的织构压缩、修订后的取向感知公式以及热力学在线预测。第 3 节针对具有不同晶粒形貌和初始织构的两个多晶代表性体积单元，利用 CPFFT 仿真对该框架进行验证。第 4 节将其应用于 L形支架的双尺度热力学模拟。第 5 节总结全文。

2 方法

本节介绍 GSH-ODMN。第2.1节介绍 ODMN架构，以及材料节点和均匀化构件方面的参数化。第2.2节介绍基于 GSH 的织构压缩，以及如何利用该方法初始化材料节点的取向和权重。第2.3节介绍修订后的取向感知机制。第2.4节介绍离线训练，第2.5节介绍热力学加载下的非线性在线预测。图1总结了该框架的三个阶段以及下文使用的符号。

2.1 ODMN架构与参数化

ODMN架构遵循我们先前工作 [42]中的分层二叉树公式。该网络由分层连接的均匀化构件组成，材料节点连接到末端构建块。每个材料节点 $\mathcal{M}_i$ 表示代表性体积单元域 Ω_i 中的一个子域 Ω_{RVE}，并带有体积

体积分数和晶体学取向图形取向。对于深度为 N 的 ODMN， 2^N 子域构成代表性体积单元的一个划分 ，

$$\Omega_{\mathrm{RVE}} = \bigcup_{i=1}^{2^N} \Omega_i, \qquad \Omega_i \cap \Omega_j = \varnothing \quad \text{for } i \neq j. \tag{1}$$

材料节点 $\mathcal{M}_i$ 的体积分数为

$$w_i = \frac{|\Omega_i|}{|\Omega_{\mathrm{RVE}}|}, \qquad \sum_{i=1}^{2^N} w_i = 1, \tag{2}$$

其中， $|\cdot|$ 表示一个域的体积。每个材料节点还被赋予一个晶体学取向 $\mathbf{g}_i$。加权取向集合

$$\{(\mathbf{g}_i, w_i)\}_{i=1}^{2^N} \tag{3}$$

是初始取向分布函数（ODF）的一种离散表示。

材料节点子域从树的底部向上进行均匀化，直到到达根构建块，从而得到代表性体积单元（RVE）的有效响应。每个构建块沿相互作用方向 $\boldsymbol{N}$组合其两个子域的响应。该方向是一个由两个无量纲角变量 θ 和 ϕ参数化的单位向量，

$$\boldsymbol{N} = \begin{bmatrix} \cos(2\pi\phi)\sin(\pi\theta) \\ \sin(2\pi\phi)\sin(\pi\theta) \\ \cos(\pi\theta) \end{bmatrix}. \tag{4}$$

每个均匀化构建块都由其在分层二叉树中的层级 l和位置 p确定。根构建块位于层级 $l = 0$。层级 l包含 2^l 个构建块，索引为 $p = 0$、.....、 $2^l - 1$。因此，深度为 N的 ODMN 包含 N个构建块层级，分别为 $l = 0$、.....、 $N - 1$，总计 $2^N - 1$ 个构建块。构建块 (l， p) 的两个子节点分别为 ($l + 1$， $2p$) 和 ($l + 1$， $2p + 1$)。对于每个构建块 (l， p)，令 $\mathcal{J}^0_{l,\ p}$和 $\mathcal{J}^1_{l,\ p}$分别表示属于其第一和第二个子域的材料节点集合。这些集合根据二叉树拓扑递归确定，

$$\mathcal{J}^0_{l,p} = \begin{cases} \mathcal{J}^0_{l+1,\,2p} \cup \mathcal{J}^1_{l+1,\,2p}, & l < N-1, \\ \{\mathcal{M}_{2p+1}\}, & l = N-1, \end{cases} \tag{5}$$

and

$$\mathcal{J}^1_{l,p} = \begin{cases} \mathcal{J}^0_{l+1,\,2p+1} \cup \mathcal{J}^1_{l+1,\,2p+1}, & l < N-1, \\ \{\mathcal{M}_{2p+2}\}, & l = N-1. \end{cases} \tag{6}$$

在终端层级 $l = N - 1$，每个子域由单个材料节点表示。在更高层级，$\mathcal{J}^0_{l,\ p}$和 $\mathcal{J}^1_{l,\ p}$ 包含从相应子分支向下延伸的所有材料节点。网络拓扑和索引约定详见我们先前关于 ODMN 的工作 [42]。

深度为 N 的 ODMN 的完整参数集为

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = &\left\{ w_i, \mathbf{g}_i \;\middle|\; 1 \le i \le 2^N \right\} \\ &\cup \left\{ \theta^l_p, \phi^l_p \;\middle|\; 0 \le l < N,\ 0 \le p < 2^l \right\}, \end{aligned} \tag{7}$$

其中，第一组包含材料节点的体积分数和取向，第二组包含角变量 θ^l_p和 ϕ^l_p，通过公式（4）定义每个构建块（l, p）的相互作用方向 $\boldsymbol{N}^l_p$。

2.2 基于 GSH 的织构压缩和 ODMN 初始化

在传统ODMN中，材料节点的取向和权重是通过离线训练识别的可训练参数。本文则采用 Marki 和 Knezevic 的 GSH 压缩过程 [45]，根据代表性体积单元的织构构建一组紧凑的加权取向。所得取向和权重分别作为材料节点的晶体学取向和体积分数，并在离线训练期间保持固定。

设代表性体积单元（RVE）的织构由取向分布函数 $f_{\mathrm{RVE}}(\mathbf{g})$ 描述，其中 $\mathbf{g}$ 表示一种晶体学取向。取向分布函数是在取向空间 $\mathcal{G}$ 上归一化的概率密度，

$$f_{\mathrm{RVE}}(\mathbf{g})\, d\mathbf{g} = \frac{dV}{V_{\mathrm{RVE}}}, \qquad \int_{\mathcal{G}} f_{\mathrm{RVE}}(\mathbf{g})\, d\mathbf{g} = 1, \tag{8}$$

其中 $V_{\mathrm{RVE}} = |\Omega_{\mathrm{RVE}}|$ 是代表性体积单元的体积， dV 是取向位于取向空间单元 $d\mathbf{g}$内的材料体积。取向由 Bunge 欧拉角参数化，

$$\mathbf{g} = (\varphi_1, \Phi, \varphi_2), \tag{9}$$

采用取向空间的归一化不变体积元

$$d\mathbf{g} = \frac{1}{8\pi^2} \sin\Phi \, d\varphi_1 \, d\Phi \, d\varphi_2, \qquad \int_{\mathcal{G}} d\mathbf{g} = 1. \tag{10}$$

在此归一化下，随机织构对应于 $f_{\mathrm{RVE}} = 1$，而取向分布函数以随机分布倍数（m.r.d.） [46]表示。

取向分布函数用广义球谐基函数展开。在考虑晶体和样品对称性之前，这些函数为

$$T_l^{mn}(\mathbf{g}) = e^{im\varphi_2} P_l^{mn}(\cos\Phi) e^{in\varphi_1}, \tag{11}$$

指数中的 i 是虚数单位， P_l^{mn} 是广义勒让德函数， l 是调和阶数，而 m 和 n 是调和阶，其中 $-l \le m, n \le l$ [46]。在本小节中， l 均表示调和阶数，这与织构领域的文献用法一致。它与第2.1节中的树层级无关。

晶体和样品对称性通过合并对称等价的基函数，减少了独立 GSH 分量的数量。按照 Marki 和 Knezevic 的记法 [45], , 同时纳入这两种对称性的 GSH 基为

$$\dot{\dot{T}}_l^{\mu\nu}(\mathbf{g}) = \sum_{m(\mu)} \sum_{n(\nu)} \ddot{A}_l^{m\mu} \dot{A}_l^{n\nu} T_l^{mn}(\mathbf{g}), \tag{12}$$

其中， $\ddot{A}_l^{m\mu}$ 和 $\dot{A}_l^{n\nu}$分别是晶体对称性和样品对称性的对称系数；求和遍及阶数 m 和 n ，这些阶数对应于具有独立指标 μ 和 ν的对称函数。 T和 A 上方的点属于 Bunge [46]的对称性记法，并非时间导数。

采用对称性适配基，截断至阶数 L的取向分布函数为

$$f(\mathbf{g}) = \sum_{l=0}^{L} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{K(l)} C_l^{\mu\nu} \dot{\dot{T}}_l^{\mu\nu}(\mathbf{g}), \tag{13}$$

其中， $C_l^{\mu\nu}$ 为 GSH 展开系数； $M(l)$和 $K(l)$分别是晶体对称性和样品对称性下，次数为 l 的独立对称函数的数量 [46]。本文假设晶体具有立方晶体对称性，样品具有三斜样品对称性，因此 $K(l) = 2l + 1$。根据 GSH 基的正交性，展开系数为

$$C_l^{\mu\nu} = (2l+1) \int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{g}) \left[\dot{\dot{T}}_l^{\mu\nu}(\mathbf{g}) \right]^* d\mathbf{g}, \tag{14}$$

其中，$(\cdot)^*$ 表示复共轭。

对于数值生成的 代表性体积单元（RVE），晶体学织构可表示为一组有限的加权取向，

$$\mathcal{T}_{\mathrm{RVE}} = \left\{ \left(\mathbf{g}_q^{\mathrm{RVE}}, v_q \right) \right\}_{q=1}^{N_{\mathrm{RVE}}}, \qquad \sum_{q=1}^{N_{\mathrm{RVE}}} v_q = 1, \tag{15}$$

其中， N_{RVE} 为取向数，此处每个晶粒对应一个取向；$\mathbf{g}_q^{\mathrm{RVE}}$为第 q个取向， v_q 为其体积分数。对于基于体素的代表性体积单元， v_q 为具有第 q个取向的体素所占的比例。

对于这种离散织构，式（14）中的积分变为加权求和。若不包含因子（$2l+1$），则得到目标代表性体积单元织构的归一化 GSH 系数，以帽号标记：

$$\widehat{C}_l^{\mu\nu,\mathrm{RVE}} = \sum_{q=1}^{N_{\mathrm{RVE}}} v_q \left[\dot{\dot{T}}_l^{\mu\nu} \left(\mathbf{g}_q^{\mathrm{RVE}} \right) \right]^*. \tag{16}$$

于是，式（13）中展开式的系数为

$$C_l^{\mu\nu,\mathrm{RVE}} = (2l+1) \widehat{C}_l^{\mu\nu,\mathrm{RVE}}. \tag{17}$$

保留截至截断阶数 L 的独立系数，可用一个 GSH 系数构成的有限维向量表示 RVE织构。

织构压缩会构造一组缩减后的加权取向，其取向数量恰好等于 ODMN 所需的数量。深度为 N 的 ODMN 有 $N_m = 2^N$ 个材料节点，标记为 c 的紧凑织构写作

$$\mathcal{T}_{\mathrm{c}} = \{(\mathbf{g}_i, w_i)\}_{i=1}^{N_m}, \qquad \sum_{i=1}^{N_m} w_i = 1, \tag{18}$$

其中，$\mathbf{g}_i$ 和 w_i 分别为第 i个紧凑取向及其权重。
对于一种试探性紧凑织构，归一化的 GSH 系数为

$$\widehat{C}_l^{\mu\nu,\mathrm{c}} = \sum_{i=1}^{N_m} w_i \left[\dot{\dot{T}}_l^{\mu\nu}(\mathbf{g}_i)\right]^*. \tag{19}$$

按照 Marki 和 Knezevic [45], ，引入辅助非负变量 ζ_i，将取向权重参数化为

$$w_i = \frac{\zeta_i}{\sum_{j=1}^{N_m} \zeta_j}, \qquad \zeta_i \geq 0, \tag{20}$$

从而自动满足权重的单位和约束 c onstraint。单个索引 r 枚举所有独立的 t 分量（l, μ, ν）r 保留至阶数 L。紧凑织构的归一化 GSH 系数表示为

$$\widehat{C}_r^{\mathrm{c}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_m} \zeta_i \left[\dot{\dot{T}}_r(\mathbf{g}_i)\right]^*}{\sum_{j=1}^{N_m} \zeta_j}, \tag{21}$$

. T_r 是第 r个保留分量的对称性适配 GSH 基函数。紧凑织构与目标织构之间的残差为
其中

$$G_r = \widehat{C}_r^{\mathrm{c}} - \widehat{C}_r^{\mathrm{RVE}}, \qquad r = 1, \ldots, N_{\mathrm{GSH}}, \tag{22}$$

其中， N_{GSH} 是拟合中包含的独立 GSH 系数数量。拟合误差为残差向量的欧几里得范数,

$$\mathcal{E} = \left[\sum_{r=1}^{N_{\mathrm{GSH}}} |G_r|^2\right]^{1/2}. \tag{23}$$

取向及其权重均经过优化。设计变量汇总为向量

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{\mathrm{GSH}} = \big[&\varphi_1^1, \Phi^1, \varphi_2^1, \zeta_1, \ldots, \\ &\varphi_1^{N_m}, \Phi^{N_m}, \varphi_2^{N_m}, \zeta_{N_m}\big]^{\mathsf{T}},\end{aligned} \tag{24}$$

其中，欧拉角上的上标表示紧凑取向的编号。这给出了 $4N_m$ 个优化变量。紧凑织构通过求解非线性优化问题获得

$$\mathbf{x}_{\mathrm{GSH}}^* = \arg\min_{\mathbf{x}_{\mathrm{GSH}}} \mathcal{E}(\mathbf{x}_{\mathrm{GSH}}), \tag{25}$$

其约束条件为 Bunge 欧拉角的允许范围以及非负约束 $\zeta_i \geq 0$。由于 GSH 系数是欧拉角和权重的解析函数，因此使用 Marki 和 Knezevic [45]推导的解析梯度和海森矩阵来求解该问题。

优化后的紧凑织构在取向和权重上以星号标记，如下所示:

$$\mathcal{T}_{\mathrm{c}}^* = \{(\mathbf{g}_i^*, w_i^*)\}_{i=1}^{N_m}, \qquad N_m = 2^N, \tag{26}$$

其中保留的 GSH 系数满足

$$\widehat{C}_r^{\mathrm{c}}(\mathcal{T}_{\mathrm{c}}^*) \approx \widehat{C}_r^{\mathrm{RVE}}, \qquad r = 1, \ldots, N_{\mathrm{GSH}}. \tag{27}$$

随后，将优化后的加权取向分配给 ODMN 的材料节点，

$$\mathbf{g}_i \leftarrow \mathbf{g}_i^*, \qquad w_i \leftarrow w_i^*, \qquad i = 1, \ldots, N_m. \tag{28}$$

因此，材料节点的取向和体积分数由 RVE 织构的紧凑表示指定，而非通过离线训练确定。第 i个紧凑取向被分配给第 i个材料节点；材料节点按照二叉树中从左到右的顺序编号，并按压缩返回取向的顺序进行分配。此分配方式是任意的，因为压缩不会将相似取向放置在相邻的材料节点中。其对预测结果的影响将在第3.4节中考察。

2.3 基于Bunge欧拉角的修订版取向感知机制

取向感知机制将每个材料节点与一种晶体学取向关联起来，并提供晶体参考系与样品参考系之间的转换。这里，直接将第2.2节GSH压缩得到的取向用作Bunge欧拉角。随后，这些相同的角度将用于GSH表示、离线训练期间晶体坐标系刚度的旋转，以及在线预测期间晶体塑性本构模型的初始化。

2.3.1 Bunge 欧拉角与晶体到样品的旋转

对于材料节点 $\mathcal{M}_i$，晶体学取向由 Bunge 欧拉角参数化

$$\mathbf{g}_i = \left(\varphi_1^i, \Phi^i, \varphi_2^i\right), \tag{29}$$

其中所有角度均以弧度表示。为区分 GSH表示中使用的取向变量 $\mathbf{g}_i$ 与其矩阵表示，相关的 Bunge 取向矩阵记为 $\boldsymbol{G}_i$。

绕 z轴和 x轴分别旋转角度 ω 的右手主动旋转为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{R}_z(\omega) &= \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \boldsymbol{R}_x(\omega) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega & -\sin\omega \\ 0 & \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{30}$$

根据 Bunge约定，取向矩阵 $\boldsymbol{G}_i$ 定义了矢量分量从样品坐标系 (s) 到晶体坐标系 (c) 的被动变换，

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{c}} = \boldsymbol{G}_i \boldsymbol{v}^{\mathrm{s}}, \quad \boldsymbol{G}_i = \boldsymbol{R}_z(-\varphi_2^i)\boldsymbol{R}_x(-\Phi^i)\boldsymbol{R}_z(-\varphi_1^i), \tag{31}$$

其中， $\boldsymbol{v}^{\mathrm{s}}$ 和 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{c}}$ 分别汇集了矢量在样品坐标系和晶体坐标系中的分量。由此得到的取向矩阵为

$$\boldsymbol{G}_i = \begin{bmatrix} c_1c_2 - s_1s_2c_\Phi & s_1c_2 + c_1s_2c_\Phi & s_2s_\Phi \\ -c_1s_2 - s_1c_2c_\Phi & -s_1s_2 + c_1c_2c_\Phi & c_2s_\Phi \\ s_1s_\Phi & -c_1s_\Phi & c_\Phi \end{bmatrix}, \tag{32}$$

其中

$$\begin{aligned} c_1 = \cos\varphi_1^i, \quad s_1 = \sin\varphi_1^i, \quad c_2 = \cos\varphi_2^i, \\ s_2 = \sin\varphi_2^i, \quad c_\Phi = \cos\Phi^i, \quad s_\Phi = \sin\Phi^i. \end{aligned} \tag{33}$$

由于 $\boldsymbol{G}_i$ 是一个正旋转，即特殊正交群 $SO(3)$ 的一个元素，因此满足

$$\boldsymbol{G}_i^{-1} = \boldsymbol{G}_i^{\mathsf{T}}, \tag{34}$$

其中，上标 T 表示转置。因此，从晶体坐标系到样品坐标系的逆变换为

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{R}_i \boldsymbol{v}^{\mathrm{c}}, \qquad \boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{G}_i^{-1} = \boldsymbol{G}_i^{\mathsf{T}}, \tag{35}$$

其中， $\boldsymbol{R}_i$ 是取向感知公式中使用的晶体到样品旋转矩阵。由式（31）可得，

$$\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}_z(\varphi_1^i)\boldsymbol{R}_x(\Phi^i)\boldsymbol{R}_z(\varphi_2^i). \tag{36}$$

因此，矩阵 $\boldsymbol{G}_i$ 和 $\boldsymbol{R}_i$ 表示相同的取向，但变换方向相反。旋转 $\boldsymbol{R}_i$ 用于离线训练期间将刚度从晶体坐标系变换到样品坐标系，而 $\boldsymbol{G}_i$ 用于在线预测期间初始化 CP模型。

2.3.2 离线训练的弹性刚度旋转

在离线训练期间，定义于晶体坐标系中的弹性刚度必须根据每个材料节点的取向变换到样品坐标系。令 $\mathbb{C}^{\mathrm{c}}$ 表示晶体坐标系中的四阶弹性刚度张量，其分量为 C^{c}_{pqrs}。对于材料节点 $\mathcal{M}_i$，样品坐标系中的分量由四阶张量的变换规则得到,

$$C^{\mathrm{s},i}_{abcd} = R^i_{ap} R^i_{bq} R^i_{cr} R^i_{ds} C^{\mathrm{c}}_{pqrs}, \tag{37}$$

其中， R^i_{ap} 是 $\boldsymbol{R}_i$ 的分量，并对重复指标求和。由于 $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{G}_i^{\mathsf{T}}$，式（37）也可以使用Bunge取向矩阵的分量 G^i_{pa} 等价地写为

$$C^{\mathrm{s},i}_{abcd} = G^i_{pa} G^i_{qb} G^i_{rc} G^i_{sd} C^{\mathrm{c}}_{pqrs}. \tag{38}$$

对于数值实现 ，对称应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 和应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 以Voigt记号存储，并以上标V标记, 如下所示

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V}} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{22} & \sigma_{33} & \sigma_{23} & \sigma_{13} & \sigma_{12} \end{bmatrix}^{\mathsf{T}}, \tag{39}$$

and

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{33} & 2\varepsilon_{23} & 2\varepsilon_{13} & 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}^{\mathsf{T}}. \tag{40}$$

在此工程应变约定下，张量内积在 Voigt 形式下保持不变:

$$\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V}}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V}}. \tag{41}$$

对称二阶张量从晶体坐标系到样品坐标系的变换为

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{R}_i \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{c}} \boldsymbol{R}_i^{\mathsf{T}}, \qquad \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{R}_i \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{c}} \boldsymbol{R}_i^{\mathsf{T}}, \tag{42}$$

其中，上标 s 和 c 分别表示样品坐标系和晶体坐标系。相应的 Voigt 向量变换为

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},s} = \boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i) \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},c}, \qquad \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},s} = \boldsymbol{M}_\varepsilon(\boldsymbol{R}_i) \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c}, \tag{43}$$

其中， $\boldsymbol{M}_\sigma$ 和 $\boldsymbol{M}_\varepsilon$ 分别为 Voigt应力和工程应变的 6×6 变换矩阵。为简洁起见，令 $r_{ab} \equiv R^i_{ab}$。采用上述 Voigt排列顺序（11、22、33、23、13、12），应力变换矩阵为

$$\boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i) = \left[\boldsymbol{M}_\sigma^{(n)} \quad \boldsymbol{M}_\sigma^{(s)} \right], \tag{44}$$

其中， 6×3 块 $\boldsymbol{M}_{\sigma}^{(n)}$和 $\boldsymbol{M}_\sigma^{(s)}$分别作用于法向分量和剪切分量，其定义为 y

$$\boldsymbol{M}_\sigma^{(n)} = \begin{bmatrix} r_{11}^2 & r_{12}^2 & r_{13}^2 \\ r_{21}^2 & r_{22}^2 & r_{23}^2 \\ r_{31}^2 & r_{32}^2 & r_{33}^2 \\ r_{21} r_{31} & r_{22} r_{32} & r_{23} r_{33} \\ r_{11} r_{31} & r_{12} r_{32} & r_{13} r_{33} \\ r_{11} r_{21} & r_{12} r_{22} & r_{13} r_{23} \end{bmatrix}, \tag{45}$$

and

$$\boldsymbol{M}_\sigma^{(s)} = \begin{bmatrix} 2r_{12} r_{13} & 2r_{11} r_{13} & 2r_{11} r_{12} \\ 2r_{22} r_{23} & 2r_{21} r_{23} & 2r_{21} r_{22} \\ 2r_{32} r_{33} & 2r_{31} r_{33} & 2r_{31} r_{32} \\ r_{22} r_{33} + r_{23} r_{32} & r_{21} r_{33} + r_{23} r_{31} & r_{21} r_{32} + r_{22} r_{31} \\ r_{12} r_{33} + r_{13} r_{32} & r_{11} r_{33} + r_{13} r_{31} & r_{11} r_{32} + r_{12} r_{31} \\ r_{12} r_{23} + r_{13} r_{22} & r_{11} r_{23} + r_{13} r_{21} & r_{11} r_{22} + r_{12} r_{21} \end{bmatrix}. \tag{46}$$

应力与应变之间的标量缩并在旋转下保持不变,

$$\left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},s}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},s} = \left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},c}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c}. \tag{47}$$

将式（43）代入式（47）可得

$$\left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},c}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{M}_\varepsilon(\boldsymbol{R}_i) \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c} = \left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},c}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c}. \tag{48}$$

由于这一点 对于任意应力和应变状态，该关系都必须成立，且两个变换矩阵满足

$$\boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{M}_\varepsilon(\boldsymbol{R}_i) = \boldsymbol{I}, \tag{49}$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵，或者等价地，

$$\boldsymbol{M}_{\varepsilon}(\boldsymbol{R}_i)^{-1} = \boldsymbol{M}_{\sigma}(\boldsymbol{R}_i)^{\mathsf{T}}. \tag{50}$$

这种对偶性源于Voigt应力向量与工程应变向量之间的功共轭关系。

晶体坐标系中的本构关系为

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},c} = \boldsymbol{C}^{\mathrm{c}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c}, \tag{51}$$

其中， $\boldsymbol{C}^{\mathrm{c}}$ 是 6×6 $\mathbb{C}^{\mathrm{c}}$的Voigt矩阵。将此关系与式（43）结合可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{V},s} &= \boldsymbol{M}_{\sigma}(\boldsymbol{R}_i)\boldsymbol{C}^{\mathrm{c}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},c} \\ &= \boldsymbol{M}_{\sigma}(\boldsymbol{R}_i)\boldsymbol{C}^{\mathrm{c}}\boldsymbol{M}_{\varepsilon}(\boldsymbol{R}_i)^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{V},s}.\end{aligned} \tag{52}$$

使用 式（50），样品坐标系中与材料节点 $\mathcal{M}_i$ 相关联的弹性刚度因此为 e

$$\boldsymbol{C}_i^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{M}_{\sigma}(\boldsymbol{R}_i)\boldsymbol{C}^{\mathrm{c}}\boldsymbol{M}_{\sigma}(\boldsymbol{R}_i)^{\mathsf{T}}. \tag{53}$$

因此，刚度变换只需要进行矩阵乘积和转置，无需在离线训练期间计算矩阵逆。

2.3.3 在线预测的晶体学取向初始化

优化后的取向是离线训练期间固定的网络参数。在非线性在线预测期间，它们仅定义初始晶格取向，随后这些取向将根据晶体塑性本构响应演化。

在每个材料节点 $\mathcal{M}_i$处，变形梯度按乘法分解为

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{p}}, \tag{54}$$

其中， $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{p}}$ 表示与塑性流动相关的保持晶格不变的非弹性变形梯度， $\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}i}$ 表示与本征应变相关的晶格畸变非弹性变形梯度，而 $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}$表示弹性变形梯度。若不存在初始本征应变，

$$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{i}}(0) = \boldsymbol{I}, \tag{55}$$

其中，参数 0 表示初始时刻 $t = 0$。按照 Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit（DAMASK）[15], 的运动学表述，给定的初始取向 $\boldsymbol{G}_i$ 以如下形式进入初始乘法分解：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{p}}(0) &= \boldsymbol{G}_i, \\ \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}(0) &= \boldsymbol{G}_i^{-1} = \boldsymbol{R}_i.\end{aligned} \tag{56}$$

在后续加载过程中， $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{p}}$ 根据晶体塑性本构方程演化。时间 t时的晶格取向由弹性变形梯度 [47],的极分解得到

$$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{e}}(t) = \boldsymbol{R}_i(t)\boldsymbol{U}_i^{\mathrm{e}}(t), \tag{57}$$

其中 $\boldsymbol{R}_i$ (*t*) 是不断演化的活动晶体到样品旋转， $\boldsymbol{U}_i^{\mathrm{e}}$(*t*) 是弹性右伸长张量 .

