

深度材料網路：讓金屬成形模擬看得見晶粒組織

Deep Material Networks: Making Grain Structures Visible to Metal Forming Simulation

李國順、魏廷儒、陳俊杉

Guo-Chi Li, Ting-Ju Wei, Chuin-Shan Chen

金屬產品的規格書上有成分、強度與硬度，卻沒有織構，但在沖壓、軋延、抽線與鍛造的現場，凸耳、回彈與批次間的成型窗口差異，往往正是織構造成的。要讓模擬看得見織構，必須讓巨觀零件分析與微觀組織（晶粒）計算同時進行，而這種雙尺度模擬（two-scale finite element, FE²）過去因計算量過於龐大，始終停留在學術示範階段。本文介紹本團隊建立的一套以深度材料網路（deep material network, DMN）為核心的雙尺度製程模擬技術。DMN 的外形是階層網路模型，內核則是力學：每個節點都是滿足應力平衡與變形相容的均質化單元，因此只需線彈性資料即可完成訓練，換上晶體塑性等非線性材料模型後即可直接外插使用，大幅降低建模成本。在此基礎上，本團隊於計算力學旗艦期刊《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, CMAME》發表〈ODMN〉文章，讓模型首度能精確描述多晶織構及其演化；並進一步發表〈TACS-GNN-ODMN〉文章，背向散射電子繞射（electron backscatter diffraction, EBSD）所量到的織構可直接推論出材料模型，換一批料不需重新訓練，對四組未參與訓練的多晶織構，應力預測的平均相對誤差低於 2%。搭配訊息傳遞介面（message passing interface, MPI）平行化的雙尺度求解器，已完成嵌入 27,676 個多晶代理模型的深抽成形模擬，以核心時間計較 FE² 等效計算加速三個數量級。模擬中沒有任何異向性擬合參數，四個凸耳的方位與高度全由各積分點的晶粒方位在成形過程中算出；模型並可直接輸出零件上任一位置的織構，供與 EBSD 量測比對，或作為下一道製程分析的輸入。同一框架已推進至全雙尺度鍛造模擬。本文說明這套技術的原理、導入所需的資料與驗證方式，以及在各類金屬製程中可切入的應用場景，並誠摯邀請國內金屬產業夥伴共同合作。

Material certificates specify composition, strength, and hardness, but not texture-yet on the stamping, rolling, wire-drawing, and forging floor, earing, springback, and coil-to-coil variation in the forming window are frequently texture-driven. Making texture visible to simulation requires solving the macroscopic part and the microscopic grain structure simultaneously, and such two-scale finite element (FE²) analyses have long been computationally prohibitive. This article introduces a two-scale process simulation technology built around the Deep Material

Network (DMN). Structured as a hierarchical network but composed of mechanically consistent homogenization units, a DMN is trained solely on linear elastic data and extrapolates directly to nonlinear constitutive laws such as crystal plasticity, sharply reducing modeling cost. Building on this, our team published ODMN paper in Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (CMAME), enabling faithful representation of polycrystalline texture and its evolution, followed by TACS-GNN-ODMN paper, which converts an electron backscatter diffraction (EBSD) texture measurement directly into a ready-to-use material model without retraining, with a mean stress-prediction error below 2% on four previously unseen polycrystalline microstructures. Coupled with a message passing interface parallel two-scale solver, a fully two-scale deep drawing simulation embedding 27,676 polycrystal surrogates has been completed with a core-time speed-up of three orders of magnitude over an FE² equivalent. The model contains no fitted anisotropy parameters. The position and height of the four ears follow entirely from the grain orientations at each integration point, and the texture anywhere in the part comes out as a direct output-pole figures that can be compared against EBSD measurements or carried into the next forming operation. The same framework has been extended to fully two-scale forging. We describe the underlying principles, the data and validation required for deployment, and the process applications this technology enables.