2.4 离线训练

考虑了两种离线训练策略：本文提出的基于GSH的策略，以及我们先前工作 [42] 中采用的传统ODMN策略。两者使用相同的线弹性数据集、目标函数、网络拓扑和优化设置。它们的区别在于材料节点的权重和取向的确定方式不同，因此分层均匀化中可训练的量也不同。

2.4.1 材料节点的参数化

在这两种策略中，材料节点 $\mathcal{M}_i$ 携带第2.3节中的 Bunge三元组 $\mathbf{g}_i = (\varphi_1^i,\ \Phi^i,\ \varphi_2^i)$ 和一个权重。在传统策略中，三个角度均可训练，并在旋转群上均匀初始化，即$\varphi_1^i,\ \varphi_2^i \sim \mathcal{U}(0,\ 2\pi)$ 和 $\cos\,\Phi^i \sim \mathcal{U}(-1,\ 1)$，其中 $\mathcal{U}(a,\ b)$ 表示区间 $(a,\ b)$ 上的均匀分布。每个权重都通过锐度参数为 κ 的 Softplus映射，由一个不受约束的标量 z_i 表示，

$$\tilde{w}_i = \frac{1}{\kappa}\ln\left(1 + e^{\kappa z_i}\right), \qquad \kappa = 10, \tag{58}$$

该映射使未归一化权重 $\tilde{w}_i$ 对任意 z_i 值均为正。下文式（64）中的均匀化构件所用的相对体积分数仅涉及权重之比，因此训练期间无需进行归一化。训练完成后，在线阶段使用的体积分数通过对训练得到的权重进行归一化获得，

$$w_i = \frac{\tilde{w}_i}{\sum_{j=1}^{2^N} \tilde{w}_j}, \qquad \sum_{i=1}^{2^N} w_i = 1. \tag{59}$$

在基于GSH的策略中，取向和权重由式 (28) 指定。指定的权重已满足单位和约束，且这两者在训练过程中均不会更新。在实现中，指定的权重通过式 (58) 的逆运算存储，因此两种策略共用同一代码路径。在两种策略中，相互作用方向的角变量 θ_p^l 和 ϕ_p^l 均使用固定随机种子生成的 (0，1) 区间内的值进行初始化。

2.4.2 线弹性训练数据集

对于本文所研究的立方晶体，以晶体坐标系表示的单晶刚度矩阵为

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{c}} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \tag{60}$$

三个弹性常数 C_{11}、C_{12} 和 C_{44} 在较宽范围内独立采样，

$$\begin{aligned} &C_{11}, C_{12}, C_{44} \sim \mathcal{U}\left(10^{-3}, 10^{3}\right)\ \mathrm{GPa}, \\ &C_{11} - C_{12} > 0, \end{aligned} \tag{61}$$

采样遵循我们先前 ODMN 工作 [42] 中采用的策略。

对于每个样本 s，给定单晶刚度 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{c},(s)}$，通过使用 DAMASK 的 CPFFTsolver [15]进行全场直接数值模拟（DNS），得到代表性体积单元（RVE）的有效刚度 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{DNS},(s)}$。下文中，上横线表示宏观量，即均匀化量。离线数据集为

$$\mathcal{D}_{\mathrm{off}} = \left\{ \left(\boldsymbol{C}^{\mathrm{c},(s)}, \overline{\boldsymbol{C}}^{\mathrm{DNS},(s)} \right) \right\}_{s=1}^{N_{\mathrm{data}}}, \tag{62}$$

其中 N_{data} 为样本数量。两种训练策略使用相同的数据集。

2.4.3 材料节点刚度

对于每个训练样本 s，将采样得到的单晶刚度赋给所有材料节点，并根据式（53）将其旋转至样品坐标系，

$$\boldsymbol{C}_i^{\mathrm{s},(s)} = \boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i) \boldsymbol{C}^{\mathrm{c},(s)} \boldsymbol{M}_\sigma(\boldsymbol{R}_i)^{\mathsf{T}}, \quad i = 1, \ldots, 2^N, \tag{63}$$

其中，$\boldsymbol{R}_i$ 是第 $\mathcal{M}_i$ 个材料节点在第2.3节中定义的晶体到样品旋转。

材料节点刚度是网络终端层级的输入。从那里开始，它们被组合通过第2.1节的构建模块递归地进行组合，直到在根节点处获得有效刚度。

2.4.4 分层均匀化

对于构建块 (l, p)，两个子分支的相对体积分数由材料节点权重给出，这两个子分支的材料节点集分别为式 (5) 和 (6) 中的 $\mathcal{J}^0_{l,p}$ 和 $\mathcal{J}^1_{l,p}$，即

$$f^0_{l,p} = \frac{\sum_{\mathcal{M}_i \in \mathcal{J}^0_{l,p}} w_i}{\sum_{\mathcal{M}_i \in \mathcal{J}^0_{l,p} \cup \mathcal{J}^1_{l,p}} w_i}, \qquad f^1_{l,p} = \frac{\sum_{\mathcal{M}_i \in \mathcal{J}^1_{l,p}} w_i}{\sum_{\mathcal{M}_i \in \mathcal{J}^0_{l,p} \cup \mathcal{J}^1_{l,p}} w_i}. \tag{64}$$

设 $\boldsymbol{C}_l^{(s)}{}_{,p}$ 表示训练样本 s 中构建块 (l,p) 的有效刚度。自底向上均匀化可递归表示为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}_{l,p}^{(s)} &= \mathbb{H}_2\big(\boldsymbol{C}_{l+1,2p}^{(s)}, \boldsymbol{C}_{l+1,2p+1}^{(s)}, f_{l,p}^0, f_{l,p}^1, \boldsymbol{N}_p^l\big),\\ &\quad l < N-1,\\ \boldsymbol{C}_{l,p}^{(s)} &= \mathbb{H}_2\big(\boldsymbol{C}_{2p+1}^{\mathrm{s},(s)}, \boldsymbol{C}_{2p+2}^{\mathrm{s},(s)}, f_{l,p}^0, f_{l,p}^1, \boldsymbol{N}_p^l\big),\\ &\quad l = N-1.\end{aligned} \tag{65}$$

在终端层级 $l = N-1$，两个子节点是材料节点 $\mathcal{M}_{2p+1}$ 和 $\mathcal{M}_{2p+2}$。在所有更高层级，子节点刚度是两个子构建模块的有效刚度。

对于刚度为 $\boldsymbol{C}^0$ 和 $\boldsymbol{C}^1$、相对体积分数为 f^0 和 f^1 且相互作用方向为 $\boldsymbol{N}$ 的两个子节点，两相均匀化算子 $\mathbb{H}_2$ 定义为

$$\begin{aligned}\mathbb{H}_2\left(\boldsymbol{C}^0, \boldsymbol{C}^1, f^0, f^1, \boldsymbol{N}\right) &= f^0\boldsymbol{C}^0 + f^1\boldsymbol{C}^1\\ &\quad - f^0 f^1 \left(\boldsymbol{C}^0 - \boldsymbol{C}^1\right) \boldsymbol{Q} \left(\boldsymbol{C}^0 - \boldsymbol{C}^1\right),\end{aligned} \tag{66}$$

其中

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{N})\, \boldsymbol{Z}^{-1}\, \boldsymbol{H}(\boldsymbol{N})^{\mathsf{T}}, \tag{67}$$

with

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{N})^{\mathsf{T}} \left(f^1\boldsymbol{C}^0 + f^0\boldsymbol{C}^1\right) \boldsymbol{H}(\boldsymbol{N}). \tag{68}$$

与相互作用方向 $\boldsymbol{N} = [N_1, N_2, N_3]^{\mathsf{T}}$ 相关联的矩阵 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{N})$ 为

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{N}) = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0\\ 0 & N_2 & 0\\ 0 & 0 & N_3\\ 0 & N_3 & N_2\\ N_3 & 0 & N_1\\ N_2 & N_1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{69}$$

对于构建模块 $(l,\ p)$，相互作用方向 $\boldsymbol{N}_p^l$ 由含有角变量 θ_p^l 和 ϕ_p^l 的公式 (4) 得出。从终端层级递归应用公式 (65) 至根节点，可得到 ODMN 预测的有效刚度，即 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{ODMN}}{}_{,}^{(g)} = \boldsymbol{C}_{0\,0}^{(s)}$。公式 (66) 还展示了两种训练策略的差异。在每个构建模块中，算子取决于子节点刚度 $\boldsymbol{C}^0$ 和 $\boldsymbol{C}^1$、它们的相对体积分数 f^0 和 f^1 以及相互作用方向 $\boldsymbol{N}$。两种策略的区别在于，这些量中哪些是预先给定的，哪些是从全场数据中识别得到的。

在基于GSH的策略中，材料节点的取向 $\mathbf{g}_i$ 和权重 w_i 由式（28）规定。因此，式（63）的终端刚度 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{s}}{}_{,i}^{(s)}$ 以及式（64）的相对体积分数 $f_{l,p}^0$ 和 $f_{l,p}^1$ 在离线训练期间均保持固定，仅识别相互作用方向 $\boldsymbol{N}_p^l$。可训练参数集为

$$\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{GSH}} = \left\{\theta_p^l, \phi_p^l \;\middle|\; 0 \le l < N,\ 0 \le p < 2^l\right\}. \tag{70}$$

较高层级的子刚度仍取决于可训练的相互作用方向，因为它们由较低层级的均匀化操作得到。因此，该策略保留了GSH压缩给定的织构，仅学习重现全场有效响应所需的相互作用。

在传统策略中，材料节点的取向和权重与相互作用方向一并进行识别。此时，进入式（66）的所有量均取决于可训练参数：子刚度通过材料节点的Bunge角 $(\varphi_1^i, \Phi^i, \varphi_2^i)$ 依赖于这些参数，相对体积分数通过式（58）的权重参数 z_i 依赖于这些参数，而相互作用方向则通过 (θ_p^l, ϕ_p^l) 依赖于这些参数。可训练参数集为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{conv}} = &\left\{\theta_p^l, \phi_p^l \;\middle|\; 0 \le l < N,\ 0 \le p < 2^l\right\}\\ &\cup \left\{z_i, \varphi_1^i, \Phi^i, \varphi_2^i \;\middle|\; 1 \le i \le 2^N\right\},\end{aligned} \tag{71}$$

其中包含 $6 \cdot 2^N - 2$ 个参数，而式 (70) 中为 $2(2^N - 1)$。

2.4.5 目标函数与优化

对于这两种策略，均通过最小化 ODMN 预测的有效刚度与相应的全场均匀化刚度之间的平均相对误差（以 Frobenius 范数度量）来确定可训练参数。对于包含 N_{batch} 个样本的小批量，目标函数为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\Theta}) = \frac{1}{N_{\mathrm{batch}}} \sum_{s=1}^{N_{\mathrm{batch}}} \frac{\left\| \overline{\boldsymbol{C}}^{\mathrm{ODMN},(s)} - \overline{\boldsymbol{C}}^{\mathrm{DNS},(s)} \right\|_{\mathrm{F}}}{\left\| \overline{\boldsymbol{C}}^{\mathrm{DNS},(s)} \right\|_{\mathrm{F}}}. \tag{72}$$

此处，$\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$ 表示Frobenius范数，而 $\boldsymbol{\Theta}$ 表示 $\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{GSH}}$ 或 $\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{conv}}$，具体取决于训练策略。在验证集上计算得到的同一量在第3.3节中报告为验证误差。

总共生成 $N_{\mathrm{data}} = 500$ 个样本，其中400个用于训练，100个用于验证。两种策略采用相同的优化设置。每个网络均使用AdamW优化器训练150个训练轮次，权重衰减为零，小批量大小为 $N_{\mathrm{batch}} = 20$。学习率从 10^{-2} 开始，按照余弦退火调度逐渐降至 10^{-4} 。

2.5 非线性在线预测

离线训练后，相互作用方向 $\boldsymbol{N}_p^l$ 和体积分数 w_i 固定不变。对于传统策略，w_i 表示式（59）中的归一化权重。在线预测被表述为在给定宏观变形梯度和温度下的局部化问题。其未知量为所有构建块的相互作用向量，

$$\mathcal{A} = \left\{ \boldsymbol{a}_p^l \;\middle|\; l = 0, \ldots, N-1,\ p = 0, \ldots, 2^l - 1 \right\}, \tag{73}$$

其中，$\boldsymbol{a}_p^l$ 是构建块（l，p）的相互作用向量。相互作用向量描述网络中变形梯度的波动。在每个加载增量中，根据 Hill–Mandel宏观均匀性条件导出的平衡方程，采用 Newton–Raphson方法求得这些向量，其中非线性本构响应在材料节点处进行评估。

假设代表性体积单元处于等温状态，因此温度无需进行局部化，宏观温度T被赋予所有材料节点，

$$T_i = \overline{T}, \qquad i = 1, \ldots, 2^N, \tag{74}$$

其中，T_i 是材料节点$_i$的温度。 $\mathcal{M}$

对于给定的宏观变形梯度 $\boldsymbol{F}$，通过分层下尺度化获得材料节点 $\mathcal{M}_i$ 处的局部变形梯度 $\boldsymbol{F}_i$ ，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_i &= \overline{\boldsymbol{F}} + \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{2^l-1} \alpha_{l,p}^i \, \boldsymbol{a}_p^l \otimes \boldsymbol{N}_p^l \\ &= \overline{\boldsymbol{F}} + \sum_{l=0}^{N-1} \alpha_{l,p_l(i)}^i \, \boldsymbol{a}_{p_l(i)}^l \otimes \boldsymbol{N}_{p_l(i)}^l . \end{aligned} \tag{75}$$

此处，$\otimes$ 表示并矢积，而$\alpha_{l,\,p}^i$ 是定位系数，用于加权构建块（l，p）对材料节点 $\mathcal{M}_i$的贡献。与 $\boldsymbol{a}_p^l$不同，这些系数不是局部化问题的未知量，而是由网络拓扑和固定体积分数决定的。由于采用二叉树结构，只有当构建块（l，p）位于从根节点到该材料节点的唯一路径上时，它才会对 $\mathcal{M}_i$ 产生贡献；否则，$\alpha_{l,\,p}^i = 0$ 。该路径在每个层级 l上恰好包含一个构建块，即（l，p_l（i）），其中 p_l（i）$= \lfloor$（$i-1$）$/2^{N-l} \rfloor$，其中 $\lfloor\cdot\rfloor$表示向下取整函数。仅保留这些贡献即可得到式（75）的第二种形式。因此，每个材料节点都通过 N 个嵌套构建块与根节点相连，其局部变形梯度则由宏观变形梯度和沿该路径的 N 个相互作用向量确定。

利用第2.1节中引入的材料节点集 $\mathcal{J}_{l,\,p}^0$和 $\mathcal{J}_{l,\,p}^1$，局部化系数定义为

$$\alpha_{l,p}^i = \begin{cases} \dfrac{1}{\sum\limits_{\mathcal{M}_k \in \mathcal{J}_{l,p}^0} w_k}, & \mathcal{M}_i \in \mathcal{J}_{l,p}^0, \\ -\dfrac{1}{\sum\limits_{\mathcal{M}_k \in \mathcal{J}_{l,p}^1} w_k}, & \mathcal{M}_i \in \mathcal{J}_{l,p}^1, \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases} \tag{76}$$

局部化映射及其系数已在我们此前关于压电深度材料网络 [41]的工作中推导出来。在线预测包含三个部分：每个材料节点处的晶体塑性本构更新（第2.5.1节）、利用牛顿–拉夫森解法对相互作用向量施加Hill–Mandel条件（第2.5.2节），以及均匀化应力及其一致宏观切线（第2.5.3节）。

2.5.1 材料节点处的晶体塑性本构更新

给定式（75）的局部变形梯度 $\boldsymbol{F}_i$，通过有限应变晶体塑性本构更新，计算材料节点 $\mathcal{M}_i$ 处的第一类皮奥拉–基尔霍夫应力 $\boldsymbol{P}_i$ 及其一致切线$\partial \boldsymbol{P}_i/\partial \boldsymbol{F}_i$。该更新采用 DAMASK [15], 的本构框架，该框架作为 ODMN 的局部材料定律嵌入其中。全场 CPFFT 参考模拟采用相同的晶体塑性公式和材料参数，因此 ODMN 与 DNS 的差异仅在于均匀化方案。在本小节余下部分中，省略节点指标 i。所有量均指温度为 $T = T$的单个材料节点，各节点的内变量均独立存储和演化。时间积分和一致切线遵循 DAMASK 的实现，并在附录 A.3 中总结。

运动学 根据式（54），变形梯度采用乘法分解为 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}$。塑性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 将参考构形映射到塑性构形，后者也称为晶格构形。特征部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}$ 将塑性构形映射到无应力中间构形，并包含除滑移之外的所有非弹性变形，此处即为热膨胀。弹性部分 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$ 将中间构形映射到当前构形并产生应力。塑性变形梯度和特征变形梯度遵循以下流动法则演化

$$\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{p}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}, \qquad \dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, \tag{77}$$

其中，上方的点表示时间导数，$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$ 是在晶格构形中定义的塑性速度梯度，$\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ 是在中间构形 [15]中定义的特征速度梯度。两个速度梯度均由一般形式的本构定律给出

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}}, \boldsymbol{\xi}), \qquad \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{M}^{\mathrm{i}}, \boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, T, \dot{T}\right), \tag{78}$$

其驱动力为曼德尔应力 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}}$和 $\boldsymbol{M}_{\mathrm{i}}$，它们分别在各自构形中与 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$和 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$功共轭；还包括内部状态变量向量 $\boldsymbol{\xi}$（此处为滑移阻力）、温度 T及其变化率T。

热弹性定律 弹性响应以晶格构形中定义的第二类 Piola–Kirchhoff 应力 $\boldsymbol{S}$ 表示。本构关系由广义胡克定律给出，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S} &= \mathbb{C}^{\mathrm{c}}(T) : \boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}, \\ \boldsymbol{E}^{\mathrm{e}} &= \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}} \left[\tfrac{1}{2}\left(\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}} - \boldsymbol{I}\right)\right] \boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} \\ &= \tfrac{1}{2}\left[\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} - \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right]. \end{aligned} \tag{79}$$

其中，冒号表示双重缩并，$\boldsymbol{I}$ 是二阶单位张量，$\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}$ 是通过 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}$ [15] 拉回到晶格构形的弹性 Green–Lagrange 应变。
四阶张量 $\mathbb{C}^{\mathrm{c}}(T)$ 是晶体坐标系中的温度相关弹性刚度。对于本文所考虑的立方晶体，它具有公式（60）所示的形式，其中包含三个弹性常数 C_{11}、C_{12} 和 C_{44}。它们的温度依赖性由二次展开描述为

$$C_{ij}(T) = C_{ij}^{(0)} + C_{ij}^{(1)}\left(T - T_{\mathrm{ref}}\right) + C_{ij}^{(2)}\left(T - T_{\mathrm{ref}}\right)^2, \tag{80}$$

对于 $ij \in \{11, 12, 44\}$，其中 T_{ref} 是参考温度，$C_{ij}^{(0)}$、$C_{ij}^{(1)}$ 和 $C_{ij}^{(2)}$ 分别是常数、线性和二次系数。

塑性流动塑性变形假设源于在 N_{s} 个滑移系上发生的晶体学滑移。塑性速度梯度表示为各滑移系剪切速率的叠加，

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{s}}} \dot{\gamma}^{\alpha}\,\boldsymbol{P}^{\alpha}, \qquad \boldsymbol{P}^{\alpha} = \boldsymbol{s}^{\alpha} \otimes \boldsymbol{n}^{\alpha}, \tag{81}$$

其中， $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 是滑移系 α的剪切速率， $\boldsymbol{s}^{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{n}^{\alpha}$ 分别是其在晶体坐标系中的单位滑移方向和滑移面法向， $\boldsymbol{P}^{\alpha}$ 是相应的施密德张量。施密德张量始终带有滑移系上标，因此可与第一类皮奥拉–基尔霍夫应力 $\boldsymbol{P}$区分开来。

根据 DAMASK 的公式， [15], 塑性滑移的驱动应力近似为曼德尔应力

$$\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} = \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}} \boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} \boldsymbol{S}, \tag{82}$$

其中忽略了弹性伸长的贡献。公式 (82) 的推导见附录 A.1。在不存在晶格畸变非弹性变形的情况下， $\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}=\boldsymbol{I}$，且 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}}$ 可化简为 $\boldsymbol{S}$。

根据施密德定律，滑移系 α 上的分切应力为

$$\tau^{\alpha} = \boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} : \boldsymbol{P}^{\alpha}. \tag{83}$$

相应的剪切速率由唯象幂律关系 [1, 15],控制

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left|\frac{\tau^{\alpha}}{\xi^{\alpha}}\right|^{n} \operatorname{sgn}(\tau^{\alpha}), \tag{84}$$

其中， $\dot{\gamma}_0$ 为参考剪切速率， n 为应力指数， ξ^{α} 为滑移系 α的滑移阻力，sgn 为符号函数。

滑移阻力 $\boldsymbol{\xi} = \{\xi^{\alpha}\}_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{s}}}$ 构成硬化状态变量，并根据下式从初始值 ξ_0 向饱和值 ξ_{∞} 演化

$$\dot{\xi}^{\alpha} = h_0 \left|1 - \frac{\xi^{\alpha}}{\xi_{\infty}}\right|^{a} \operatorname{sgn}\!\left(1 - \frac{\xi^{\alpha}}{\xi_{\infty}}\right) \sum_{\beta=1}^{N_{\mathrm{s}}} h^{\alpha\beta} \left|\dot{\gamma}^{\beta}\right|, \tag{85}$$

其中， h_0 为参考硬化模量， a 为硬化指数， $h^{\alpha\beta}$ 表示滑移间相互作用系数。对于此处考虑的八面体滑移系， $h^{\alpha\beta}$ 计入自硬化，以及共面、共线、赫斯锁、可动结（两种类型）和洛默锁相互作用所引起的潜在硬化 [48, 15, 49]。

热本征变形 热膨胀作为一种本征变形引入，并根据速率定律 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}$ 演化

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} = \det\!\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right) \boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} \left[\dot{T}\,\boldsymbol{\alpha}(T)\right] \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}, \tag{86}$$

其中， $\boldsymbol{\alpha}(T)$ 是在晶体坐标系中定义的二阶热膨胀系数张量，外层变换将速率 $T\boldsymbol{\alpha}(T)$ 从晶格构形推前至中间构形，在该构形中定义了 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ [15]。这是 DAMASK 中实现的映射，其形式详见附录 A.2。对于此处考虑的立方晶体， $\boldsymbol{\alpha}(T) = \alpha_{11}\boldsymbol{I}$ 为各向同性，线性热膨胀系数为 α_{11}，因此式 (86) 化简为 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} = \det(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}})\ \alpha_{11}\dot{T}\,\boldsymbol{I}$。热膨胀张量 $\boldsymbol{\alpha}$ 及其分量 α_{11} 与局部化系数 $\alpha^{i}_{l,\ p}$ 以及滑移系索引 α无关。热膨胀与应力无关，因此 $\partial \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}/\partial \boldsymbol{M}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{0}$。式 (86) 为速率形式。因此，热本征应变沿实际温度历程从无应力初始构形累积，而不是规定为总应变 $\alpha_{11}(T - T_{\mathrm{ref}})$。在式 (74) 的等温代表性体积单元假设下，所有材料节点在一个加载增量步内经历相同的温度速率， $\dot{T} = \Delta T/\Delta t$，其中 ΔT 和 Δt 分别为宏观温度和时间的增量。

2.5.2 Hill–Mandel平衡与Newton–Raphson解法

式（73）中的相互作用向量 $\mathcal{A}$ 通过满足 Hill–Mandel宏观均匀性条件确定。用第一类皮奥拉–基尔霍夫应力和变形梯度表示，该条件为

$$\begin{aligned}
\overline{\boldsymbol{P}} : \delta\overline{\boldsymbol{F}} &= \sum_{i=1}^{2^N} w_i\, \boldsymbol{P}_i : \delta \boldsymbol{F}_i \\
&= \sum_{i=1}^{2^N} w_i\, \boldsymbol{P}_i : \Big(\delta\overline{\boldsymbol{F}} \\
&\qquad + \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{2^l-1} \alpha^{i}_{l,p}\, \delta \boldsymbol{a}^{l}_{p} \otimes \boldsymbol{N}^{l}_{p}\Big),
\end{aligned} \tag{87}$$

其中，$\overline{\boldsymbol{P}}$ 为宏观第一类皮奥拉–基尔霍夫应力，δ 表示虚变分，且 $\delta\boldsymbol{F}_i$ 处用到了式（75）。

由于变分 $\delta\boldsymbol{a}_p^l$ 是任意且相互独立的，其在公式 (87) 中的系数必须为零。因此，构建块 (l，p) 的平衡条件（残差为 $\boldsymbol{r}_p^l$）为

$$\boldsymbol{r}_p^l \equiv \sum_{i=1}^{2^N} w_i\, \alpha_{l,p}^i\, \boldsymbol{P}_i \cdot \boldsymbol{N}_p^l = \boldsymbol{0}, \tag{88}$$

对于 $l=0$、.....、$N-1$ 以及 $p=0$、.....、2^l-1。

对于数值解，将所有相互作用向量收集为全局向量

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_0^0 \\ \boldsymbol{a}_0^1 \\ \boldsymbol{a}_1^1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_{2^{N-1}-1}^{N-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3(2^N-1)}. \tag{89}$$

令 vec(·) 表示按行向量化，

$$\begin{aligned} \mathrm{vec}(\boldsymbol{F}) = [&F_{11}, F_{12}, F_{13}, F_{21}, F_{22}, \\ &F_{23}, F_{31}, F_{32}, F_{33}]^{\mathsf{T}}. \end{aligned} \tag{90}$$

对于相互作用方向 $\boldsymbol{N} = [N_1, N_2, N_3]^{\mathsf{T}}$，定义

$$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{N}) = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 \\ N_2 & 0 & 0 \\ N_3 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 \\ 0 & N_2 & 0 \\ 0 & N_3 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 \\ 0 & 0 & N_2 \\ 0 & 0 & N_3 \end{bmatrix}, \tag{91}$$

使得 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{N}) = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{N})\boldsymbol{a}$。式（75）的局部化关系随后可表示为

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{F}_i) = \mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}}) + \boldsymbol{D}_i\mathbf{A}, \tag{92}$$

其中

$$\boldsymbol{D}_i = \mathrm{row}_{(l,p)}\left(\alpha_{l,p}^i\, \boldsymbol{V}(\boldsymbol{N}_p^l)\right) \in \mathbb{R}^{9\times 3(2^N-1)}. \tag{93}$$

这里，$\mathrm{row}^{(l,p)}(\cdot)$表示对所有构建模块进行水平分块拼接（$l$、$p$）。根据式（75）的第二种形式，只有属于从根节点到 $\mathcal{M}_i$ 路径上构建模块（l、$p_l(i)$）的 N 块 $\boldsymbol{D}_i$ 才非零。利用这一表示形式，可将所有构建模块的平衡方程组装成全局残差

$$\boldsymbol{r}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{2^N} w_i\, \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}}\, \mathrm{vec}(\boldsymbol{P}_i) = \boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^{3(2^N-1)}. \tag{94}$$

这里，$\boldsymbol{P}_i = \boldsymbol{P}_i(\boldsymbol{F}_i(\mathbf{A})\overline{\ }T$、history)由第2.5.1节所述的晶体塑性本构更新得到。
式（94）中的非线性方程组采用Newton–Raphson方法求解。材料节点 $\mathcal{M}_i$ 处的一致材料切线以矩阵形式写为

$$\mathsf{L}_i \equiv \frac{\partial\, \mathrm{vec}(\boldsymbol{P}_i)}{\partial\, \mathrm{vec}(\boldsymbol{F}_i)} \in \mathbb{R}^{9\times 9}. \tag{95}$$

全局残差关于 $\mathbf{A}$ 的线性化随后给出牛顿雅可比矩阵

$$\boldsymbol{K} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \mathbf{A}} = \sum_{i=1}^{2^N} w_i\, \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}} \mathsf{L}_i \boldsymbol{D}_i. \tag{96}$$

由于每个 $\boldsymbol{D}_i$ 只有 N 个非零块，因此 $\boldsymbol{K}$ 中耦合构建模块 (l,p) 和 (l',p') 的 3×3 块，除非二者位于同一条根到节点路径上，否则为零。因此，$\boldsymbol{K}$ 由每个材料节点的 N^2 块对组装而成，而非通过稠密乘积 $\boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}}\mathbf{L}_i\boldsymbol{D}_i$ 组装。

在牛顿迭代 k 中，相互作用向量修正量由下式求得

$$\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}}^{(k)}\delta\mathbf{A}=-\boldsymbol{r}^{(k)},\qquad \mathbf{A}^{(k+1)}=\mathbf{A}^{(k)}+\eta^{(k)}\delta\mathbf{A}, \tag{97}$$

其中 $\delta\mathbf{A}$ 表示修正量，$\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}}$ 是下文定义的正则化雅可比矩阵，步长 $\eta^{(k)}\in(0,1]$ 则通过回溯线搜索确定。从 $\eta^{(k)}=1$开始，不断将步长减半，直至满足充分下降条件

$$\left\|\boldsymbol{r}\left(\mathbf{A}^{(k)}+\eta^{(k)}\delta\mathbf{A}\right)\right\|_\infty\le\left(1-c\,\eta^{(k)}\right)\left\|\boldsymbol{r}^{(k)}\right\|_\infty \tag{98}$$

其中 $\|\cdot\|_\infty$ 表示最大范数，$c=10^-$。每个牛顿步最多减半 $q_{\max}^4=8$ 次，牛顿循环最多迭代 $k_{\max}=30$次。对于每个试探步，使用公式（92）重新计算局部变形梯度，并在所有材料节点处重复进行本构更新。

为使牛顿求解更加稳定，对雅可比矩阵施加对角正则化：

$$\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}}=\boldsymbol{K}+\lambda\max_j|K_{jj}|\boldsymbol{I}, \tag{99}$$

其中 K_{jj} 是 $\boldsymbol{K}$ 的对角元素，λ 是正则化参数，基准值为 $\lambda_0=10^{-10}$。如果线搜索用尽，则保留残差最小的试探步，并将 λ 增大100倍，其激活下限为 10^{-8}，上限为 10^{-2}。每次完整牛顿步之后，也就是当 $\eta^{(k)}=1$ 时，λ向 λ_0逐步减小，每次缩小10倍。收敛后，在重新组装用于计算均匀化切线的雅可比矩阵之前，将 λ 重置为 λ_0。

牛顿迭代在满足以下条件时终止

$$\left\|\boldsymbol{r}^{(k)}\right\|_\infty\le\max\left[\epsilon_{\mathrm{abs}},\epsilon_{\mathrm{rel}}d_{\max}\max\left(p_{\max}^{(k)},p_{\mathrm{floor}}\right)\right], \tag{100}$$

其中，$d_{\max}=\max_i\|\boldsymbol{D}_i\|_{\max}$ 和 $p_{\max}^{(k)}=\max_i\|\boldsymbol{P}_i^{(k)}\|_{\max}$ 分别表示牛顿迭代 k时局部化矩阵和第一类皮奥拉–基尔霍夫应力的最大绝对分量。这里，$\|\cdot\|_{\max}$ 表示最大绝对分量，应力下限设为 $p_{\mathrm{floor}}=1$Pa。本文始终采用容差 $\epsilon_{\mathrm{abs}}=10^{-4}$ Pa 和$\epsilon_{\mathrm{rel}}=10^{-7}$。

树结构LU分解 令 $b=(l,\ p)$ 为构建块的索引，其中 $\alpha_b^i\equiv\alpha_{l,\ p}^i$ 和 $\boldsymbol{N}_b\equiv\boldsymbol{N}_p^l$。令 $\boldsymbol{K}_{bu}$表示将构建块 b 和 u 耦合起来的 $\boldsymbol{K}$ 的 3×3 块，令 $\boldsymbol{r}_b$ 表示与 b相关的残差部分。根据公式（93）和（96），

$$\boldsymbol{K}_{bu}=\sum_{i=1}^{2^N}w_i\,\alpha_b^i\,\alpha_u^i\,\boldsymbol{V}(\boldsymbol{N}_b)^{\mathsf{T}}\mathbf{L}_i\boldsymbol{V}(\boldsymbol{N}_u), \tag{101}$$

仅当 $b=u$ 或两个构建块之一是二叉树中另一个构建块的祖先节点时，该项才非零。令$\mathcal{P}(b)$表示 $b=(l,\ p)$ 的 l 祖先节点集合，即满足 $l'<l$ 的构建块 $(l',\ \lfloor p/2^{\,l-l'}\rfloor)$。

公式（97）中的线性方程组采用分块高斯消元法，从终端层级向根节点求解。对于$l=N-1$、.....、1，以及层级 l上的每个构建块 b，通过舒尔补更新消去未知量 $\delta\boldsymbol{a}_b$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}_{uv}&\leftarrow\boldsymbol{K}_{uv}-\boldsymbol{K}_{ub}\,\boldsymbol{K}_{bb}^{-1}\,\boldsymbol{K}_{bv},\\ \boldsymbol{r}_u&\leftarrow\boldsymbol{r}_u-\boldsymbol{K}_{ub}\,\boldsymbol{K}_{bb}^{-1}\,\boldsymbol{r}_b,\end{aligned}\qquad u,v\in\mathcal{P}(b). \tag{102}$$

b 的所有祖先节点都位于同一条根到节点路径上，因此它们彼此之间已经耦合。由此，该更新不会产生新的非零块，因此分解过程中不会出现填充。同一层级上的构建块彼此不耦合，可以独立消去。完成前向扫描后，通过从根节点到终端层级的回代求得修正量。对于 $l=0$、.....、$N-1$ 以及层级 l上的每个构建块 b，

$$\delta\boldsymbol{a}_b=-\boldsymbol{K}_{bb}^{-1}\Big(\boldsymbol{r}_b+\sum_{u\in\mathcal{P}(b)}\boldsymbol{K}_{bu}\,\delta\boldsymbol{a}_u\Big), \tag{103}$$

其中，$\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 表示更新后的量，根节点对应的求和为空。在实现中，公式（99）中的正则化雅可比矩阵 $\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}}$ 取代 $\boldsymbol{K}$。

CP 切线$\mathbf{L}_i$ 通常不具有大对称性，因此 $\boldsymbol{K}$ 不是对称矩阵。因此，$\boldsymbol{K}_{bu}$ 和 $\boldsymbol{K}_{ub}$均需存储，且每个 3×3 主元块 $\boldsymbol{K}_{bb}$ 都采用 LU 分解而非乔列斯基分解进行分解。

计算复杂度 每次牛顿迭代都需要在每个材料节点执行一次晶体塑性本构更新，其计算成本与网络深度 N无关，随后组装并求解式（97）。利用上述块稀疏性，可由每个材料节点的 N^2 块对组装得到 $\boldsymbol{K}$，总计算成本为 $O(2^N N^2)$ 次运算。对于第 l层的每个 2^l构建块，树结构LU分解都要执行 l^2次式（102）的块更新，因此同样需要 $O(2^N N^2)$ 次运算。求解式（107）以获得第2.5.3节的一致切线时，也采用相同的步骤。因此，每次牛顿迭代的计算成本包括本构更新所需的 $O(2^N)$ 次运算，以及网络代数所需的 $O(2^N N^2)$ 次运算。由于网络包含 2^N个材料节点，后一项的计算量随材料节点数与网络深度的平方的乘积增长。对于此处考虑的深度，网络代数仍只占迭代成本的一小部分（在 $N = 8$时约为 30 %），因此每次迭代的成本基本上与材料节点数成正比。如果将 $\boldsymbol{D}_i$和 $\boldsymbol{K}$视为稠密矩阵，每次迭代就需要 $O(2^N[3(2^N-1)]^2) = O(8^N)$ 次运算；当 $N \geq 6$时，网络代数将成为主要计算成本。在原始 DMN 中，相应的线性问题通过对构建块进行递归的自底向上均匀化和自顶向下反均质化来求解，每次牛顿迭代的成本与节点数 [27]成线性关系。对于此处采用的公式，树结构LU分解是这种递归方法的对应形式，其中未知量是所有构建块的界面向量 [28, 29]。在这种公式中，每个材料节点都与其所有 N 个祖先节点耦合，因此产生了因子 N^2，而牛顿系统是一个单一的全局线性系统。$O(8^N)$这一估算指的是对该系统进行稠密求解。

2.5.3 均匀化应力、一致宏观切线和 Abaqus 实现

局部化问题已收敛后，公式（87）中 $\delta\boldsymbol{F}$ 的系数给出了均匀化的第一类皮奥拉–基尔霍夫应力，

$$\overline{\boldsymbol{P}} = \sum_{i=1}^{2^N} w_i \, \boldsymbol{P}_i. \tag{104}$$

由于 $\sum_i w_i = 1$，公式（104）是材料节点上第一类皮奥拉–基尔霍夫应力的体积平均值。

宏观有限元问题的材料切线必须同时包含各个材料节点的本构响应，以及宏观变形梯度发生扰动后维持平衡的相互作用向量的重新分配。在已收敛状态下，

$$\boldsymbol{r}\left(\mathbf{A}(\overline{\boldsymbol{F}}), \overline{\boldsymbol{F}}\right) = \mathbf{0}. \tag{105}$$

对平衡方程关于 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{F})$ 求导可得

$$\boldsymbol{K}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}})} + \sum_{i=1}^{2^N} w_i \, \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}} \mathsf{L}_i = \mathbf{0}, \tag{106}$$

其中， $\boldsymbol{K}$ 是公式（96）中定义的牛顿雅可比矩阵。因此，

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}})} = -\boldsymbol{K}^{-1} \sum_{i=1}^{2^N} w_i \, \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}} \mathsf{L}_i. \tag{107}$$

根据公式（92），局部变形梯度对宏观变形梯度的灵敏度为

$$\frac{\partial \,\mathrm{vec}(\boldsymbol{F}_i)}{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}})} = \boldsymbol{I}_9 + \boldsymbol{D}_i \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}})}, \tag{108}$$

其中， $\boldsymbol{I}_9$ 是 9×9 单位矩阵。因此，以第一类皮奥拉–基尔霍夫应力和变形梯度表示的一致宏观切线为

$$\begin{aligned} \overline{\mathsf{L}} &\equiv \frac{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{P}})}{\partial \,\mathrm{vec}(\overline{\boldsymbol{F}})} \\ &= \sum_{i=1}^{2^N} w_i \, \mathsf{L}_i \\ &\quad - \Big(\sum_{i=1}^{2^N} w_i \, \mathsf{L}_i \boldsymbol{D}_i\Big) \boldsymbol{K}^{-1} \Big(\sum_{j=1}^{2^N} w_j \, \boldsymbol{D}_j^{\mathsf{T}} \mathsf{L}_j\Big). \end{aligned} \tag{109}$$

式（109）中的第一项是在相互作用向量固定时的本构响应，第二项则考虑了相互作用向量的重新分布。要对已收敛的局部化问题进行一致线性化，就需要第二项。

方程（107）和（109）采用精确的牛顿雅可比矩阵 $\boldsymbol{K}$ 表示。在实现中，最终灵敏度求解所用的雅可比矩阵会在收敛后重新组装，并将正则化参数恢复为基准值 $\lambda_0 = 10^{-10}$。这样可以避免将针对困难牛顿迭代的临时阻尼计入均匀化切线，同时仅对最终线性求解保留轻微正则化。

ODMN 在 Abaqus/Standard 的每个宏观积分点处通过用户材料子程序（UMAT）实现。已收敛的局部化解给出 $\boldsymbol{P}$ 和四阶切线 $\mathbb{L} = \partial \boldsymbol{P}/\partial \boldsymbol{F}$，后者是L的张量形式。二者都必须转换为 Abaqus 所要求的应力度量和本构雅可比矩阵。

基尔霍夫应力 $\boldsymbol{\tau}$ 和柯西应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 可表示为

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} = \overline{\boldsymbol{P}}\,\overline{\boldsymbol{F}}^{\mathsf{T}}, \qquad \overline{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{\overline{J}}\,\overline{\boldsymbol{\tau}}, \qquad \overline{J} = \det \overline{\boldsymbol{F}}, \tag{110}$$

柯西应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 通过 STRESS 数组返回。

对于有限变形连续体单元，Abaqus/Standard所需的本构雅可比矩阵与基尔霍夫应力的Jaumann客观率相关。在增量形式下，

$$\delta^{\nabla J}\overline{\boldsymbol{\tau}} = \overline{J}\,\overline{\mathbb{C}}^{\mathrm{ABQ}} : \delta\overline{\boldsymbol{D}}, \tag{111}$$

其中

$$\delta^{\nabla J}\overline{\boldsymbol{\tau}} = \delta\overline{\boldsymbol{\tau}} - \delta\overline{\boldsymbol{W}}\,\overline{\boldsymbol{\tau}} + \overline{\boldsymbol{\tau}}\,\delta\overline{\boldsymbol{W}}, \tag{112}$$

and

$$\delta\overline{\boldsymbol{H}} = \delta\overline{\boldsymbol{F}}\,\overline{\boldsymbol{F}}^{-1} = \delta\overline{\boldsymbol{D}} + \delta\overline{\boldsymbol{W}}. \tag{113}$$

这里, $\overline{\mathbb{C}}^{\mathrm{ABQ}}$ 是Abaqus所需的本构雅可比矩阵， $\delta^{\nabla J}\boldsymbol{\tau}$ 是基尔霍夫应力的Jaumann增量， $\delta\boldsymbol{D}$ 和 $\delta\boldsymbol{W}$ 分别是增量位移梯度 $\delta\boldsymbol{H}$的对称部分和反对称部分。这些符号与局部化矩阵 $\boldsymbol{D}_i$ 以及公式（69）中的矩阵 $\boldsymbol{H}$（$\boldsymbol{N}$）无关。

基尔霍夫应力的线性化为

$$\delta\overline{\boldsymbol{\tau}} = \delta\overline{\boldsymbol{P}}\,\overline{\boldsymbol{F}}^{\mathsf{T}} + \overline{\boldsymbol{P}}\,\delta\overline{\boldsymbol{F}}^{\mathsf{T}}. \tag{114}$$

将四阶ODMN切线写成分量形式为

$$\overline{\mathbb{L}}_{iAkB} = \frac{\partial \overline{P}_{iA}}{\partial \overline{F}_{kB}}, \tag{115}$$

其中，小写和大写指标分别表示当前构形和参考构形，并约定对重复指标求和；利用 $\delta\boldsymbol{F} = \delta\boldsymbol{H}\,\boldsymbol{F}$，公式（114）变为

$$\delta\overline{\tau}_{ij} = \overline{\mathbb{G}}_{ijkl}\,\delta\overline{H}_{kl} + \overline{\tau}_{il}\,\delta\overline{H}_{jl}, \tag{116}$$

其中

$$\overline{\mathbb{G}}_{ijkl} = \overline{F}_{jA}\,\overline{\mathbb{L}}_{iAkB}\,\overline{F}_{lB} \tag{117}$$

是均匀化一致的 ODMN 切线的空间推前。

将 $\delta\boldsymbol{H} = \delta\boldsymbol{D} + \delta\boldsymbol{W}$代入式（116），并将所得结果代入式（112），可得到自旋相关项$\mathbb{G}$：$\delta\boldsymbol{W} - \delta\boldsymbol{W}\,\boldsymbol{\tau}$。由于均匀化响应具有客观性，该项为零，因此纯自旋增量给出 $\delta\boldsymbol{P} = \delta\boldsymbol{W}\,\boldsymbol{P}$。其余项给出

$$\delta^{\nabla J}\overline{\tau}_{ij} = \left(\overline{\mathbb{G}}_{ijkl} + \overline{\tau}_{ik}\delta_{jl}\right)\delta\overline{D}_{kl}, \tag{118}$$

其中 δ_{jl} 是克罗内克δ。由于 $\delta^{\nabla J}\boldsymbol{\tau}$和 $\delta\boldsymbol{D}$ 均为对称张量，式（118）中四阶张量的次对称部分才有贡献。用 sym^{ij} 表示关于指标对（i，j）的对称化，

$$\overline{J}\,\overline{\mathbb{C}}^{\mathrm{ABQ}}_{ijkl} = \mathrm{sym}_{ij}\,\mathrm{sym}_{kl}\left(\overline{\mathbb{G}}_{ijkl} + \overline{\tau}_{ik}\delta_{jl}\right), \tag{119}$$

或者，等价地，

$$\begin{aligned}\overline{\mathbb{C}}^{\mathrm{ABQ}}_{ijkl} = \frac{1}{4\overline{J}}\Big(&\overline{\mathbb{G}}_{ijkl} + \overline{\mathbb{G}}_{jikl} + \overline{\mathbb{G}}_{ijlk} + \overline{\mathbb{G}}_{jilk}\\ &+ \delta_{ik}\overline{\tau}_{jl} + \delta_{il}\overline{\tau}_{jk} + \delta_{jk}\overline{\tau}_{il} + \delta_{jl}\overline{\tau}_{ik}\Big).\end{aligned} \tag{120}$$

张量 $\mathbb{C}^{\mathrm{ABQ}}$被映射为 Abaqus Voigt 表示，并通过 DDSDDE 数组返回。因此，应力和 DDSDDE 量均来自同一个已收敛的局部化状态，且雅可比矩阵与 ODMN 线性化以及 Abaqus/Standard 的客观应力率保持一致。这种一致性是全局牛顿迭代实现二次收敛所必需的。

算法1总结了给定宏观状态下的局部化求解。当收敛困难仅限于单个积分点时，该实现会避免全局回退有限元时间增量，因为全局回退会重复整个宏观增量，包括平衡迭代以及所有积分点处的本构计算。如果某个积分点处的完整增量局部化求解失败，则首先通过对规定的加载路径进行自适应细分，在局部恢复收敛。只有在局部恢复失败时，才会向 Abaqus/Standard 请求全局回退。

对于局部子步进，令 $s \in [0,1]$ 表示已完成的规定宏观增量比例，令 Δs 表示下一个局部子增量的大小。在每个子增量内，变形梯度和温度按照相同的路径比例进行插值，并将时间增量缩放为 Δs，以保持施加的加载速率不变。算法2总结了积分点处完整的本构更新，包括局部子步进，以及转换为 Abaqus/Standard 所需的应力和雅可比矩阵。回退因子、增长因子和最小子增量分别为 $\beta_{\mathrm{cut}} = 0.25$、$\beta_{\mathrm{grow}} = 1.5$ 和 $\Delta s_{\min} = 10^{-3}$。

3 所提框架的验证

本节通过与两个因科镍 625（IN625）代表性体积单元的全场CPFFT模拟进行比较，验证 GSH-ODMN。第 3.1 节介绍代表性体积单元、DNS 与材料节点共用的本构模型、加载方案以及误差度量。第 3.2 节考察 GSH 截断阶数 L 对紧凑织构的影响。第 3.3 节比较两种离线训练策略。第 3.4 节和第 3.5 节评估宏观应力响应和织构演化的在线预测，第 3.6 节则报告计算成本。

3.1 参考代表性体积单元、本构模型与加载方案

两个 IN625 周期性代表性体积单元取自 Prabhu 和 Diehl [49]。两者均包含 1000 个晶粒，在$48 \times 48 \times 48$ 体素网格上离散，并使用 DAMASK [15]通过对随机种子点进行 Voronoi 镶嵌生成。等轴代表性体积单元由球状晶粒构成，取向从旋转群中均匀抽取，因此其织构近乎随机。与均匀取向分布函数的偏差源于 1000 个晶粒的抽样波动。轧制代表性体积单元的晶粒沿法向压扁，长宽比约为 3；其理想化轧制织构属于面心立方金属，由 S、铜和黄铜组分叠加随机背景构成。图 2 展示了这两种微观结构。晶粒体积差异很大。等轴代表性体积单元中，每个晶粒所含体素数为 17 至 350；轧制代表性体积单元中则为 13 至 385，两种情况下的变异系数均约为 0.4。因此，式（15）中的体积分数 v_q 按晶粒的体素数成比例取值，使压缩目标成为网格上实现的体积加权取向分布函数。

DNS和ODMN材料节点采用第2.5.1节中的本构模型及表1所列参数。这些参数是Prabhu和Diehl [49] 针对IN625拟合得到的，采用了基于物理的相互作用系数；温度相关弹性常数取自同一项研究。塑性滑移发生在十二个 $\{111\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ 滑移系上。热膨胀为各向同性，$\alpha_{11} = 1.28 \times 10^{-5}\,\mathrm{K}^{-1}$。在293.15 K至593.15 K之间，弹性常数 C_{11} 和 C_{44} 分别降低约7%和9%，而在此模型中，滑移阻力与温度无关。

参考解使用DAMASK的谱求解器（3.0.2版本），在完整的 48^3 网格上通过定点迭代方案 [13, 14] 计算，并在台式工作站（Intel Core i9-13900K）上使用开放多处理（OpenMP）线程。下文所述的温度循环方案中，DAMASK的交错热求解器通过均匀的体积热源升高和降低温度，使代表性体积单元的温度保持空间均匀，与式（74）一致。第2.4节中的线弹性训练数据由同一求解器生成：对每个采样的单晶刚度施加六个独立载荷工况，并根据体积平均应力和应变组装均匀化刚度。

ODMN 的预测采用第 2.5.3 节中的用户子程序实现，在 Abaqus/Standard 中通过单个减缩积分六面体单元获得。该单元的各面受到约束而保持平面，因此其经历的均匀变形梯度与 DNS 相同。ODMN 在同一工作站的一个中央处理器（CPU）核心上运行。

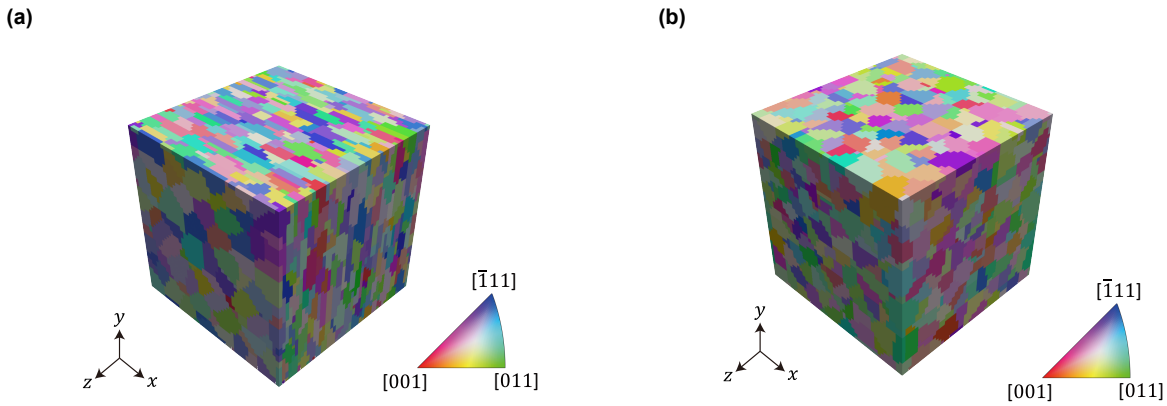

图2：(a) 轧制代表性体积单元和 (b) 等轴代表性体积单元的初始微观结构，每个均由 48^3 个体素和 1000 个晶粒组成。颜色依据加载方向（试样轴 x_1）在晶体参考系中的反极图确定。

表1：DNS 和 ODMN 材料节点中使用的 IN625 本构参数（采用 Prabhu 和 Diehl 的拟合 [49]）。

参数	符号	数值
$T_{\mathrm{ref}} = 293.15$K时的弹性常数	$C_{11}^{(0)}, C_{12}^{(0)}, C_{44}^{(0)}$	251.0、150.0、123.7 GPa
线性温度系数	$C_{11}^{(1)}, C_{12}^{(1)}, C_{44}^{(1)}$	-49.67、-3.714、-36.21 兆帕/K
二次温度系数	$C_{11}^{(2)}, C_{12}^{(2)}, C_{44}^{(2)}$	-33.27、-7.414、-8.017 kPa/K^2
滑移系	N_{s}	12, $\{111\}\langle 1\bar{1}0\rangle$
参考剪切速率	$\dot{\gamma}_0$	10^{-3} s^{-1}
应力指数	n	40
初始滑移阻力	ξ_0	152.4 兆帕
饱和滑移阻力	ξ_∞	1200 兆帕
参考硬化模量	h_0	1.328 吉帕
硬化指数	a	1.500
相互作用系数[a]	$h^{\alpha\beta}$	1.000, 1.000, 5.508, 0.361, 0.836, 0.738, 1.377
热膨胀系数	α_{11}	1.28×10^{-5} K^{-1}

[a] Madec 和 Kubin 系数 [48], 依次为自作用、共面、共线、Hirth 锁、可滑移结点 I、可滑移结点 II、Lomer 锁。

考虑两种加载方案。两者均沿试样轴 x_1 进行应变控制单轴拉伸，宏观变形梯度的轴向分量 F_{11} 采用 LUR 路径，

$$\begin{aligned} &\overline{F}_{11}: \ 1.00 \to 1.10 \to 1.05 \to 1.15, \\ &\left|\dot{\overline{F}}_{11}\right| = 10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}. \end{aligned} \tag{121}$$

在等温方案中，路径在 293.15 K 下用时 250 s 完成，其中 0 至 100 s 加载，100 至 150 s 部分卸载，150 至 250 s 再加载。在温度循环方案中，相同的三个变形阶段由两个固定 F_{11} 的保持阶段隔开，期间温度以 3 K/s 的速率变化。具体顺序为：在 293.15 K 下加载（0 至 100 s），加热至 593.15 K（100 至 200 s），在 593.15 K 下卸载（200 至 250 s），冷却至 293.15 K（250 至 350 s），并在 293.15 K 下再加载（350 至 450 s）。因此，每个变形阶段均为等温过程，所有温度变化均在固定变形下进行。部分卸载至 $F_{11} = 1.05$ 会使 RVE 发生反向屈服，因此也能检验活跃滑移系上的反向滑移，以及加载过程中累积的硬化状态。

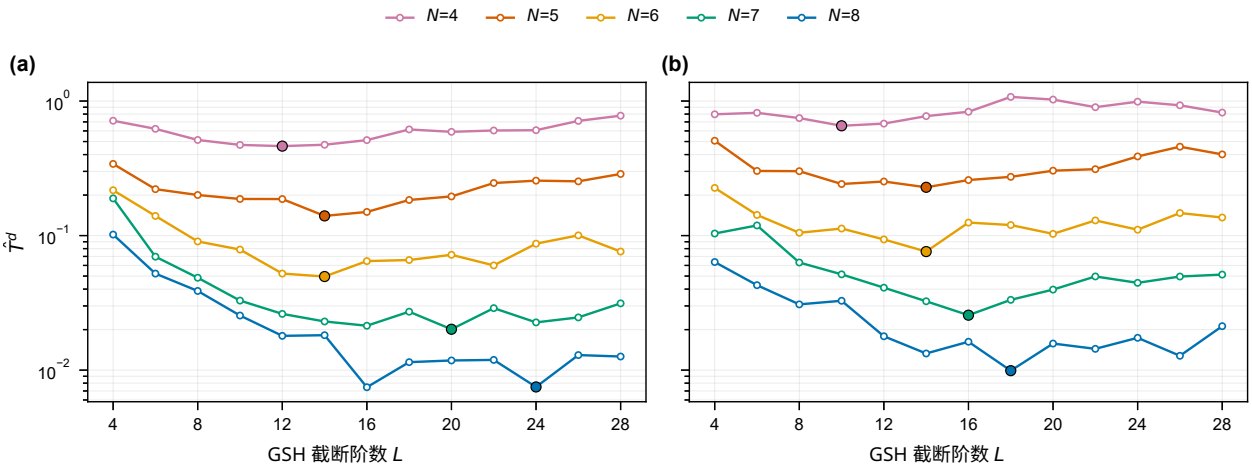

图3：紧凑织构相对于体积加权的1000晶粒参考的织构差异指数 $\hat{T}^d$，随 2^N 个取向的 GSH 截断阶数 L 变化：(a) 轧制代表性体积单元，(b) 等轴代表性体积单元。实心符号标出表2采用的截断阶数。

通过以下时刻的轴向应力 P_{11} 的相对误差评估宏观响应： t,

$$e(t) = \frac{\left|\overline{P}_{11}^{\mathrm{ODMN}}(t) - \overline{P}_{11}^{\mathrm{DNS}}(t)\right|}{\max_t \left|\overline{P}_{11}^{\mathrm{DNS}}(t)\right|}, \tag{122}$$

报告其在加载历程中的平均值和最大值。织构之间采用归一化织构差异指数 [50]进行比较

$$\hat{T}^d = \frac{\|f - f_{\mathrm{ref}}\|^2}{\|f_{\mathrm{ref}}\|^2}, \tag{123}$$

其中， f 是待评估的取向分布函数， f_{ref} 是参考取向分布函数，两者均由加权取向集重构； $\|\cdot\|$ 是取向空间上的 L^2 范数。两个取向分布函数均使用 MTEX 5.11.1 [51] 和半宽为 10° 的德拉瓦莱·普桑核进行估计。在第3.3–3.5节中，将 ODMN 织构与相应的 DNS织构进行比较。在第3.2节中，参考对象是1000晶粒代表性体积单元的体积加权织构。对于 DNS，取向分布函数由 48^3 体素取向以相同权重重构。对于 ODMN，取向分布函数由 2^N材料节点取向及权重 w_i重构。每个体素或材料节点的当前取向由式（57）中的旋转 $\boldsymbol{R}_i(t)$给出。$\hat{T}^d = 0$ 表示两个取向分布函数完全相同，而$\hat{T}^d = 1$ 表示它们之差的 L^2 范数等于参考取向分布函数的 L^2 范数。

3.2 GSH 截断阶数的影响

采用第2.2节中的程序，将1000 晶粒代表性体积单元的体积加权织构压缩为 $N_m = 2^N$个取向，适用于 $N = 4$，……，8，以及从 $L = 4$ 到 $L = 28$的所有偶数截断阶数。图3显示了每个紧凑织构相对于其1000晶粒参考织构的织构差异指数。

可以观察到两种趋势。首先，表2所列各深度下的最小$\hat{T}^d$，随着 N每增加一级而降低2.5–3.3倍。其次，$\hat{T}^d$随 L呈非单调变化。对于每个 N，某一中间阶数使$\hat{T}^d$达到最小，而保留更高阶系数反而会增大误差。其原因在于，随着阶数提高，式(23)的拟合残差越来越多地由高阶系数主导，而有限数量的取向无法重现这些高阶系数，从而降低了对低阶系数的拟合效果。低阶系数描述主要的织构组分，并在很大程度上决定均匀化弹性响应。随着 N 增加，可用于表示取向分布函数精细特征的取向数量增多。因此，最佳阶数会根据代表性体积单元的不同，从 $L = 10$或12（当 $N = 4$ 时）转移到 $L = 16$ 或18（当 $N = 8$时）。

表2列出了所采用的截断阶数及相应的织构差异指标。所采用的阶数是图3中的最小值。对于 $N = 8$处的轧制代表性体积单元，在 $L = 16$ 和 $L = 24$处出现两个相等的最小值，二者均对应$\hat{T}^d = 0.0075$；为保留尖锐轧制织构中更多的高阶成分，采用了较高的阶数。

表2：所采用的GSH 截断阶数 L 以及相对于体积加权的1000晶粒参考的紧凑织构的织构差异指数$\hat{T}^d$。

	轧制代表性体积单元		等轴代表性体积单元	
N	L	$\hat{T}^d$	L	$\hat{T}^d$
4	12	0.4623	10	0.6549
5	14	0.1401	14	0.2285
6	14	0.0496	14	0.0761
7	20	0.0201	16	0.0256
8	24	0.0075	18	0.0099

表3：离线训练结果：可训练参数数量 n_Θ、均匀化刚度的最佳验证误差、训练墙钟时间，以及训练后的网络在 $t = 0$ 处相对于DNS织构的织构差异指数 $\hat{T}^d$。

		传统ODMN				GSH-ODMN			
RVE	N	n_Θ	误差 [%]	time	$\hat{T}^d$	n_Θ	误差 [%]	time	$\hat{T}^d$
轧制	4	94	0.1229	5分钟4秒	1.0564	30	0.8015	2分钟35秒	0.4623
轧制	6	382	0.0167	22 分 13 秒	0.2551	126	0.0284	11 分 0 秒	0.0496
轧制	8	1534	0.0077	3 小时 0 分 18 秒	0.0964	510	0.0067	1 小时 0 分 53 秒	0.0075
等轴晶	4	94	0.1579	5分钟4秒	1.3525	30	0.4102	2分钟37秒	0.6549
等轴晶	6	382	0.0220	22分钟5秒	0.2536	126	0.0232	11分钟4秒	0.0761
等轴晶	8	1534	0.0104	3小时0分21秒	0.0785	510	0.0076	1小时16分3秒	0.0099

材料节点数量增加时，紧凑织构会显著改善。在 $N = 4$ （16个取向）时，轧制代表性体积单元的 $\hat{T}^d$ 为0.46，等轴代表性体积单元的值为0.65。在 $N = 8$ （256个取向）时，两个代表性体积单元的该值均低于0.01。对于采用的截断阶数，每次压缩耗时不到2秒，整个扫描中耗时最长的一次压缩为35秒。因此，采用下文验证中相同的织构差异指数评估 L，完整扫描仅需几分钟。当材料节点数量较少时，这类扫描最有用，因为此时最佳截断阶数远低于所考虑的最高阶数。

3.3 离线训练结果

使用第2.4节的数据集和设置，对每个代表性体积单元分别在 $N = 4$、6和8下训练两种策略。GSH- ODMN使用表2中的紧凑织构作为其材料节点固定的取向和权重。图4展示了训练和验证历史。表3列出了可训练参数数量 n_Θ、最佳验证误差，以及在台式工作站（Intel Core i9-13900K）上的训练墙钟时间。使用同一台工作站为一个代表性体积单元生成数据集约需4小时，其中包括2.7小时的CPFFT模拟（每个样本包含六种载荷工况，同时运行六个四线程模拟）以及1.4小时的有效刚度张量提取。表中还列出了训练后的网络在 $t = 0$ 下相对于DNS织构的织构差异指数 $\hat{T}^d$。

对于两种策略，离线误差均随着 N 而降低。在 $N = 4$时，GSH-ODMN的验证误差高于传统ODMN（轧制代表性体积单元分别为0.80%和0.12%，等轴代表性体积单元分别为0.41%和0.16%）。在16个指定取向下，只有15个相互作用方向（30个参数）可训练。因此，与有94个自由参数的传统网络相比，该网络在匹配有效刚度方面的自由度较低。在 $N = 6$ 时，差距缩小（分别为0.028%和0.017%，以及0.023%和0.022%）；在 $N = 8$ 时，GSH-ODMN的精度略高（分别为0.0067%和0.0077%，以及0.0076%和0.0104%）。由于训练的参数仅占三分之一，GSH-ODMN的训练时间为传统方法的三分之一到二分之一。

两种策略在所表征的织构方面差异最大（图5）。对于 GSH-ODMN，初始织构按构造即为紧凑织构，其 $\hat{T}^d$ 与表2中的值一致。传统 ODMN 仅根据弹性数据学习其取向和权重，其织构差异指标大出两至十三倍。其织构误差也随 N 下降得更慢，并且在 $N = 8$时仍接近 0.1，尽管弹性验证误差仅约为 0.01%。这是预期之中的，因为决定立方多晶体均匀化弹性刚度的取向平均，仅通过最高至调和阶数 $l = 4$ [46, 45]的 GSH 系数取决于 ODF。因此，高阶织构含量截然不同的取向集合也可能产生几乎相同的弹性响应。

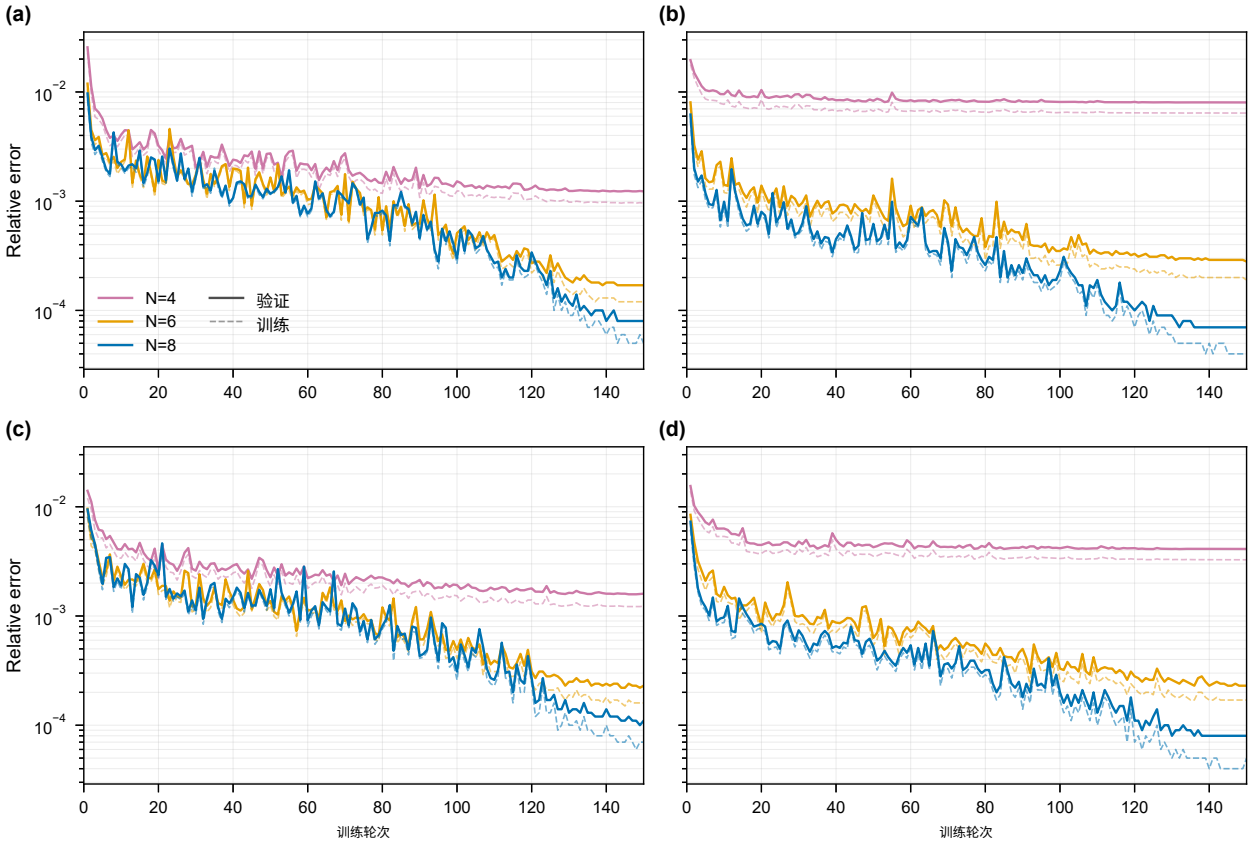

图4：轧制和等轴晶代表性体积单元离线训练过程中均匀化刚度的训练误差（虚线）和验证误差（实线）：(a、c) 传统ODMN，(b、d) GSH-ODMN，其中 (a、b) 对应轧制代表性体积单元，(c、d) 对应等轴代表性体积单元。

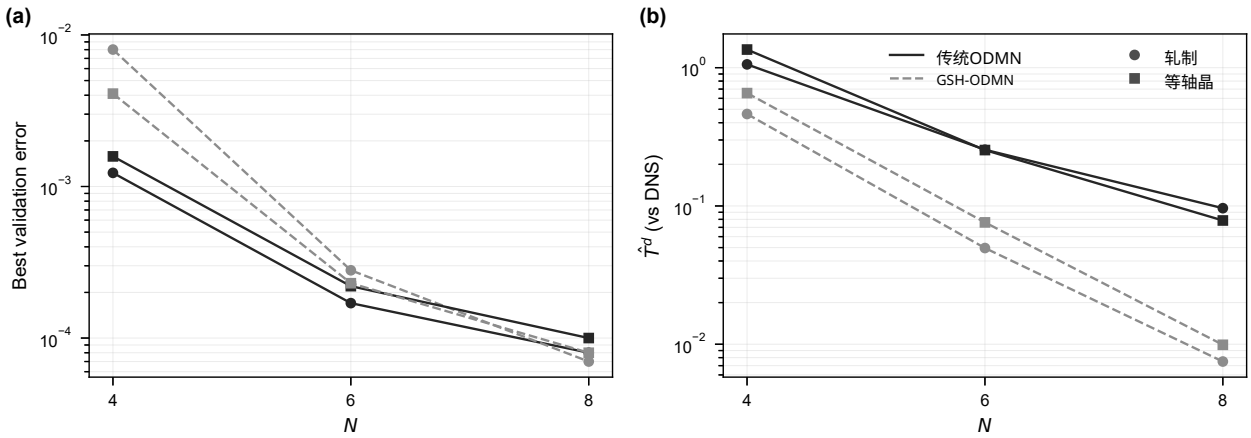

图5：离线训练结果与网络深度 N 的关系：(a) 均匀化刚度的最佳验证误差；(b) 训练后的网络在 $t = 0$ 时相对于 DNS 织构的织构差异指数 $\hat{T}^d$。线型区分训练策略，标记区分代表性体积单元。

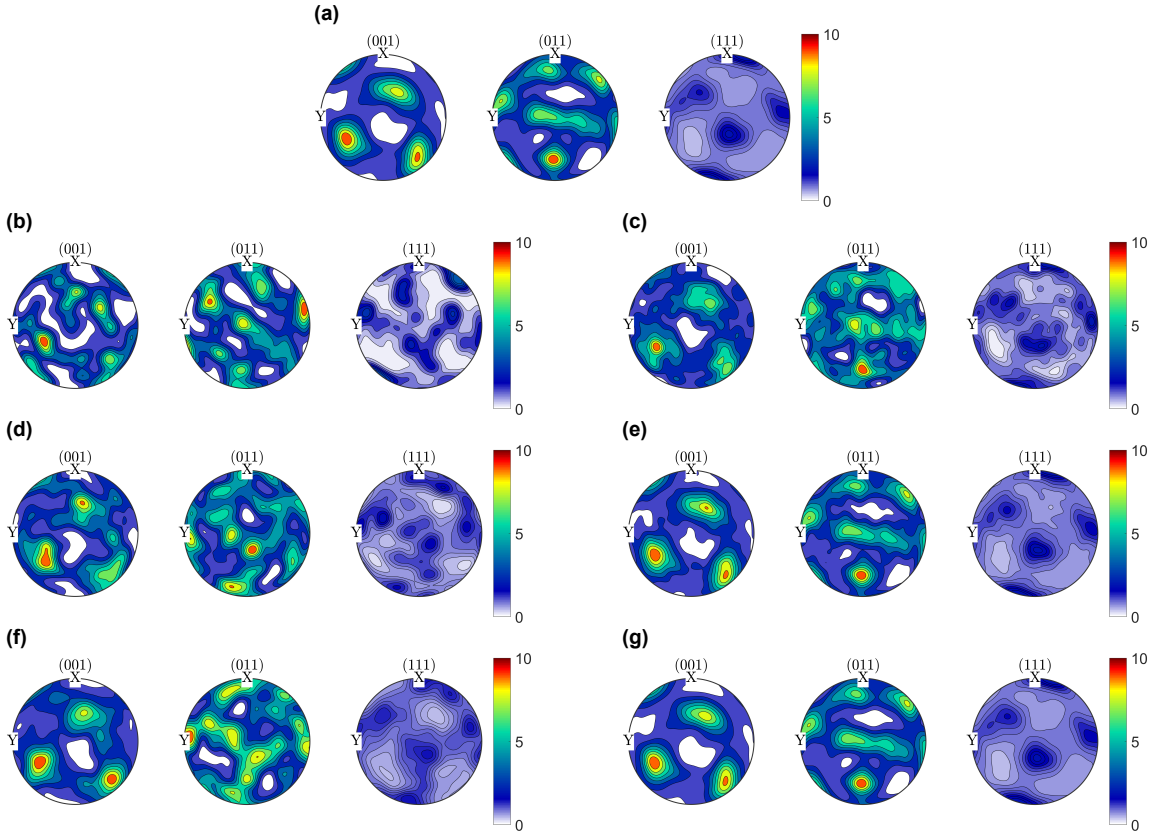

图 6：使用等面积投影绘制的轧制代表性体积单元初始织构的 (001)、(011) 和 (111) 极图，强度标尺固定为 0–10 随机分布倍数（m.r.d.）。面板 (a) 显示按体积加权的 1000 晶粒参考结果，其余面板显示经训练的网络：$N = 4$ (b、c)、$N = 6$ (d、e) 和 $N = 8$ (f、g)。左列 (b、d、f) 对应传统 ODMN，右列 (c、e、g) 对应 GSH-ODMN。

弹性训练数据无法区分这类织构，即使刚度误差趋近于零，伪高阶分量仍会存在。

图 6 和图 7 展示了初始织构的极图。对于轧制代表性体积单元，GSH-ODMN 能够捕捉 $N = 4$ 处主峰的位置及其在 $N = 6$ 处的相对强度，并在 $N = 8$ 处准确再现极图模式。传统 ODMN 在所有深度下都呈现伪最大值。对于近似随机等轴代表性体积单元，传统 ODMN 在所有深度下都将取向集中到少数几个尖锐分量，而 GSH-ODMN 则逐步恢复参考织构的弥散特征，并在 $N = 8$ 处准确再现该特征。

3.4 在线预测：均匀化应力响应

图8和图9比较了两种加载方案下沿 LUR 路径预测的轴向应力 P_{11} 与 DNS 结果。图10展示了温度循环方案下随时间变化的响应，以及规定的温度历程。表4列出了针对代表性体积单元、训练策略、网络深度和加载方案的全部24种组合，按照式（122）计算的平均误差和最大误差。

对于等温方案，所有网络都再现了响应的主要定性特征，包括加载期间的弹塑性转变、部分卸载期间在约 -1.1 吉帕处发生的反向屈服，以及在 $F_{11} = 1.15$ 时再加载至1.3–1.4吉帕。在温度循环方案中，固定变形下加热会使轴向应力从约0.9吉帕降至接近零。这种松弛主要源于热膨胀，它几乎抵消了轴向弹性应变。热应变为 $\alpha_{11}\Delta T = 0.38\,\%$，而对于220–240吉帕的多晶体模量，0.9吉帕下的弹性应变约为0.4%。弹性常数的温度诱导软化会进一步降低应力。随后在固定变形下冷却，会使应力再次升高约0.8吉帕。GSH-ODMN 捕捉到了

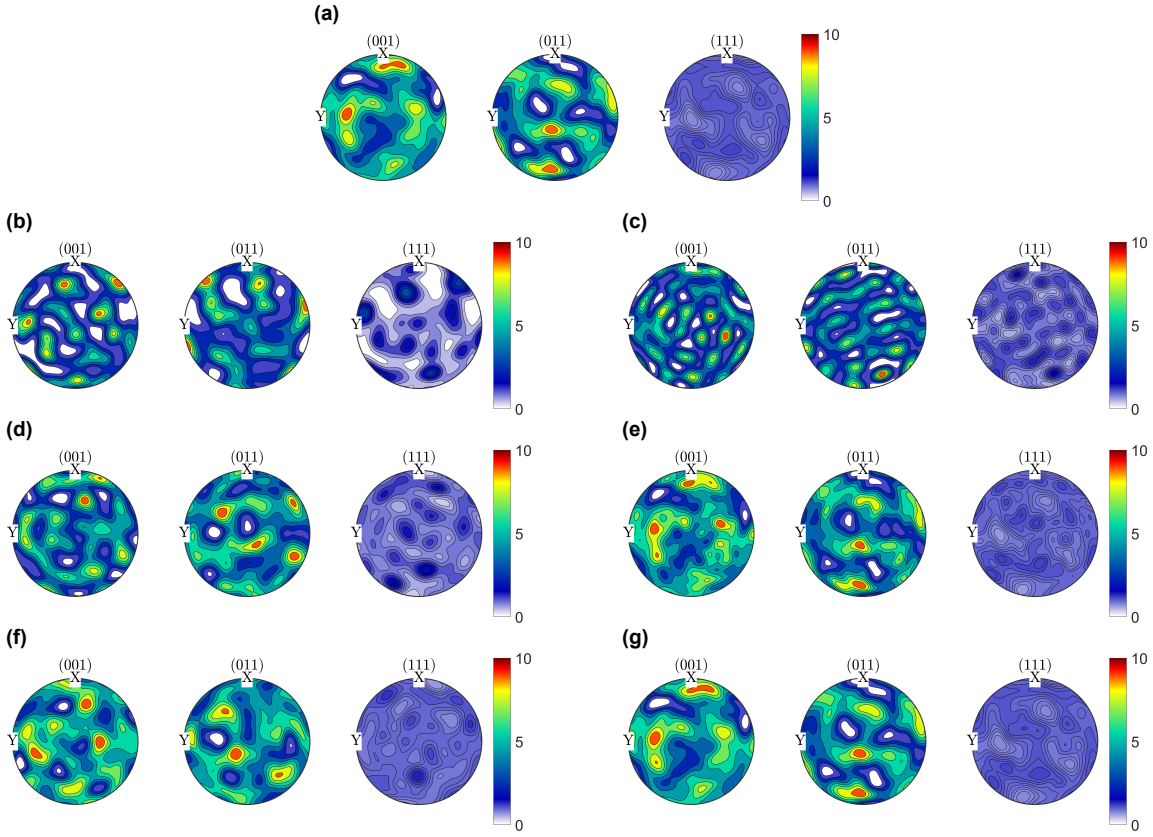

图7：采用等面积投影和固定强度标度（0–10随机分布倍数（m.r.d.）），展示等轴代表性体积单元的初始织构的（001）、（011）和（111）极图。面板(a)展示体积加权的1000晶粒参考，其余面板展示训练后的网络：$N = 4$ (b, c)、$N = 6$(d, e)和 $N = 8$ (f, g)。左列(b, d, f)对应传统ODMN，右列(c, e, g)对应GSH-ODMN。

表4：293.15 K下等温方案和温度循环方案的加载历程中，相对应力误差 $e(t)$的平均值和最大值。

RVE	策略	N	293.15 K		温度循环	
			平均值 [%]	最大值 [%]	平均值 [%]	最大值 [%]
轧制	传统	4	1.854	3.019	1.929	3.409
轧制	传统	6	1.826	2.684	1.809	2.707
轧制	传统	8	1.160	1.979	1.105	1.974
轧制	GSH	4	1.430	3.691	1.267	3.653
轧制	GSH	6	0.185	1.192	0.115	1.236
轧制	GSH	8	0.449	0.777	0.472	0.610
等轴晶	传统	4	3.327	5.304	3.512	5.268
等轴晶	传统	6	2.012	3.216	2.135	3.118
等轴晶	传统	8	1.282	2.041	1.278	2.044
等轴晶	GSH	4	2.916	5.894	2.769	5.901
等轴晶	GSH	6	0.683	1.419	0.565	1.280
等轴晶	GSH	8	0.060	0.335	0.059	0.644

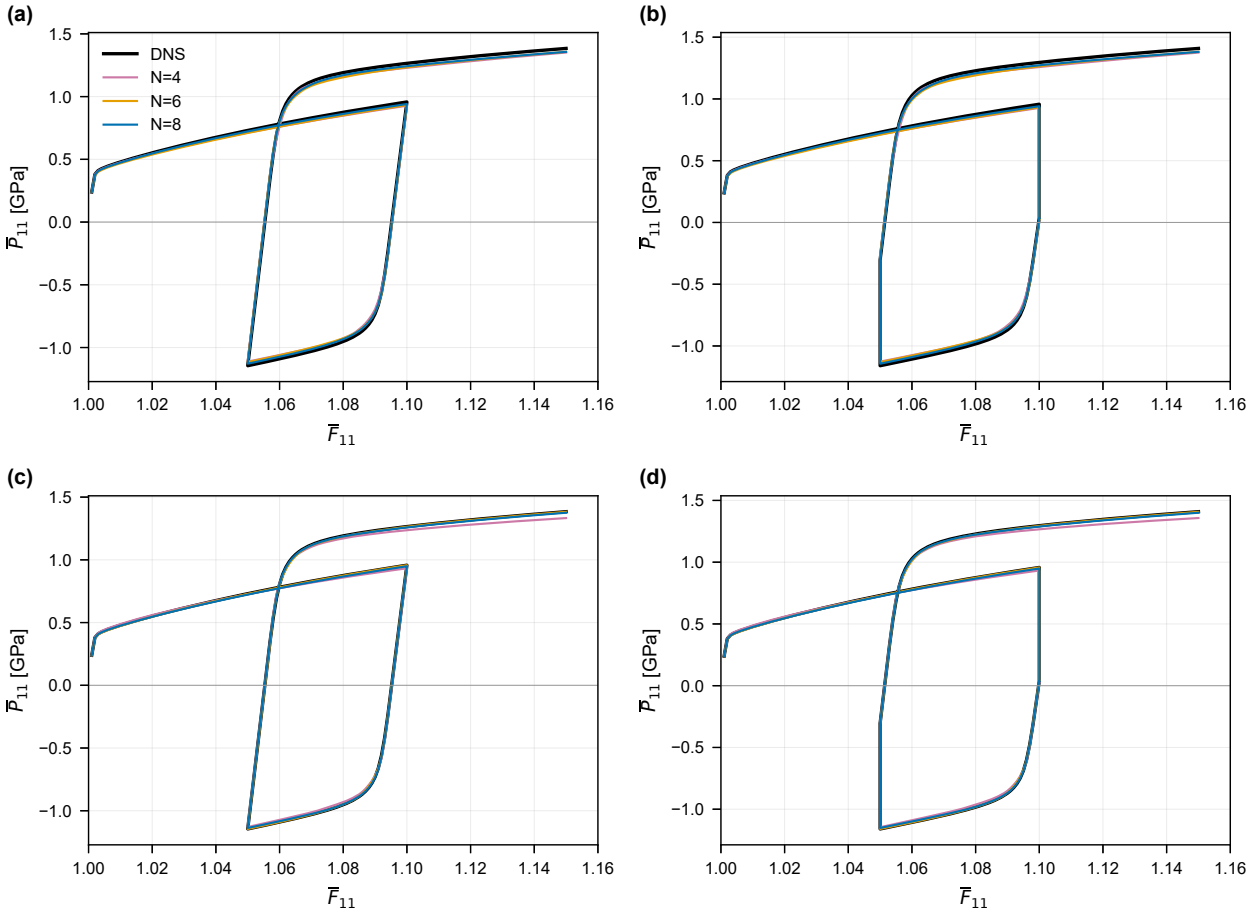

图8：轧制代表性体积单元沿LUR加载路径的轴向应力 P_{11} 与 F_{11} 的关系，对比DNS与ODMN在 $N = 4$、6和8时的预测。面板(a、b)展示传统ODMN，(c、d)展示GSH-ODMN。面板(a、c)对应293.15 K下的等温方案，(b、d)对应温度循环方案。

这些热力学转变的预测精度与等温响应相当。对于每种网络，两种方案的平均误差相差不到0.2个百分点。

在表4列出的十二组比较中，GSH-ODMN的平均误差均低于传统ODMN。在 $N = 4$时，改进幅度不大，两种策略的平均误差都高于1%。GSH-ODMN指定的16个取向还导致其在弹塑性转变附近的最大误差略大。在 $N = 6$ 和8时，优势则显著得多。例如，对于 $N = 6$的轧制代表性体积单元，在等温加载下，平均误差从1.826%降至0.185%；在温度循环下，则从1.809%降至0.115%。对于 $N = 8$的等轴代表性体积单元，误差分别从1.282%降至0.060%，以及从1.278%降至0.059%。这些GSH-ODMN数值来自单次实现。其对叶节点分配的依赖性将在下文讨论。传统ODMN的性能随深度增加而缓慢提升，在 $N = 8$ 时，两种代表性体积单元和两种方案的平均误差仍均高于1%。这与其在初始织构上的持续误差相符。即使弹性响应得到准确再现，错误的织构仍会限制各向异性塑性响应的准确性。

表4中的网络采用压缩（第2.2节）返回的叶节点分配。由于材料节点的取向和权重是固定的，因此该分配是构建GSH-ODMN 时唯一的任意选择。它决定了哪些取向通过哪些构建模块发生相互作用，而训练得到的相互作用方向也会适应这一分配。为量化其影响，在保持紧凑织构和所有训练设置不变的情况下，针对叶节点分配的五种随机排列，分别重新训练每个 GSH-ODMN。表5汇总了每个代表性体积单元和深度对应的六个网络。

弹性验证误差对实现方式不敏感，并且随着深度增加而稳步降低：在 $N = 4$ 时，轧制和等轴晶分别约为0.9%和0.45%，在 $N = 6$ 时降至0.03%，在 $N = 8$时降至0.008%。塑性加载下的应力误差

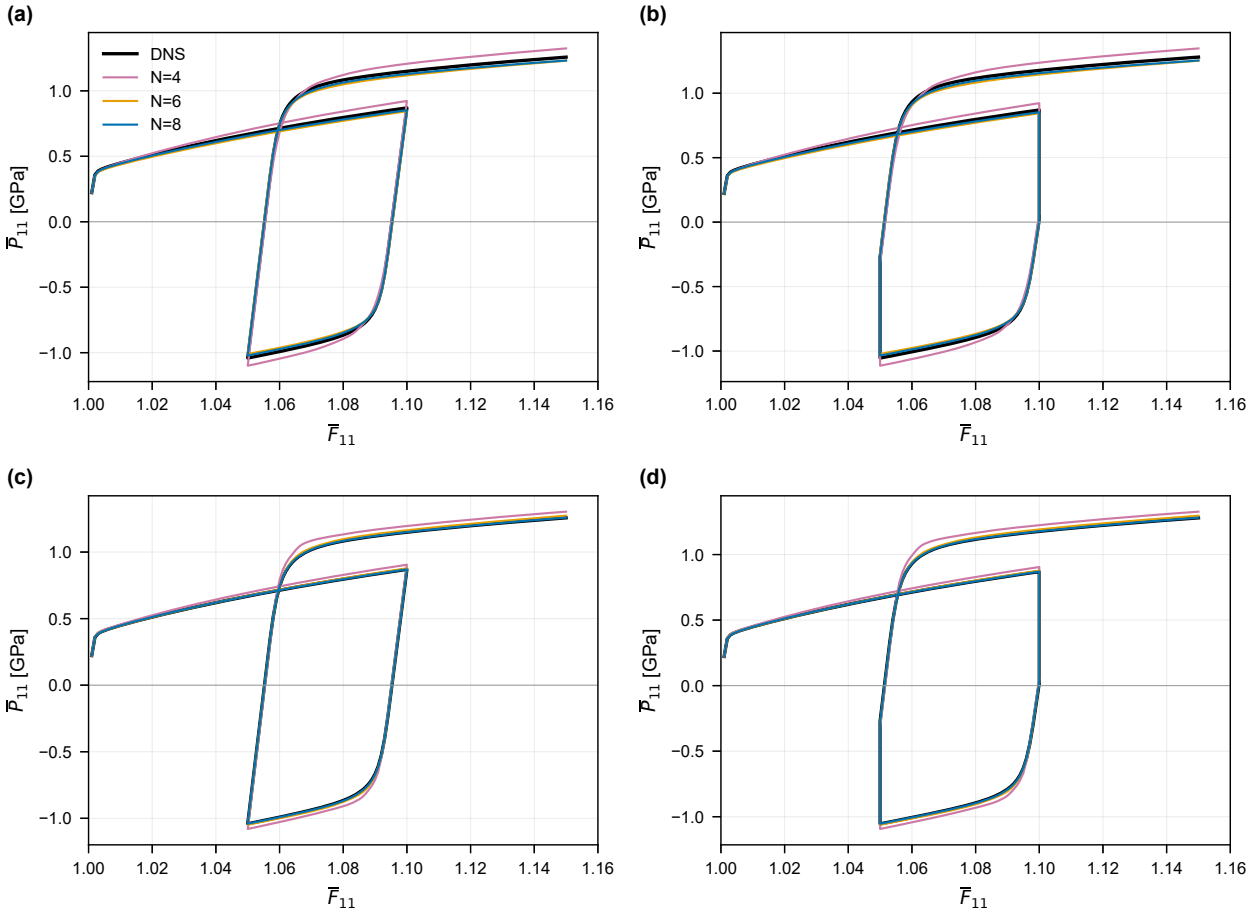

图9：等轴代表性体积单元沿 LUR加载路径的轴向应力 P_{11} 与 F_{11} 的关系，对比 DNS 与 ODMN 在 $N = 4$、6 和 8 时的预测。面板排列和加载方案与图8相同。

表5：GSH-ODMN 对紧凑取向分配至材料节点的敏感性：在 293.15 K 等温方案下，六种叶节点分配中的最佳验证误差，以及平均和最大应力误差 $e(t)$。平均值 ± 平均误差的标准差，括号内为范围；对于验证误差和最大误差，给出平均值及其范围。

RVE	N	验证 [%]	平均值 [%]	最大值 [%]
轧制	4	0.877（0.801–0.912）	0.98 ± 0.52 (0.30–1.56)	2.46（1.20–3.69）
轧制	6	0.029（0.025–0.034）	0.46 ± 0.30 (0.18–1.01)	1.34（0.79–1.94）
轧制	8	0.007（0.007–0.008）	0.51 ± 0.19 (0.24–0.81)	0.86（0.48–1.41）
等轴晶	4	0.449（0.410–0.542）	2.64 ± 0.85（1.62–3.95）	4.56（2.64–6.07）
等轴晶	6	0.028（0.023–0.033）	0.96 ± 0.36（0.58–1.51）	1.81（1.28–2.83）
等轴晶	8	0.008（0.007–0.008）	0.44 ± 0.28 (0.06–0.82)	0.86（0.33–1.38）

则更为敏感。对于轧制代表性体积单元，六种实现方式的平均误差在 $N = 6$ 时为0.46%，在$N = 8$时为0.51%。因此，表4中从0.185%增加到0.449%的变化处于实现方式引起的离散范围内：表中的 $N = 6$ 网络是其六种实现中最准确的，而 $N = 8$ 网络接近中位数。因此，在 $N = 8$ 时，两个代表性体积单元的平均应力误差均接近约0.5%，而轧制代表性体积单元早在$N = 6$时就达到这一水平。相比之下，整个加载历程中的最大误差会继续随着深度增加而降低。对各实现方式取平均后，轧制和等轴代表性体积单元的误差分别从 $N = 4$ 时的2.46%和4.56%降至 $N = 6$ 时的1.34%和1.81%，并在 $N = 8$ 时降至0.86%。对各实现方式取平均后，在 $N = 4$、6和8时，GSH-ODMN比传统ODMN更准确。

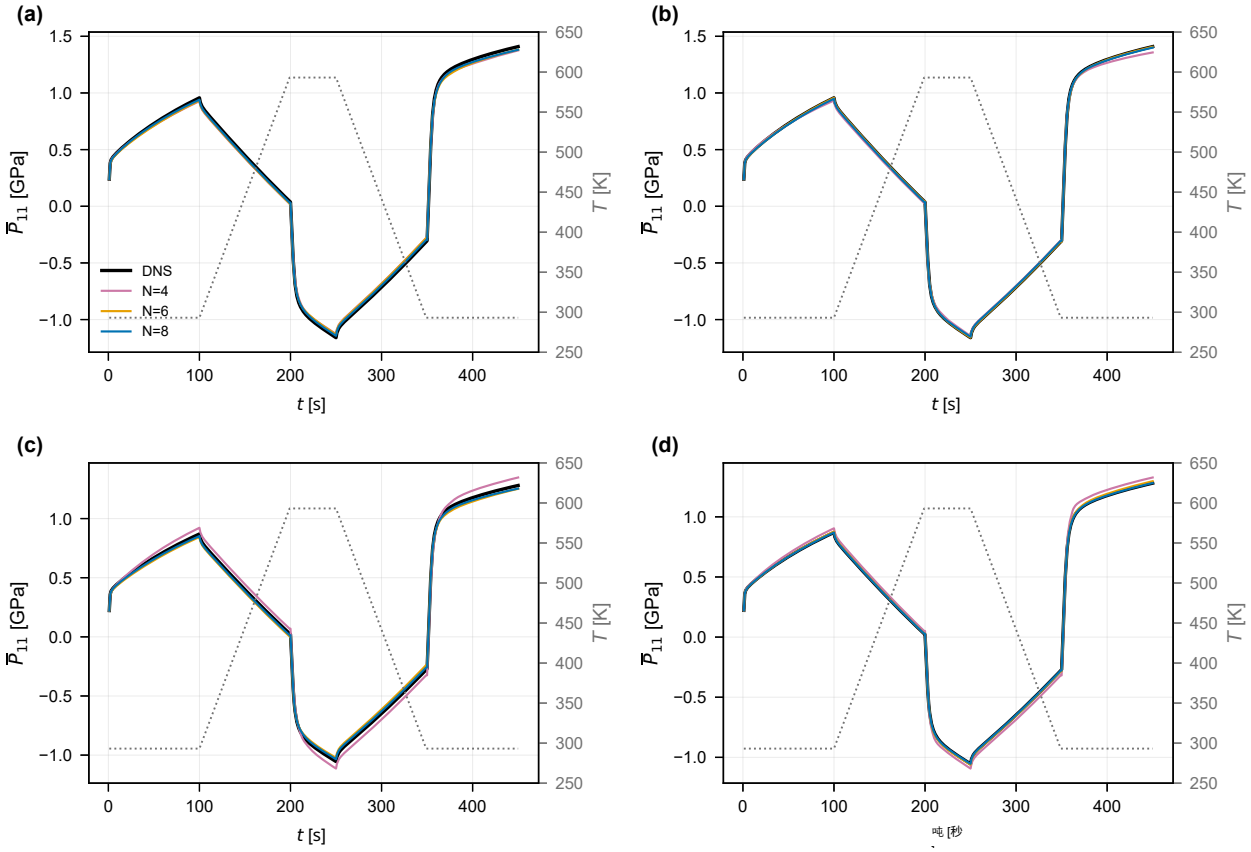

图10：规定温度循环期间，DNS和采用 $N = 4$、6和8的ODMN预测的轴向应力 $P_{11}(t)$（虚线，右轴）：（a、c）传统ODMN；（b、d）GSH-ODMN，其中（a、b）对应轧制代表性体积单元，（c、d）对应等轴代表性体积单元。

3.5 在线预测：织构演化

表6列出了沿等温加载路径的四个状态（$t = 0$、100、150 和 250 s，分别对应 $F_{11} = 1.00$、1.10、1.05 和 1.15）以及温度循环方案结束时 ODMN 与 DNS织构之间的织构差异指数。图11和图12对比了等温路径结束时相应的极图。

DNS织构沿加载路径适度演化。轧制织构变得更加尖锐，同时保留其主要组分；而等轴代表性体积单元则在拉伸轴方向形成 (001) 极点集中，即 $\langle 100 \rangle$纤维组分（图12(a)）。GSH-ODMN 准确再现了这一演化。在 $N = 8$ 时，沿整个等温加载路径，GSH-ODMN 与 DNS 之间的织构差异指数 $\hat{T}^d$，对于轧制代表性体积单元始终低于 0.019，对于等轴代表性体积单元始终低于 0.027。温度循环方案结束时，这些数值与等温方案结束时的数值几乎相同（轧制代表性体积单元分别为 0.0184 和 0.0185，等轴代表性体积单元分别为 0.0264 和 0.0266）。因此，对于这两种加载方案，GSH-ODMN 对织构的预测效果同样出色。传统ODMN 的织构差异要大得多，主要由初始织构不匹配所致。

3.6 计算成本

表7比较了 ODMN 与 DNS 的计算成本，图13总结了在线预测的准确性和效率随网络深度的变化。ODMN 的成本是 Abaqus 在单个 CPU核心上报告的求解器实际运行时间，不包括作业初始化和用户子程序编译。相应地，在等温方案下，轧制和等轴晶代表性体积单元在八个 CPU 线程上的 DNS 实际运行时间分别为 32 分 51 秒和 34 分 22 秒；在温度循环方案下，分别为 43 分 43 秒和 51 分 31 秒。由于两个求解器使用的核心数不同，因此采用核心时间评估加速，即实际运行时间乘以线程数。

表6：沿加载路径，在 $t = 0$、100、150和250 s（$F_{11} = 1.00$、1.10、1.05和1.15）下采用等温方案，以及在 $t = 450$ s温度循环方案结束时，ODMN与DNS织构之间的织构差异指数ˆ

RVE	策略	N	293.15 K				温度循环
			$t = 0$	$t = 100$s	$t = 150$s	$t = 250$s	$t = 450$s
轧制	传统	4	1.0564	1.0176	1.0566	0.9785	0.9793
轧制	传统	6	0.2551	0.2263	0.2387	0.2170	0.2174
轧制	传统	8	0.0964	0.0932	0.0954	0.0892	0.0893
轧制	GSH	4	0.4623	0.4653	0.4648	0.4858	0.4856
轧制	GSH	6	0.0496	0.0574	0.0497	0.0701	0.0697
轧制	GSH	8	0.0075	0.0135	0.0103	0.0185	0.0184
等轴晶	传统	4	1.3525	1.3247	1.3587	1.2774	1.2797
等轴晶	传统	6	0.2536	0.2661	0.2639	0.2677	0.2676
等轴晶	传统	8	0.0785	0.0766	0.0754	0.0793	0.0793
等轴晶	GSH	4	0.6549	0.6556	0.6542	0.6674	0.6680
等轴晶	GSH	6	0.0761	0.0902	0.0819	0.1039	0.1037
等轴晶	GSH	8	0.0099	0.0194	0.0138	0.0266	0.0264

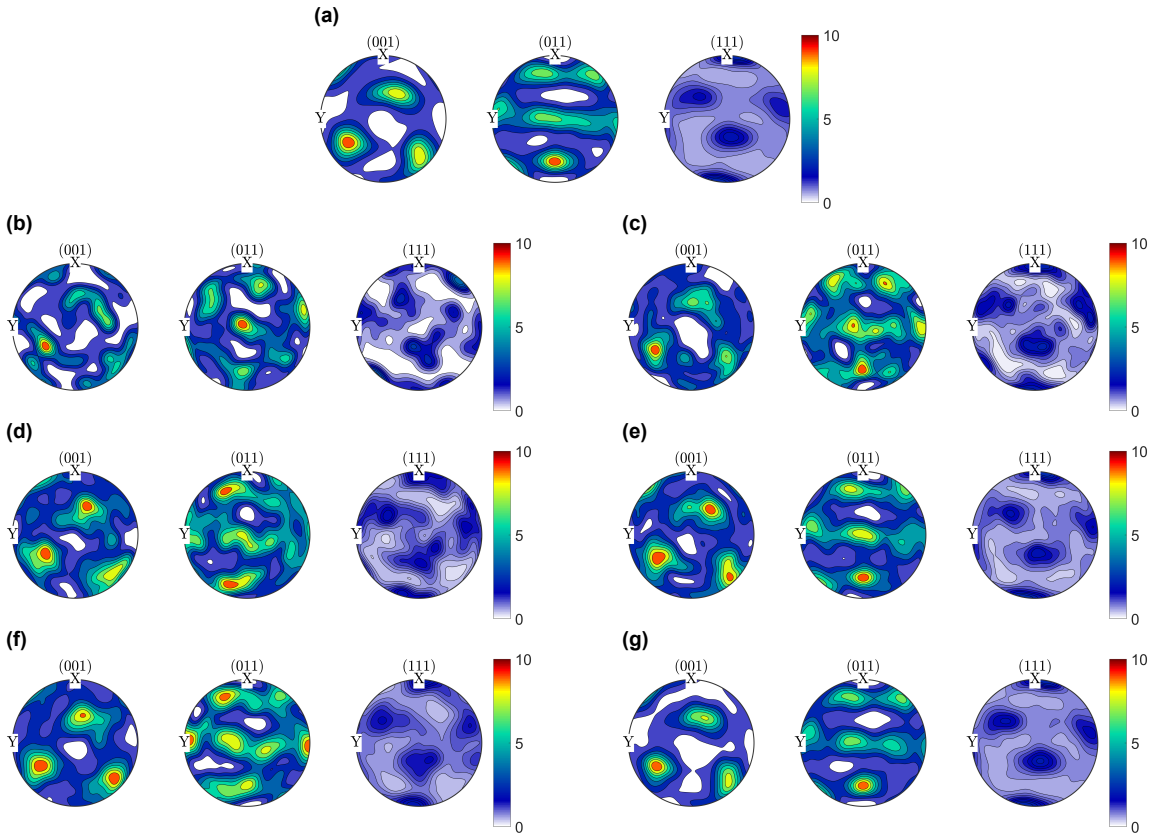

图11：等温 LUR 路径结束时轧制代表性体积单元的织构（$t = 250$ s，$F_{11} = 1.15$）。面板 (a) 显示 DNS 参考结果，其余面板显示 ODMN 的预测结果，其中 $N = 4$ (b, c)、$N = 6$ (d, e) 和$N = 8$ (f, g)。左列 (b, d, f) 对应传统ODMN，右列 (c, e, g) 对应 GSH-ODMN。

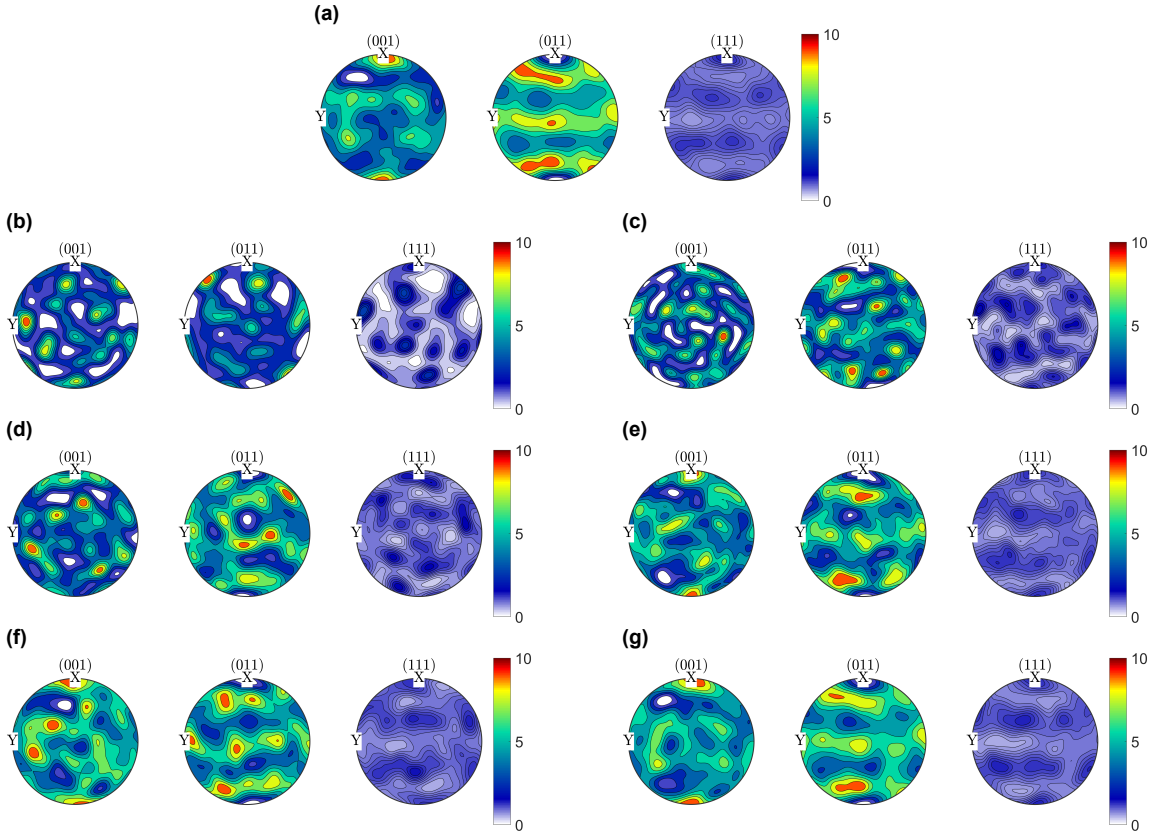

图 12：等温 LUR 路径（$t = 250\,\mathrm{s}$， $F_{11} = 1.15$）结束时等轴代表性体积单元的织构。(a)显示 DNS 参考结果，其余面板显示 ODMN 预测结果，其中 $N = 4$ 对应(b、c)， $N = 6$ 对应(d、e)， $N = 8$ 对应(f、g)。左列（b、d、f）对应传统ODMN，右列（c、e、g）对应 GSH-ODMN。

表 7：在线预测的计算成本，包括在单个 CPU核心 上的 ODMN 求解器实际运行时间，以及相对于使用八个 CPU 线程的 DNS 的核心计算时间加速比。

			293.15 K		温度循环	
RVE	策略	N	ODMN	加速	ODMN	加速
轧制	传统	4	4 s	3941	7 s	2998
轧制	传统	6	6 s	2628	10 s	2099
轧制	传统	8	19 s	830	26 s	807
轧制	GSH	4	4 s	3941	7 s	2998
轧制	GSH	6	6 s	2628	10 s	2099
轧制	GSH	8	19 s	830	25 s	839
等轴晶	传统	4	5 s	3299	7 s	3533
等轴晶	传统	6	6 s	2749	10 s	2473
等轴晶	传统	8	18 s	916	26 s	951
等轴晶	GSH	4	4 s	4123	7 s	3533
等轴晶	GSH	6	6 s	2749	10 s	2473
等轴晶	GSH	8	17 s	970	23 s	1075

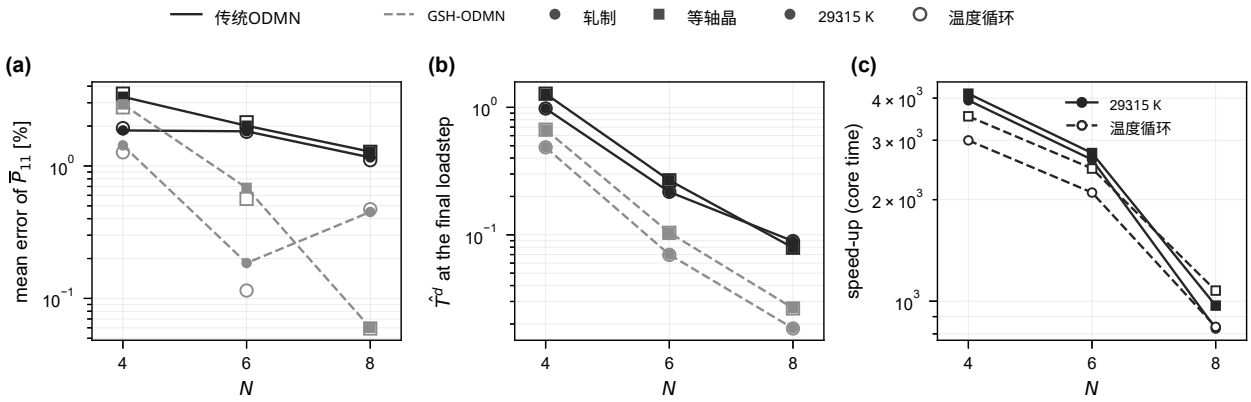

图13：在线预测性能随网络深度 N的变化：(a) P_{11}的平均相对误差，(b) 最终加载步的织构差异指数 $\hat{T}^d$，以及 (c) GSH-ODMN 相对于 DNS 的核心计算时间加速比。在 (a) 和 (b) 中，线型区分训练策略，标记形状区分代表性体积单元。实心标记由线连接，表示 293.15 K 下的等温方案；空心标记不由线连接，表示温度循环方案。在 (c) 中，实线和虚线分别表示等温方案和温度循环方案。

ODMN 的计算成本随网络深度增加。在两种加载方案和两个代表性体积单元下，相对于 DNS 的核心计算时间加速比从深度为 $N = 4$ 时的约 3000–4100，降至深度为 $N = 6$ 时的 2100–2750，以及深度为 $N = 8$ 时的 810–1080（图13(c)）。ODMN 求解器时间从深度为 $N = 4$ 时的 4–7秒，增加到深度为 $N = 6$ 时的 6–10秒，以及深度为 $N = 8$时的 17–26秒；每增加一个层级，耗时增幅不到一倍。这总体上与第2.5.2节根据材料节点数量估算的近线性缩放相符，同时需要注意，$N = 4$ 的计时主要受有限元驱动程序每个增量固定开销的影响。在给定深度下，两种策略的在线成本相近，因为它们采用相同的网络架构。细微的计时差异主要源于牛顿迭代次数不同。温度循环方案比等温方案成本更高，因为它包含额外的加载和保载阶段，但成本对网络深度的依赖关系相同。

因此，网络深度是在精度与计算成本之间的权衡。增大 N 通常能提高均匀化应力和织构演化的预测精度，但会降低加速比。在 $N = 4$时，加速比达到数千，但精度最低，尤其是织构预测。在 $N = 6$时，应力和织构预测的准确性显著提高，同时加速比仍为 2100–2750，因此这一深度是较好的折中选择。在 $N = 8$时，织构预测最准确，而加速比降至 810–1080。因此，当需要准确预测织构时，深度 $N = 8$较为合适；对于大规模多尺度分析，$N = 6$ 则更经济。

4 双尺度热力学模拟

4.1 模型

该结构示例为一个 L 形 IN625 支架，在两种温度下承受位移控制弯曲（图14）。支架的外形尺寸为 4 mm $\times$ 4 mm $\times$ 1 mm，并去除一个尺寸为 2 mm $\times$ 2mm $\times$ 1 mm 的块体。该支架采用边长为 0.167 mm 的立方单元进行离散，网格为 $24 \times 24 \times 6$，共包含 2592 个带增强沙漏控制的减缩积分六面体单元、3367 个节点和 10101 个自由度。底面完全固定。在水平臂部的端面上，仅规定竖直位移 u_2，位移 u_1 和 u_3 自由。加载历程包含五个 100 s 阶段（图15）：在 293.15 K 下加载至 $u_2 = -0.4$mm，卸载至 $u_2 = 0$，在固定位置下加热至 593.15 K，再加载至 $u_2 = -0.4$mm，并在 593.15 K 下卸载。温度在空间上均匀分布，且考虑了几何非线性。

在每个积分点处，材料响应通过 UMAT 由针对采用 $N = 4$、6 或 8 的轧制代表性体积单元训练得到的 GSH-ODMN 提供，并使用表1所列的本构参数。时间增量从 0.5 s 开始，上限为 2s。每次分析包含 410 个增量步和 460–467 次全局平衡迭代，每次迭代中的每个积分点均进行一次 ODMN局部化求解。仿真在一台配备 Intel Core i9-13900K 处理器的台式工作站上，使用四个消息传递接口（MPI）进程运行。如图14(b)所示，对五个中厚度单元进行监测：角部-支腿、角部臂、支腿中部、臂中部和夹具。

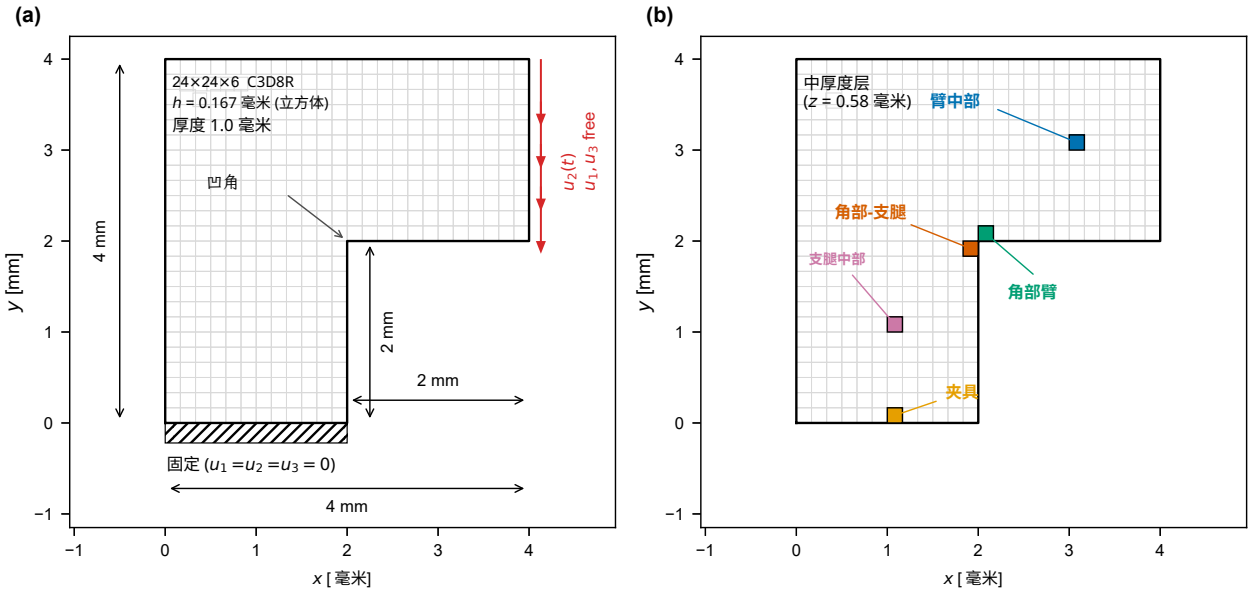

图14：双尺度L形支架：(a)平面内几何形状、网格和边界条件，以及(b)中厚度层中的监测单元。

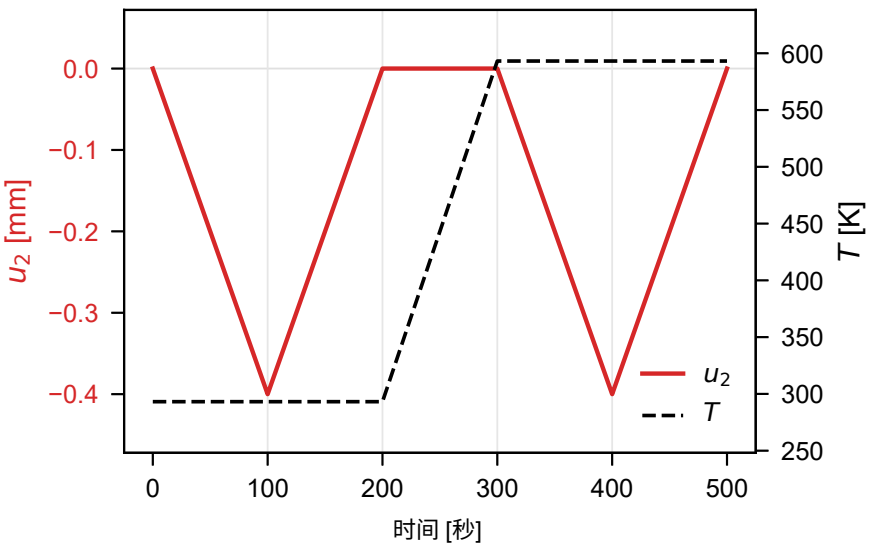

图 15：L形支架在冷态加载与卸载、固定位移下加热以及热态加载与卸载过程中的规定载荷位移 u_2 和温度 T。

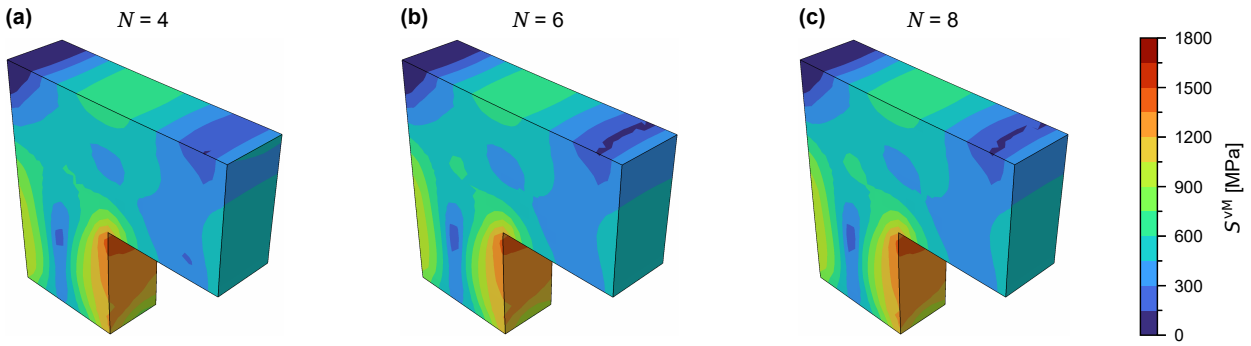

图16：分析结束时 L形支架中等效应力 S^{vM}的分布，该应力定义为宏观第二类皮奥拉-基尔霍夫应力的冯·米塞斯等效应力（$t = 500$秒）：(a) $N = 4$，(b) $N = 6$，以及 (c) $N = 8$。

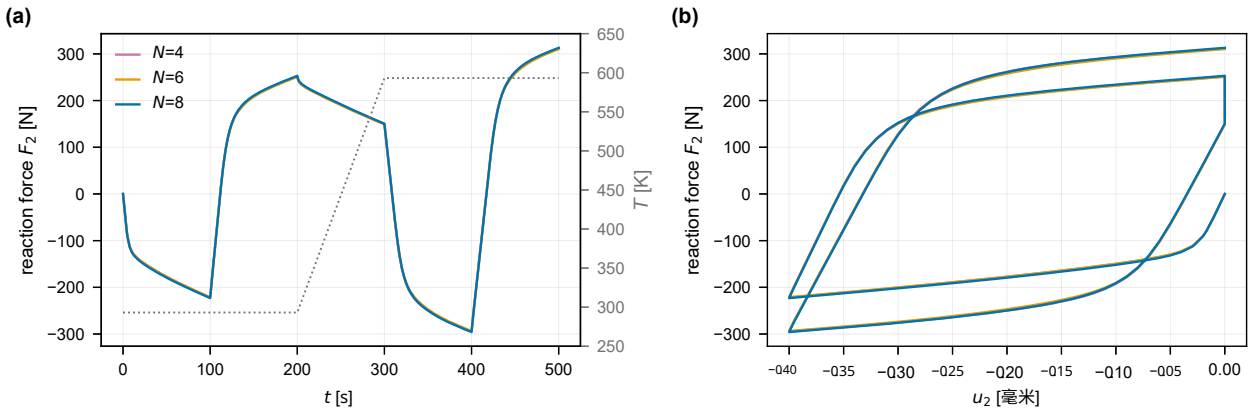

图17：L形支架受载面上的反作用力 F_2，对应 $N = 4$、6和8：(a) 时程以及规定温度（虚线，右轴），以及 (b) 冷、热加载循环期间的力–位移响应。

4.2 结构响应

图16显示了分析结束时三个网络深度下宏观第二类皮奥拉-基尔霍夫应力的冯·米塞斯等效应力 $S^{\mathrm{vM}} = \sqrt{\frac{3}{2}}\,\mathrm{dev}\ \boldsymbol{S} : \mathrm{dev}\ \boldsymbol{S}$，其中 dev 表示偏量部分。图17显示了受载面上的反作用力 F_2 随时间和规定位移的变化，表8列出了结构响应的特征值。应力集中于凹角处，在分析结束时 S^{vM} 达到约1.5–1.6吉帕，在热加载峰值时达到1.6–1.7吉帕（表9）；相比之下，腿部和臂部的大部分区域约为0.3–0.5吉帕。

冷循环和热循环形成开口滞回环（图17，表8）。对于 $N = 8$，$u_2 = -0.4$毫米处的反作用力绝对值从冷循环中的 -223N 增至热循环中的 -296N，这是因为第二个循环始于第一个循环留下的硬化残余应力状态。固定位移下加热通过热膨胀和弹性响应的温度依赖性，使残余力从 253 N 降至 151 N。相应的净功在冷循环中为 134 mJ，在热循环中为 155 mJ。较浅的网络表现出几乎相同的结构响应。相较于 $N = 8$，特征力和循环功的差异对于$N = 4$ 为 0.1–0.6%，对于 $N = 6$为 0.7–1.1%。因此，结构响应对网络深度不敏感，这与代表性体积单元层面的结果一致。

4.3 局部响应

图1?8 比较了三种网络深度下五个监测单元的等效应力历程，表9列出了每个加载阶段结束时的数值。远离凹角处，较浅的网络与 $N = 8$ 的一致性较高：臂部中间单元的差异在1%以内，夹持端单元为2%，角部臂和支腿中部单元为3.5%。在角腿单元处，$N = 4$ 的差异更大，该处的应力集中最为严重。在那里，$N = 4$

表8： $N = 4$、6和8的特征L形支架响应：各加载阶段末端的反作用力，以及冷、热位移循环期间的净功。

数量	$N = 4$	$N = 6$	$N = 8$
冷峰值 F_2 [N]	−221.8	−221.1	−223.1
冷残差 F_2 [N]	251.5	251.0	253.0
F_2 加热后 [N]	149.6	148.9	150.5
高温峰值 F_2 [N]	−294.7	−293.5	−295.7
高温残差 F_2 [N]	311.8	310.3	312.9
冷循环功 [mJ]	133.1	132.6	133.9
热循环功 [mJ]	154.7	153.3	154.5
差异范围（相较于 $N = 8$ [%] 0）。1–0.6 0.7–1.1			–

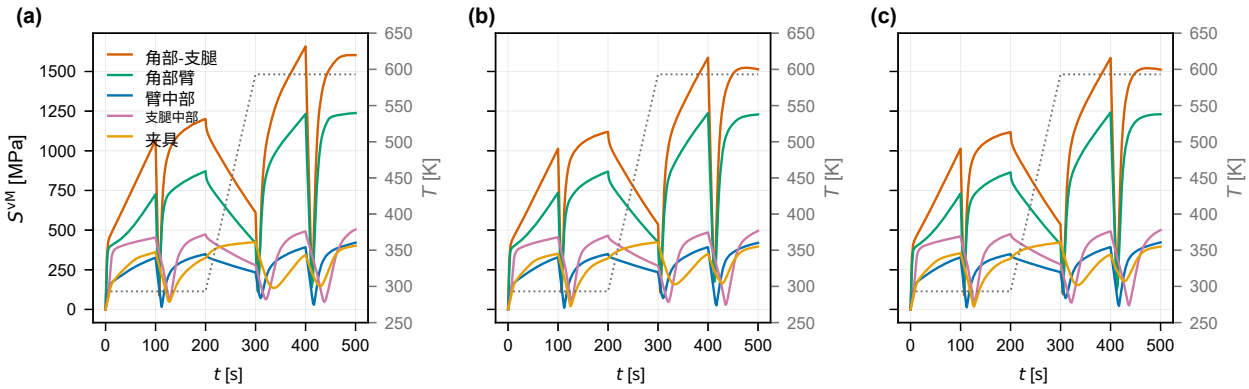

图 18：L形支架五个监测单元处的等效应力 S^{vM} 历程：(a) $N = 4$、(b) $N = 6$和 (c) $N = 8$。规定温度历程由右侧纵轴上的虚线表示。

在加载和卸载阶段结束时，与 $N = 8$ 的偏差为 4.6–7.4%，加热后偏差为 14%（611 对 535 兆帕）。 $N = 6$ 网络在该单元处与 $N = 8$ 的偏差在 0.4% 以内，因此，在 $N = 6$处，受载最严重单元的应力相对于网络深度已收敛。

角腿历程还显示了全局反作用力无法揭示的局部特征。冷态卸载后， $N = 4$、6 和 8 的等效应力分别为 1201、1120 和 1118 兆帕，均高于前一加载峰值处的 1068、1013 和 1013 兆帕。这一增幅归因于回弹期间凹角附近的应力重分布和反向塑性流动，此处材料已经硬化。在热循环期间，角部-支腿处的应力进一步增加。所有单元和输出时刻中的峰值等效应力， $N = 4$为 1664 兆帕， $N = 6$ 和 $N = 8$均为 1588 兆帕，因此 $N = 4$ 比 $N = 8$ 高 4.8%。因此，全局响应对网络深度几乎不敏感，而凹角附近的应力集中则更为敏感。在角腿单元处， $N = 4$ 预测的应力始终高于 $N = 8$，而 $N = 6$ 和 $N = 8$ 几乎重合。

4.4 再入角处的织构演化

由于每个积分点都存储完整的 ODMN 状态，因此可以在整个加载历程中评估局部织构。式（57）中的材料节点旋转 $\boldsymbol{R}_i$ 以全局坐标系表示，因此也包含单元的刚体旋转。为将其分离，在积分点处将宏观变形梯度分解为 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{U}$，并将材料节点旋转表示在单元的共转坐标系中，如下所示 $\boldsymbol{R}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{R}_i$。图19显示了三种网络深度下，角腿单元在初始状态及各加载阶段结束时的共转极图。图20显示了体积平均晶格旋转 $\vartheta(t) = \sum_i w_i\,\vartheta_i(t)$，其中 $\vartheta_i(t)$ 表示材料节点 i 的共转取向相对于其初始状态转过的角度。

冷加载过程中，晶格偏离其初始取向，在加载结束时（$t = 100$s）平均旋转约 3° 。当规定位移恢复为零时，大部分旋转都会恢复，因为凹角处的局部变形此时也几乎完全逆转，而在 $t = 200$s时的织构再次与

表9： $N=4$、6和8的L形支架五个监测单元在每个加载阶段结束时的等效应力 S^{vM} [兆帕] 。

单元	N	$t=100$s	$t=200$s	$t=300$s	$t=400$s	$t=500$s
角部-支腿	4	1068	1201	611	1658	1603
	6	1013	1120	537	1587	1514
	8	1013	1118	535	1585	1512
角部臂	4	727	872	419	1233	1238
	6	736	869	424	1238	1229
	8	731	864	410	1241	1230
臂中部	4	326	349	234	392	421
	6	329	350	234	393	420
	8	328	349	235	393	423
支腿中部	4	453	473	278	491	504
	6	455	465	275	485	495
	8	460	475	284	492	500
夹具	4	361	324	425	345	401
	6	351	320	424	351	396
	8	354	320	422	347	396

表10：双尺度 L 型支架分析的计算资源。

N	材料节点	增量步	迭代次数	实际运行时间	峰值内存
4	16	410	467	14分钟6秒	1.07 GB
6	64	410	464	43分钟34秒	1.23 GB
8	256	410	460	2小时54分钟28秒	1.93 GB

初始织构非常相似。加热期间织构保持不变，而热循环重复了冷循环的演化。每个循环后的微小残余转动，是塑性滑移导致的不可逆织构演变。

三个网络对演化的时间节点和可逆特性预测相同。对于 $N=4$、6 和 8，在冷加载结束时（$t=100\,\mathrm{s}$），ϑ 为3.05°、2.95°和 2.87°；冷态卸载后（$t=200$s），分别为 1.08°、 0.55°和 0.63°；热加载结束时（$t=400$s），分别为 3.23°、2.71°和 2.56° 。因此，采用 $N=6$ 和 8 的网络结果几乎一致，而 $N=4$预测的转动幅度更大，尤其是在热循环中，且残余转动也更大。这与该单元的应力情况相呼应： $N=4$ 与 $N=8$存在偏差，而 $N=6$ 和 8 几乎一致（第 4.3 节）。

4.5 计算成本

表10列出了三种分析所需的计算资源，每种分析均使用4个进程运行。三种分析均需410个增量步和460至467次全局平衡迭代，因此成本差异仅由网络深度造成。 $N=4$ 分析在14分钟内完成，实际运行时间对应的峰值内存为1.07 GB。$N=6$ 分析耗时44分钟，内存为1.23 GB； $N=8$ 分析耗时2小时54分钟，内存为1.93 GB。从 $N=4$ 到6，以及从 $N=6$ 到8，材料节点数每增加四倍，实际运行时间分别增加3.1倍和4.0倍。这与第2.5.2节估算的近线性缩放一致。

作为比较，考虑一种并发双尺度分析：在2592个积分点中的每个点上，使用谱求解器求解包含1000个晶粒的轧制代表性体积单元。第3.6节中对该代表性体积单元进行的温度循环DNS，在8个线程上耗时43分43秒，即约5.8核小时；其450秒的加载历程在长度和复杂度上与此相当。因此，这种分析约需 $2592\times5.8\approx1.5\times10^{4}$ 核小时。若将实际运行时间乘以进程数，三种ODMN分析分别需要0.9、2.9和11.6核小时。由此，GSH-ODMN将双尺度分析的成本降低了三到四个数量级。出于同样的原因，本文未计算L形支架的全场参考解；第4.2至4.4节对三种网络深度的比较，是关于 N的收敛性研究。

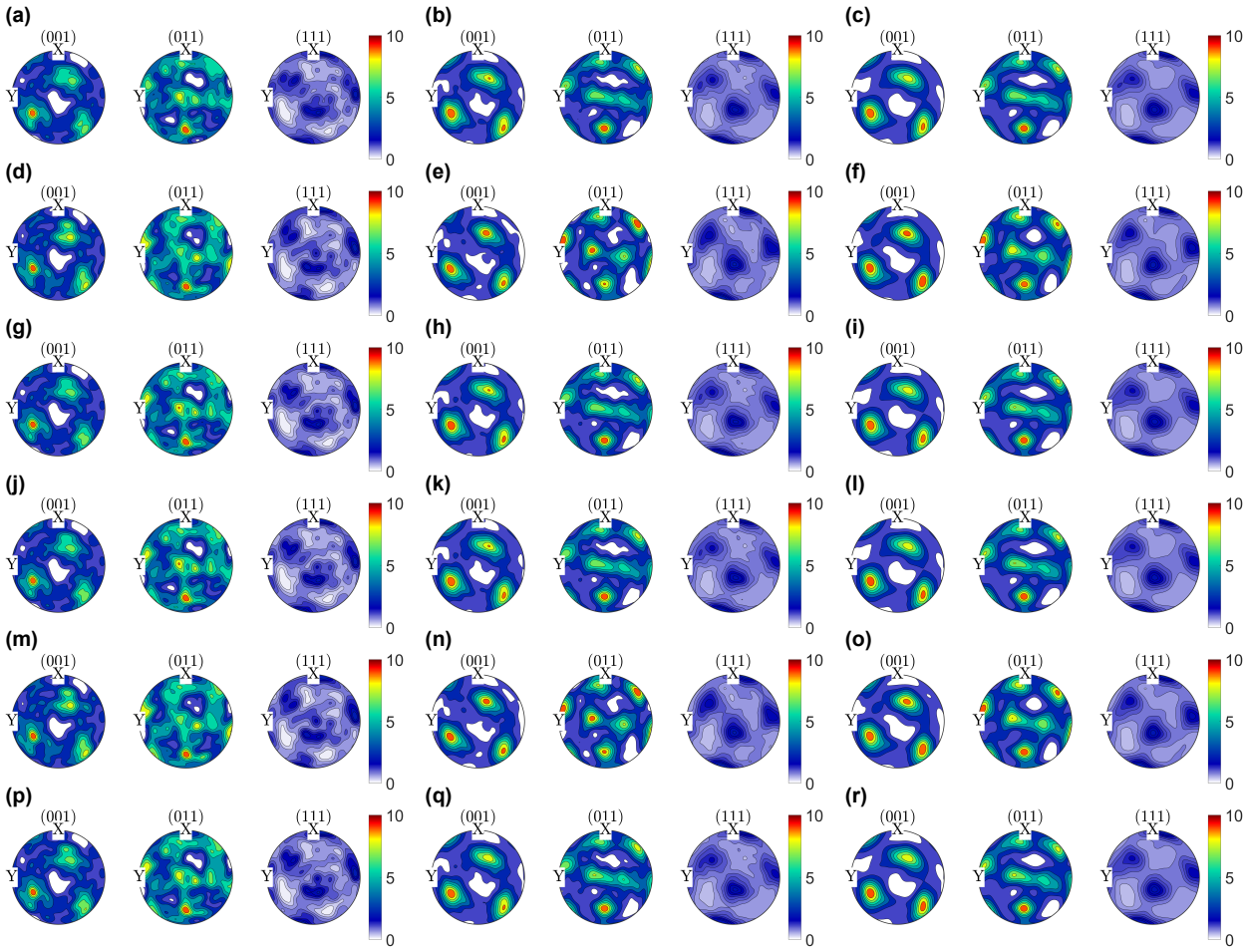

图19：L形支架角腿单元在该单元共转坐标系中的局部织构极图，即移除刚体旋转 $\boldsymbol{R}$ 后，在初始状态下 $t = 0$ 的 $N = 4$ （左列）、 $N = 6$ （中列）和 $N = 8$（右列）（a–c），以及加载历程各阶段结束时：冷加载后$t = 100\,\mathrm{s}$（d–f）、冷态卸载后 $t = 200\,\mathrm{s}$（g–i）、加热至593.15K后 $t = 300\,\mathrm{s}$（j–l）、热加载后 $t = 400\mathrm{s}$（m–o）和热态卸载后 $t = 500\,\mathrm{s}$（p–r）。

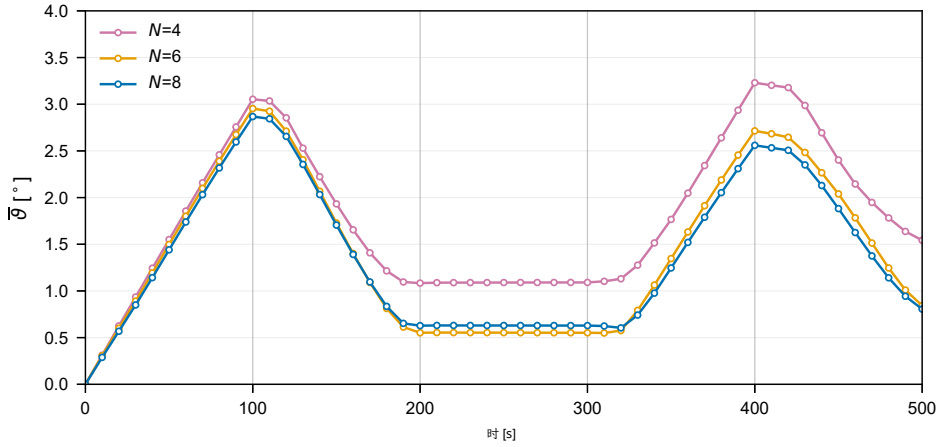

图20：角腿单元在共转坐标系中相对于初始取向的体积平均晶格旋转 ϑ，对应 $N = 4$、6和8。竖线表示加载阶段边界。

5 结论

本文介绍了GSH-ODMN，其中材料节点的取向和权重由RVE织构的体积加权GSH紧缩确定，而不是从弹性数据中学习得到。本文还建立了取向感知机制的Bunge角度表述以及在线预测的热力学扩展。该框架通过两个IN625代表性体积单元在等温和热力学LUR路径下的全场CPFFT模拟进行了验证，随后应用于承受冷弯和热弯循环的L形支架的双尺度模拟。主要结论如下。

1. GSH 截断阶数必须与材料节点的数量相匹配。紧凑织构的织构差异指数随 L呈非单调变化，最优值从 $L = 10$或12（当 $N = 4$时）转移至 $L = 16$ 或18（当 $N = 8$时）。在所采用的截断阶数下，紧凑织构以ˆ $T^d = 0.46$和0.65（分别对应 $N = 4$）以及以ˆ$T^d < 0.01$（对应 $N = 8$）再现了体积加权的RVE织构。

2. 仅凭弹性训练数据无法唯一确定织构。传统 ODMN 在 $N = 8$ 时的均匀化刚度验证误差约为 0.01%，但其织构误差仍接近 0.1，因为弹性响应主要由取向分布函数的低阶谐波成分决定。GSH-ODMN 通过指定材料节点取向消除了这种歧义。它将可训练参数数量减少约三分之二，并将训练时间缩短约二分之一至三分之二。在 $N = 6$ 时，其离线精度接近传统 ODMN；在 $N = 8$ 时则略胜一筹。

3. 在在线预测中，对六种取向分配取平均后，GSH-ODMN 在所有代表性体积单元、网络深度和加载方案的组合下，平均应力误差均低于传统 ODMN。在 $N = 8$ 时，等轴晶和轧制代表性体积单元的取向分配平均误差分别为 0.44% 和 0.51%，而传统 ODMN 对应的误差为 1.3% 和 1.2%。

4. GSH-ODMN 能够追踪 DNS 的织构演化。在 $N = 8$，两种代表性体积单元和两种加载方案的最终织构差异指数均低于 0.03。这比传统 ODMN 小三至五倍；传统 ODMN 的误差主要源于初始织构不匹配。

5. 在线求解的牛顿雅可比矩阵继承了网络的二叉树稀疏性，并通过树结构 LU 分解进行分解，且不会产生填充。因此，每次牛顿迭代的成本为：本构更新的 $O(2^N)$，加上网络代数的 $O(2^N N^2)$；而稠密形式的成本为 $O(8^N)$。在所考察的深度范围内，在线计算成本随材料节点数量近乎线性增长；在 $N = 8$ 时，相对于 DNS 的核心计算时间加速比仍约为 10^3 。

6. 将 $N = 4$GSH-ODMN 嵌入 2592 个单元 L形支架的每个积分点后，使用四个进程可在 14 分钟内完成五阶段热力加载历程，而 $N = 8$ 网络则需约 3 小时。相较于 $N = 8$， $N = 4$ 和 $N = 6$ 的整体结构响应相差约 1 % 以内。应力集中最强处的角腿单元应力随网络深度增加而收敛。在该处， $N = 4$ 与 $N = 8$ 的偏差最高达 14 %，而 $N = 6$ 与$N = 8$ 的偏差在 0.4 % 以内。

仍有两项局限。首先，该框架假设等温代表性体积单元中的所有材料节点均具有相同的预设温度。将局部化扩展至温度场后，便可解析局部温度及其梯度，从而预测热流，并处理存在强温度梯度或由塑性耗散加热的问题。其次，本构模型的温度依赖性仅涉及弹性常数和热膨胀。无需改变局部化框架，即可在材料节点本构更新中加入温度依赖的滑移阻力和热激活流动。对于具有大塑性变形和织构演化的热力制造过程，例如深拉深、机械加工和冷轧，这两项扩展都是必需的。

致谢

作者衷心感谢台湾国家地震工程研究中心（NCREE）、国家应用研究院（NIAR）提供的计算资源和技术支持，以及NTUCE-NCREE联合人工智能研究中心和国家高速网络与计算中心（NCHC）提供的支持。

声明

经费

本研究ld̃sʊ台湾国家科学及技术委员会资助，项目编号为114-2221-E-002-010-MY3。

利益冲突

作者声明，他们不存在利益冲突。

数据可用性

支持本研究结论的数据 可在提出合理请求后向通讯作者获取。 t.

代码可用性

支持本研究结论的代码可在提出合理请求后向通讯作者获取。

作者贡献

Ting-JuWei：概念构思、方法学、软件、验证、正式分析、调查、可视化、撰写初稿。**Chuin-ShanChen**：概念构思、监督、资源、经费获取、审阅与编辑稿件。

附录 A 本构推导

材料节点所采用的本构公式来自 DAMASK [15], ，本附录中的表达式也遵循其实现。这些并非本文的新结果。本附录使用本文的记号，写出 DAMASK 实现所计算的具体形式，从而以闭式形式记录第2.5.1节的材料节点更新过程。

A.1 驱动塑性流动的 Mandel 应力

在乘法分解下

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}, \tag{124}$$

引入组合弹性–本征变形梯度较为方便

$$\boldsymbol{F}^{\star} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}, \tag{125}$$

使得 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{\star}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$. 式（79）中引入的弹性格林–拉格朗日应变可表示为 s

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}} = \frac{1}{2}\left[\left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star} - \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right]. \tag{126}$$

塑性速度梯度定义为

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} = \dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{p}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}. \tag{127}$$

对式（125）求时间导数可得

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{F}}^{\star} &= \dot{\boldsymbol{F}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} + \boldsymbol{F}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} \\ &= \dot{\boldsymbol{F}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} - \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{p}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} \\ &= \dot{\boldsymbol{F}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} - \boldsymbol{F}^{\star}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}.\end{aligned} \tag{128}$$

为确定与塑性流动相关的热力学力，在保持总变形 $\boldsymbol{F}$ 和非弹性变形 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}$ 相对于该变分不变的情况下，分离出与 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$ 成正比的贡献。因此，公式（128）给出

$$\dot{\boldsymbol{F}}^{\star}\Big|_{\mathrm{p}} = -\boldsymbol{F}^{\star}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}. \tag{129}$$

相应地，弹性应变率中的塑性贡献为

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{E}}^{\mathrm{e}}\Big|_{\mathrm{p}} &= \frac{1}{2}\left[\left(\dot{\boldsymbol{F}}^{\star}\Big|_{\mathrm{p}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star} + \left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\dot{\boldsymbol{F}}^{\star}\Big|_{\mathrm{p}}\right] \\ &= -\frac{1}{2}\left[\left(\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star} + \left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right].\end{aligned} \tag{130}$$

为方便起见，定义

$$\boldsymbol{C}^{\star} = \left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star}, \tag{131}$$

根据构造，该张量是对称的。令 ψ 表示弹性应变能密度。由于 $\boldsymbol{S} = \partial\psi/\partial\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}$ 与 $\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}$ 功共轭且也是对称的，弹性应变能率中的塑性贡献变为

$$\begin{aligned}\dot{\psi}\Big|_{\mathrm{p}} &= \boldsymbol{S} : \dot{\boldsymbol{E}}^{\mathrm{e}}\Big|_{\mathrm{p}} \\ &= -\frac{1}{2}\boldsymbol{S} : \left[\left(\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{C}^{\star} + \boldsymbol{C}^{\star}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right].\end{aligned} \tag{132}$$

利用 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{C}^{\star}$的对称性，

$$\boldsymbol{S} : \left(\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{C}^{\star} = \boldsymbol{S} : \boldsymbol{C}^{\star}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} = \left(\boldsymbol{C}^{\star}\boldsymbol{S}\right) : \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}, \tag{133}$$

因此

$$\dot{\psi}\Big|_{\mathrm{p}} = -\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} : \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}, \tag{134}$$

其中，与塑性速度梯度热力学共轭的曼德尔应力为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} &= \boldsymbol{C}^{\star}\boldsymbol{S} \\ &= \left(\boldsymbol{F}^{\star}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\star}\boldsymbol{S} \\ &= \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{S}.\end{aligned} \tag{135}$$

对于所采用的运动学分解，方程（135）给出了与 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 演化相关的精确驱动应力。

根据方程（126）中弹性应变的定义，

$$2\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}} = \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\left[\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}} - \boldsymbol{I}\right]\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, \tag{136}$$

或者，等价地，

$$\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} = \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} + 2\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}. \tag{137}$$

因此，精确曼德尔应力也可写为

$$\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} = \left[\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} + 2\boldsymbol{E}^{\mathrm{e}}\right]\boldsymbol{S}. \tag{138}$$

在金属中，弹性伸长很小，尽管晶格旋转可能是有限的。因此，弹性右柯西–格林张量 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{e}}$ 满足

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{e}} = \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}} \simeq \boldsymbol{I}, \qquad \|\boldsymbol{C}^{\mathrm{e}} - \boldsymbol{I}\| \ll 1. \tag{139}$$

相应地，

$$\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}} \simeq \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, \tag{140}$$

且式（135）简化为

$$\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}} \simeq \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{S}, \tag{141}$$

即为式（82）中使用的曼德尔应力，也是 DAMASK [15] 中计算的形式。

A.2 特征变形速度梯度的映射

本晶体塑性公式中采用的乘法分解，

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}, \tag{142}$$

引入构形序列

$$\mathcal{B}_0 \xrightarrow{\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}} \mathcal{B}_{\mathrm{p}} \xrightarrow{\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}} \mathcal{B}_{\mathrm{i}} \xrightarrow{\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}} \mathcal{B}_t, \tag{143}$$

其中， $\mathcal{B}_0$、 $\mathcal{B}_{\mathrm{p}}$、 $\mathcal{B}_{\mathrm{i}}$和 $\mathcal{B}_t$ 分别表示参考构形、塑性构形、中间构形和当前构形。特别地， $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 将参考构形映射到等倾塑性构形，而 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}$ 将塑性构形映射到中间构形。

本构定律在塑性构形中进行评估。设 $\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}}$ 表示本构模型在 $\mathcal{B}_{\mathrm{p}}$中给出的特征变形率。特征变形梯度的演化写作

$$\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, \tag{144}$$

其中， $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ 作用于中 中间构形 $\mathcal{B}_{\mathrm{i}}$。因此，必须将本构特征速率从 $\mathcal{B}_{\mathrm{p}}$ 映射到 $\mathcal{B}$ i. DAMASK [15]执 行该推前操作如下

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} = J^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}, \qquad J^{\mathrm{i}} = \det\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right), \tag{145}$$

其逆关系为

$$\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}} = \frac{1}{J^{\mathrm{i}}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}. \tag{146}$$

此处采用公式（145），因为该公式已在 DAMASK 中实现。

该映射可理解为共轭应力的皮奥拉型拉回的对偶。令 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{i}}$ 表示与中间构形中的 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ 配对的应力度量，并将其在塑性构形中的对应量定义为

$$\widehat{\boldsymbol{M}}^{\mathrm{i}} = J^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{M}^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-\mathsf{T}}. \tag{147}$$

对于任意二阶张量 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 以及任意可逆的 $\boldsymbol{F}$，

$$\left(\boldsymbol{F}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}^{-\mathsf{T}}\right):\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}:\left(\boldsymbol{F}\boldsymbol{B}\boldsymbol{F}^{-1}\right). \tag{148}$$

将该恒等式应用于式（145）和（147）可知，这两个映射保持了应力与速率之间的配对关系，

$$\widehat{\boldsymbol{M}}^{\mathrm{i}}:\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{M}^{\mathrm{i}}:\left[J^{\mathrm{i}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}\right] = \boldsymbol{M}^{\mathrm{i}}:\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}. \tag{149}$$

对于热膨胀，本构模型在塑性构形中计算本征速率如下:

$$\widehat{\boldsymbol{L}}^{\mathrm{i}} = \dot{T}\,\boldsymbol{\alpha}(T), \tag{150}$$

其中， $\boldsymbol{\alpha}$（T）表示在与塑性构形相关的晶体基底中。代入式（145）可得到进入 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}$ 演化的本征变形速度梯度，

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} = \det\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\left[\dot{T}\,\boldsymbol{\alpha}(T)\right]\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}. \tag{151}$$

A.3 一致本构切线

本附录总结了第2.5.1节中本构方程的时间积分，以及进入式（95）的 一致切线 $\partial\boldsymbol{P}/\partial\boldsymbol{F}$。积分方案和切线均采用 DAMASK [15] 中晶粒更新所使用的方法。这里以指标记法重新表述，并省略节点指标。

隐式更新 考虑一个长度为 Δt 的增量 $[t_n, t_{n+1}]$，其变形梯度 $\boldsymbol{F}$ 在 t_{n+1} 处给定。式（77）的流动法则采用后向欧拉格式进行积分，写成关于逆变形梯度的形式为

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1} &= \left(\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \Delta t\,\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\right),\\ \left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1} &= \left(\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{i}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \Delta t\,\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\right),\end{aligned} \tag{152}$$

其中 qua 不带下标的量均指 t_{n+1}。弹性变形梯度由式（54）得出 ，

$$\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}, \tag{153}$$

由公式（79）得到的应力 $\boldsymbol{S}$、由公式（82）得到的曼德尔应力，以及由公式（81）和（86）得到的速度梯度。这两个速度梯度是更新的未知量。它们由以下残差确定

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}^{\mathrm{p}} &= \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} - \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{M}^{\mathrm{p}}, \boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{0},\\ \boldsymbol{R}^{\mathrm{i}} &= \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}} - \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}, T, \dot{T}\right) = \boldsymbol{0},\end{aligned} \tag{154}$$

通过嵌套牛顿迭代求解，内层迭代在 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ 固定时求解 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$，外层迭代求解 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$。滑移阻力 $\boldsymbol{\xi}$ 与应力更新通过交错不动点迭代进行积分。在应力更新过程中，它们保持为当前迭代值。收敛状态给出第一类皮奥拉–基尔霍夫应力

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-\mathsf{T}}. \tag{155}$$

线性化 切线通过对收敛后的更新相对于 $\boldsymbol{F}$ 求导得到，同时将状态固定在 t_n，并将滑移阻力 $\boldsymbol{\xi}$ 固定在其收敛值。对于热本征变形，$\partial \boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}/\partial \boldsymbol{M}^{\mathrm{i}} = \boldsymbol{0}$（第2.5.1节），因此 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{i}}$ 和 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}$ 在该增量内不依赖于 $\boldsymbol{F}$，即 $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}/\mathrm{d}\boldsymbol{F} = \boldsymbol{0}$。因此，$\boldsymbol{F}$ 的扰动仅通过 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$ 影响 $\boldsymbol{S}$。由公式（152）和（153），

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}} = {}& \mathrm{d}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}\\ & - \Delta t\, \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{p}}\right)^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{-1}.\end{aligned} \tag{156}$$

式（79）的热弹性定律给出 $\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \mathbb{Y} : \mathrm{d}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$，其中

$$Y_{ijkl} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial F^{\mathrm{e}}_{kl}} = C_{ijpq}\, F^{\mathrm{i}}_{lp}\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)_{kq}, \tag{157}$$

其中，C_{ijpq} 是 $\mathbb{C}^{\mathrm{c}}(T)$ 的分量，并且使用了次对称性 $C_{ijpq} = C_{ijqp}$。式（81）至（84）的流动法则给出 $\mathrm{d}\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} = \boldsymbol{\Lambda} : \mathrm{d}\boldsymbol{S}$，其中

$$\Lambda_{mnij} = \frac{\partial L^{\mathrm{p}}_{mn}}{\partial S_{ij}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{s}}} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\alpha}}{\partial \tau^{\alpha}}\, P^{\alpha}_{mn}\left[\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\right)^{\mathsf{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}\boldsymbol{P}^{\alpha}\right]_{ij}, \tag{158}$$

with

$$\frac{\partial \dot{\gamma}^{\alpha}}{\partial \tau^{\alpha}} = \frac{n\,\dot{\gamma}_0}{\xi^{\alpha}}\left|\frac{\tau^{\alpha}}{\xi^{\alpha}}\right|^{n-1}, \tag{159}$$

其中，式（158）方括号中的因子是分切应力相对于 $\boldsymbol{S}$ 的导数，该导数通过式（82）的曼德尔应力得到。结合式（156）至（159）可得一个用于应力敏感度的线性方程组，

$$\begin{aligned}&\left(\delta_{ic}\delta_{jd} + \Delta t\, Y_{ijkl}B_{klcd}\right)\frac{\mathrm{d}S_{cd}}{\mathrm{d}F_{ab}}\\ &\qquad = Y_{ijal}\left((\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}})^{-1}\right)_{bl},\end{aligned} \tag{160}$$

with

$$B_{klcd} = \left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{p}})^{-1}\right)_{km}\left((\boldsymbol{F}^{\mathrm{i}})^{-1}\right)_{nl}\Lambda_{mncd}, \tag{161}$$

这是一个 9×9 系统，在每次材料点的本构更新计算中求解一次，即在第2.5.2节的每次牛顿迭代中求解一次。对于应力相关的本征速度梯度，该系统还将包含敏感度 $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}/\mathrm{d}\boldsymbol{F}$和 $\partial \boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}/\partial \boldsymbol{F}^{\mathrm{i}}$。对于热本征变形，$\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{\mathrm{i}}/\mathrm{d}\boldsymbol{F} = \boldsymbol{0}$，这些贡献为零。逆塑性变形梯度的敏感度由式（152）得到，

$$\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}_{kl}}{\mathrm{d}F_{ab}} = -\Delta t\left((\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{p}})^{-1}\right)_{km}\Lambda_{mlcd}\frac{\mathrm{d}S_{cd}}{\mathrm{d}F_{ab}}. \tag{162}$$

最后，对式 (155) 求导可得一致切线

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}P_{ij}}{\mathrm{d}F_{ab}} = {}& \delta_{ia}\left((\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-\mathsf{T}}\right)_{bj}\\ & + F_{ik}\,\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}_{kl}}{\mathrm{d}F_{ab}}\left(\boldsymbol{S}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-\mathsf{T}}\right)_{lj}\\ & + \left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}\right)_{ik}\frac{\mathrm{d}S_{kl}}{\mathrm{d}F_{ab}}\left((\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}\right)_{jl}\\ & + \left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}\boldsymbol{S}\right)_{ik}\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}})^{-1}_{jk}}{\mathrm{d}F_{ab}}.\end{aligned} \tag{163}$$

式 (163) 中的四阶张量按照第2.5.2节的按行向量化方式排列后，即为式 (95) 中的矩阵 $\mathbf{L}_i$。

参考文献

[1] D. Peirce、R.J. Asaro 和 A. Needleman。晶体固体中的材料应变率依赖性与局部变形。《冶金学报》，31(12):1951–1976，1983。[2] R.A. Lebensohn 和 C.N. Tomé。用于模拟多晶体塑性变形和织构演化的自洽各向异性方法：在锆合金中的应用。《冶金学报与材料学报》，41(9):2611–2624，1993。[3] F. Roters、P. Eisenlohr、L. Hantcherli、D.D. Tjahjanto、T.R. Bieler 和 D. Raabe。晶体塑性有限元建模中的本构定律、运动学、均匀化与多尺度方法综述：理论、实验与应用。《材料学报》，58(4):1152–1211，2010。[4] Franz Roters、Philip Eisenlohr、Thomas R Bieler 和 Dierk Raabe。《晶体塑性有限元方法：材料科学与工程中的应用》。Wiley-VCH，魏因海姆，2010。[5] Zi-Su Zhao、Wei-Min Mao、F Roters 和 D Raabe。采用织构组分晶体塑性有限元方法优化铝织构以最大限度减少制耳的研究。《材料学报》，52(4):1003–1012，2004。[6] R. Becker 和 S. Panchanadeeswaran。晶粒相互作用对多晶体变形和局部织构的影响。《冶金学报与材料学报》，43(7):2701–2719，1995。[7] G Sachs。流动条件的推导。《德国工程师协会杂志》，72:734–736，1928。[8] Geoffrey Ingram Taylor。金属中的塑性应变。《金属学会杂志》，62:307–324，1938。[9] Kenjiro Terada、Muneo Hori、Takashi Kyoya 和 Noboru Kikuchi。计算均匀化方法中多尺度收敛的仿真。《固体与结构国际期刊》，37(16):2285–2311，2000。[10] Carlos N Tomé 和 Ricardo A Lebensohn。采用黏塑性自洽（VPSC）方法进行材料建模。爱思唯尔，阿姆斯特丹，2023。[11] M Berveiller 和 A Zaoui。将自洽方案扩展至塑性流动多晶体。《力学与固体物理学杂志》，26(5–6):325–344，1978。[12] D D Tjahjanto、P Eisenlohr 和 F Roters。采用基于晶粒簇的RGC方案对双相钢进行多尺度深拉深分析。《材料科学与工程中的建模与仿真》，23(4):045005，2015年4月。[13] P. Eisenlohr、M. Diehl、R.A. Lebensohn 和 F. Roters。有限应变下晶体弹黏塑性的谱方法求解。《国际塑性学报》，46:37–53，2013。[14] P. Shanthraj、P. Eisenlohr、M. Diehl 和 F. Roters。用于非均质材料晶体塑性模拟的数值稳健谱方法。《国际塑性学报》，66:31–45，2015年3月。[15] F. Roters、M. Diehl、P. Shanthraj、P. Eisenlohr、C. Reuber、S.L. Wong、T. Maiti、A. Ebrahimi、T. Hochrainer、H.-O. Fabritius、S. Nikolov、M. Friák、N. Fujita、N. Grilli、K.G.F. Janssens、N. Jia、P.J.J. Kok、D. Ma、F. Meier、E. Werner、M. Stricker、D. Weygand 和 D. Raabe。DAMASK——Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit：用于从单晶到构件尺度的多物理场晶体塑性、热学及损伤现象建模。《计算材料科学》，158:420–478，2019。[16] Ricardo A. Lebensohn 和 Anthony D. Rollett。多晶材料全场微观力学建模的谱方法。《计算材料科学》，173:109336，2020年2月15日。[17] Kenjiro Terada 和 Noboru Kikuchi。用于非均质介质多尺度分析的一类通用算法。《计算力学与工程方法》，190(40–41):5427–5464，2001。[18] Ikumu Watanabe、Kenjiro Terada、Eduardo Alberto de Souza Neto 和 Djordje Peri´c。采用双尺度有限元分析表征多晶金属的宏观抗拉强度。《力学与固体物理学杂志》，56(3):1105–1125，2008。[19] Christian Gierden、Julian Kochmann、Johanna Waimann、Bob Svendsen 和 Stefanie Reese。基于有限元-快速傅里叶变换的微观结构演化与宏观材料行为计算建模双尺度方法综述。《计算方法工程档案》，29(6):4115–4135，2022。[20] Fengbo Han、Franz Roters 和 Dierk Raabe。通过耦合全场晶体塑性谱求解器与隐式有限元求解器，对大应变塑性变形进行基于微观结构的多尺度建模。《国际期刊

f 塑性 y，125:97–117，2020。

[21] K. Terada、J. Kato、N. Hirayama、T. Inugai 和 K. Yamamoto。采用微观-宏观解耦方案的双尺度分析方法：在超弹性复合材料中的应用。《计算力学》，52(5):1199–1219，2013。[22] Olga Ibragimova、Abhijit Brahme、Waqas Muhammad、Julie Lévesque 和 Kaan Inal。用于面心立方材料的新型基于人工神经网络的晶体塑性模型及其在非单调应变路径中的应用。《国际塑性学报》，144:103059，2021。[23] Olga Ibragimova、Abhijit Brahme、Waqas Muhammad、Daniel Connolly、Julie Lévesque 和 Kaan Inal。用于预测金属局部变形的基于卷积神经网络的晶体塑性有限元框架。《国际塑性学报》，157:103374，2022。[24] Colin Bonatti 和 Dirk Mohr。表示弹塑性固体的循环神经网络模型中自洽性的重要性。《力学与固体物理学杂志》，158:104697，2022。[25] Colin Bonatti、Bekim Berisha 和 Dirk Mohr。从 CP-FFT 到 CP-RNN：晶体塑性的循环神经网络代理模型。《国际塑性学报》，158:103430，2022。[26] Yuanzhe Hu、Guowei Zhou、Myoung-Gyu Lee、Peidong Wu 和 Dayong Li。考虑微结构相互作用的多晶体跨尺度建模时序图神经网络。《国际塑性学报》，179:104017，2024。[27] Zeliang Liu、C. T. Wu 和 M. Koishi。用于非均质材料多尺度拓扑学习和加速非线性建模的深度材料网络。《计算力学与工程方法》，345:1138–1168，2019年3月1日。[28] Sebastian Gajek、Matti Schneider 和 Thomas Böhlke。深度材料网络的微观力学。《力学与固体物理学杂志》，142:103984，2020。[29] Van Dung Nguyen 和 Ludovic Noels。从相互作用视角重新审视基于微观力学的材料网络；面向多相复合材料的稳健高效实现。《欧洲力学杂志：*A*辑/固体》，91:104384，2022。[30] Ting-Ju Wei、Wen-Ning Wan 和 Chuin-Shan Chen。深度材料网络：概述、应用与当前发展方向。《多尺度科学与工程》，8:1–19，2026。[31] Pavan Bhat Keelanje Srinivas、Matthias Kabel 和 Matti Schneider。通过基于位移的层合板公式和用于基于柔度的疲劳模型的新型采样技术，实现深度材料网络的快速离线训练。《计算力学与工程方法》，449:118517，2026。[32] Wen-Ning Wan、Ting-Ju Wei、Tung-Huan Su 和 Chuin-Shan Chen。解码材料网络：探索深度材料网络和基于相互作用的材料网络的性能。《力学杂志》，40:796–807，2024。[33] Zeliang Liu 和 C. T. Wu。探索数据驱动的多尺度力学中深度材料网络的三维架构。《力学与固体物理学杂志》，127:20–46，2019年6月。[34] Ting-Ju Wei 和 Chuin-Shan Chen。复合材料微结构基础模型：重建、刚度与非线性行为预测。《材料与设计》，257:114397，2025。[35] Jimmy Gaspard Jean、Tung-Huan Su、Szu-Jui Huang、Cheng-Tang Wu 和 Chuin-Shan Chen。图增强深度材料网络：结合微结构信息学的多尺度材料建模。《计算力学》，75(1):113–136，2025。[36] Van Dung Nguyen 和 Ludovic Noels。基于相互作用的材料网络：用于（多孔）微结构材料的通用框架。《计算力学与工程方法》，389:114300，2022。[37] Mohamed Haddad、Van Dung Nguyen、Ludovic Noels 和 Issam Doghri。用于具有随机孔隙率分布的黏弹-黏塑性多孔结构多尺度建模的深度材料网络。《欧洲力学杂志：*A*辑/固体》，120:106243，2026。[38] Dongil Shin、Peter Jefferson Creveling、Scott Alan Roberts 和 Rémi Dingreville。用于热导率问题的深度材料网络：在机织复合材料中的应用。《计算力学与工程方法》，431:117279，2024。[39] Dongil Shin、Ryan Alberdi、Ricardo A Lebensohn 和 Rémi Dingreville。用于预测复合材料热机械响应的深度材料网络方法。《复合材料*B*辑：工程》，272:111177，2024。[40] Tianyi Li。微观力学引导的参数化深度材料网络：用于具有变化形貌的非均质材料物理行为预测。《计算力学与工程方法》，419:116687，2024。

[41] Ting-Ju Wei、Yen-Ming Lu 和 Chuin-Shan Chen。用于压电复合材料均匀化的深度材料网络。《计算力学与工程方法》，464:119536，2027。[42] Ting-Ju Wei、Tung-Huan Su 和 Chuin-Shan Chen。用于多晶材料建模的方向感知交互式深度材料网络。《计算力学与工程方法》，441:117977，2025。[43] Ting-Ju Wei、Tung-Huan Su 和 Chuin-Shan Chen。基于纹理可泛化深度材料网络的多晶建模参数化多尺度代理框架。《计算力学与工程方法》，461:119250，2026。[44] Ting-Ju Wei 和 Chuin-Shan Chen。通过自监督微观结构预训练，对未见过的多晶织构进行高效非线性多尺度预测，2026。[45] Russell E Marki 和 Marko Knezevic。基于广义球谐函数对取向分布进行紧凑表示的非线性优化。《力学与固体物理学杂志》，187:105609，2024。[46] H-J Bunge。《材料科学中的织构分析：数学方法》。爱思唯尔，阿姆斯特丹，2013。[47] A Ma、F Roters 和 D Raabe。一种基于位错密度并纳入几何必需位错的晶体塑性有限元法本构模型。《材料学报》，54(8):2169–2179，2006。[48] Ronan Madec 和 Ladislas P Kubin。高温下面心立方金属和体心立方金属中的位错强化。《材料学报》，126:166–173，2017。[49] Nikhil Prabhu 和 Martin Diehl。将基于物理的强化系数纳入唯象晶体塑性模型。《先进工程材料》，28(6):e202500390，2026。[50] Saiyi Li、Irene J. Beyerlein、David J. Alexander 和 Sven C. Vogel。铜在多道次等通道转角挤压过程中的织构演化：中子衍射表征与多晶建模。《材料学报》，53(7):2111–2125，2005。[51] F Bachmann、Ralf Hielscher 和 Helmut Schaeben。使用 MTEX 进行织构分析——免费开源软件工具箱。《固态现象》，160:63–68，2010。

算法1 非线性ODMN局部化问题的Newton–Raphson解法

输入： 指定的宏观状态 $\boldsymbol{F}^{*}, T^{*}, \Delta\overline{t^{*}}$；参考材料节点状态 $\{\mathcal{H}_i^{\mathrm{ref}}\}$；初始相互作用向量估计$\mathbf{A}^{(0)}$
输出： 收敛标志； $\boldsymbol{P}$； $\overline{\mathbf{L}}$；收敛的相互作用向量 $\mathbf{A}$；材料节点试探状态 $\{\mathcal{H}_i^{\mathrm{trial}}\}$

$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}^{(0)}, \lambda \leftarrow \lambda_0$ ▷初始化局部化求解
$\mathbf{A}_{\mathrm{best}} \leftarrow \mathbf{A}, \quad r_{\mathrm{best}} \leftarrow +\infty$
对于 $k = 0, 1, \ldots, k_{\max}$ **do**
  对于 $i = 1, \ldots, 2^N$ **执行**
    $\mathrm{vec}(\boldsymbol{F}_i) \leftarrow \mathrm{vec}(\boldsymbol{F}^{*}) + \boldsymbol{D}_i\mathbf{A}$ ▷公式（92）
    $(\boldsymbol{P}_i, \mathbf{L}_i, \mathcal{H}_i^{\mathrm{trial}}) \leftarrow$ 材料更新$(\boldsymbol{F}_i, T^{*}, \Delta t^{*}, \mathcal{H}_i^{\mathrm{ref}})$ ▷ 第2.5.1节
  结束循环
  $\boldsymbol{r} \leftarrow \sum_{i=1}^{2^N} w_i \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}}\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{P}_i)$ ▷式（94）
  $p_{\max} \leftarrow$最大值$_i \ \|\boldsymbol{P}_i\|_{\max}$
  $r_{\mathrm{tol}} \leftarrow$ 最大值$[\epsilon_{\mathrm{abs}}, \epsilon_{\mathrm{rel}}\, d_{\max}$ 最大值$(p_{\max}, p_{\mathrm{floor}})]$ ▷式（100）
  如果 $\|\boldsymbol{r}\|_\infty < r_{\mathrm{best}}$ **那么**
    $\mathbf{A}_{\mathrm{best}} \leftarrow \mathbf{A}, r_{\mathrm{best}} \leftarrow \|\boldsymbol{r}\|_\infty$
  结束如果
  失败 $\leftarrow$ (局部本构失效) $\vee$(发散) $\vee$ (迭代停滞)
  如果失败 **则**
    $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}_{\mathrm{best}}$ ▷恢复最佳可容许局部化状态
    返回 失败
  结束条件判断
  如果 $\|\boldsymbol{r}\|_\infty \le r_{\mathrm{tol}}$ **则**
    $\lambda \leftarrow \lambda_0$
    $\boldsymbol{K} \leftarrow \sum_{i=1}^{2^N} w_i \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{L}_i \boldsymbol{D}_i$ ▷公式（96）
    $\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}} \leftarrow \boldsymbol{K} + \lambda_0$最大值$_j\, |K_{jj}| \boldsymbol{I}$ ▷公式（99）
    $\overline{\boldsymbol{P}} \leftarrow \sum_{i=1}^{2^N} w_i \boldsymbol{P}_i$ ▷公式（104）
    计算 $\overline{\mathbf{L}}$ ▷公式（109）
    返回 已收敛
  结束 if
  $\boldsymbol{K} \leftarrow \sum_{i=1}^{2^N} w_i \boldsymbol{D}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{L}_i \boldsymbol{D}_i$ ▷公式（96）
  $\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}} \leftarrow \boldsymbol{K} + \lambda$最大值$_j\, |K_{jj}| \boldsymbol{I}$ ▷公式（99）
  求解 $\boldsymbol{K}_{\mathrm{reg}} \delta\mathbf{A} = -\boldsymbol{r}$ ▷公式（97）
  $\mathbf{A}^{(k)} \leftarrow \mathbf{A}, \quad \eta \leftarrow 1, \quad r_{\mathrm{LS}} \leftarrow +\infty, \quad$ 已接受 $\leftarrow$ false
  对于 $q = 0, 1, \ldots, q_{\max}$ **执行**
    $\mathbf{A}^{\mathrm{trial}} \leftarrow \mathbf{A}^{(k)} + \eta\delta\mathbf{A}$
    在$\mathbf{A}^{\mathrm{trial}}$处重新评估 $\boldsymbol{r}^{\mathrm{trial}}$
    若 $\|\boldsymbol{r}^{\mathrm{trial}}\|_\infty < r_{\mathrm{LS}}$ **则**
      $\mathbf{A}_{\mathrm{LS}} \leftarrow \mathbf{A}^{\mathrm{trial}}, \quad r_{\mathrm{LS}} \leftarrow \|\boldsymbol{r}^{\mathrm{trial}}\|_\infty$ ▷ 保留测试过的最佳步长
    结束条件判断
    如果 $\|\boldsymbol{r}^{\mathrm{trial}}\|_\infty \le (1 - c\eta)\|\boldsymbol{r}\|_\infty$ **则**
      $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}^{\mathrm{trial}}$, 接受 $\leftarrow$ true ▷公式（98）
      中断
    结束条件判断
    $\eta \leftarrow \eta/2$ ▷ 回溯线搜索
  结束循环
  如果未接受 **，则**
    $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}_{\mathrm{LS}}$
    $\lambda \leftarrow$ 最小值$[$最大值$(100\lambda, \ 10^{-8})\ 10^{-2}]$ ▷增加牛顿阻尼
  否则如果 $\eta = 1$**则**
    $\lambda \leftarrow$ 最大值$(\lambda_0, \ \lambda/10)$ ▷完成一次完整牛顿步后减小阻尼
  结束如果
结束循环
$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A}_{\mathrm{best}}$
返回失败

算法2 带局部自适应子步进的积分点ODMN本构更新

输入： 宏观增量 $\boldsymbol{F}_n \to \boldsymbol{F}_{n+1}, \overline{T}_n \to \overline{T}_{n+1}, \Delta t$；收敛的材料节点历史 $\mathcal{H}_n$；收敛的相互作用向量 $\mathbf{A}_n$

输出： Abaqus 应力和 DDSDDE；试算ODMN状态 $\mathcal{H}_{n+1}^{\mathrm{trial}}$；若局部恢复失败，则发出全局回退请求

加载收敛的材料节点历史 $\mathcal{H}_n$
$\boldsymbol{\nu}^{(0)} \leftarrow \boldsymbol{\nu}_n$ ▷从前一个收敛的相互作用向量初始化
已收敛 $\leftarrow$ ODMNSOLVE($\boldsymbol{F}_{n+1}, \overline{T}_{n+1}, \Delta t, \mathcal{H}_n, \mathbf{A}^{(0)}$) ▷算法1
若未收敛**则**
  $\mathcal{H}^{\mathrm{ref}} \leftarrow \mathcal{H}_n$，$\boldsymbol{\nu}^{\mathrm{ref}} \leftarrow \boldsymbol{\nu}_n$ ▷ 恢复增量起始收敛状态
  $s \leftarrow 0$，$\Delta s \leftarrow \beta_{\mathrm{cut}}$ ▷ 初始化局部路径细分
  当 $s < 1$**时执行**
    $\Delta s \leftarrow \min(\Delta s,\ 1 - s)$ ▷ 将试探点限制在规定增量内
    $s^* \leftarrow s + \Delta s$ ▷ 试探加载路径分数
    $\overline{\boldsymbol{F}}^{\,*} \leftarrow \overline{\boldsymbol{F}}_n + s^* \left(\overline{\boldsymbol{F}}_{n+1} - \overline{\boldsymbol{F}}_n\right)$ ▷ 插值变形梯度路径
    $\overline{T}^{\,*} \leftarrow \overline{T}_n + s^* \left(\overline{T}_{n+1} - \overline{T}_n\right)$ ▷ 插值规定的温度路径
    $\Delta t^* \leftarrow \Delta s\, \Delta t$ ▷ 保持施加的加载速率
    已收敛 $\leftarrow$ 深度材料网络求解($\boldsymbol{F}^*, \overline{T}^*, \Delta t^*, \mathcal{H}^{\mathrm{ref}}, \mathbf{A}^{\mathrm{ref}}$) ▷算法1
    如果已收敛**则**
      $s \leftarrow s^*$ ▷ 推进收敛路径比例
      $\mathcal{H}^{\mathrm{ref}} \leftarrow \mathcal{H}^{\mathrm{trial}}$，$\mathbf{A}^{\mathrm{ref}} \leftarrow \mathbf{A}$ ▷ 推进局部参考状态
      如果 $s < 1$**则**
        $\Delta s \leftarrow \min(1 - s,\ \beta_{\mathrm{grow}} \Delta s)$ ▷自适应子步增长
      结束 if
    else
      恢复 $\mathcal{H}^{\mathrm{ref}}$ 并$\mathbf{A}^{\mathrm{ref}}$ ▷ 回滚到上一个收敛的局部状态
      $\Delta s \leftarrow \beta_{\mathrm{cut}} \Delta s$ ▷ 局部子步回退
      如果 $\Delta s < \Delta s_{\min}$ **则**
        请求 Abaqus 进行全局时间增量回退 ▷ 局部恢复已耗尽
        返回 失败
      结束条件判断
    结束条件判断
  结束循环
结束条件判断
将（$\boldsymbol{P}$，$\mathbb{L}$）转换为（$\boldsymbol{\sigma}$，$\mathbb{C}^{\mathrm{ABQ}}$） ▷公式（110）和（120）
应力 $\leftarrow \boldsymbol{\sigma}$，DDSDDE $\leftarrow \mathbb{C}^{\mathrm{ABQ}}$ ▷Abaqus UMAT 输出
$\mathcal{H}_{n+1}^{\mathrm{trial}} \leftarrow \mathcal{H}^{\mathrm{trial}}$ ▷存储最终收敛状态
返回已收敛