一、前言：織構，沒有寫在規格書上的性能參數

金屬材料的規格書上，寫著成分、降伏強度、抗拉強度、延伸率與硬度。但在沖壓廠、抽線廠與鍛造廠的現場，工程師都知道有一項參數規格書沒寫，卻直接影響良率：同一支料號、同樣通過驗收的兩批料，成型窗口可能相差很多；換了供應商，模具就得重調。

原因藏在肉眼看不見的尺度。金屬是由數以億計的晶粒堆疊而成，每顆晶粒都有自己的方位。經過軋延、抽拉、鍛造之後，這些方位不再是隨機分布，而是聚集在幾個特定取向附近——這就是晶體織構 (crystallographic texture)。織構讓材料帶有方向性：同一片板材沿不同方向拉伸，降伏強度與延展性並不相同。深抽杯緣的凸耳 (earring)、卸模後的回彈 (springback)、抽線後的異向性、鍛件不同部位的性能落差，追根究柢都是織構在巨觀尺度上的表現。

織構並非量不到。電子背向散射繞射 (electron backscatter diffraction, EBSD) 與 X 光繞射 (X-ray diffraction, XRD) 都是成熟的量測技術，國內各大學與法人單位都有能量測的設備。真正的關鍵在於：**量到的織構，用不進模擬**。現今業界常用成形分析使用的唯象 (phenomenological) 降伏準則，例如：鋼板常用的 Hill48⁽¹⁾、鋁板常用的 Yld2000-2d⁽²⁾，是以數個待定參數描述材料的異向性，參數由不同方向的拉伸試片與雙軸試驗擬合而得。這套方法成熟且有效，但模型裡並沒有「織構」這個變數：換一批料就得重新取樣、重做試驗、重新擬合；成形過程中織構會隨變形持續改變，固定的降伏面也無法描述這段演化。

國際上的因應之道是整合計算材料工程 (integrated computational materials engineering, ICME)：以計算模型串聯「製程－微觀組織－性能」，把大部分試誤搬到電腦裡預先完成⁽³⁾。福特汽車的「虛擬鋁鑄件」(virtual aluminum castings) 專案證實，ICME 可將產品與製程開發時程縮短 15－25%⁽⁴⁾。而要把 ICME 真正落實到金屬成形，缺的核心拼圖，是能同時解析巨觀零件與微觀組織的雙尺度模擬。

本文介紹本團隊近年建立的一套雙尺度製程模擬技術：以深度材料網路 (deep material network, DMN) 為核心，把量測到的織構直接轉換成模擬可用的材料模型，嵌入沖壓、鍛造

等成形分析中，不僅算出凸耳與回彈，也算出零件各處的纖構如何演化。相關成果發表於計算力學旗艦期刊《Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, CMAME》^(5, 6)，並已完成初步工業規模的驗證。

臺灣是全球金屬加工重鎮：手工業產業約有 2,400 家業者、近 5 萬名從業人員，年產值逾新台幣 1,300 億元，穩居全球前三大出口國⁽⁷⁾；扣件產業 2024 年產值約新台幣 1,540 億元，同樣名列全球前四大出口國⁽⁸⁾。加上上游的鋼鐵、線材與銅材，以及下游的鍛造、沖壓與切削加工，這條供應鏈長期是臺灣製造業的骨幹。我們相信，這套技術正是這條供應鏈往高值化邁進時所需要的工具。

二、要算得見晶粒，難在哪裡

要讓模擬「看得見晶粒」，物理基礎早已成熟，稱為晶體塑性 (crystal plasticity)。它描述的是：金屬的塑性變形來自差排在特定滑移系上的滑動；某個滑移系會不會啟動，取決於作用其上的剪應力是否達到臨界值，而這又由晶粒方位相對於外力的方向決定；滑移在造成變形的同時也讓晶格轉動，這正是纖構演化的來源。

實務上的做法，是把數百至數千顆晶粒放進一個代表性體積元素 (representative volume element, RVE)，對每顆晶粒解晶體塑性方程，同時滿足晶粒之間的力平衡與變形相容，再把結果「均質化」成一組等效的巨觀應力與剛度。以晶體塑性有限元素法 (crystal plasticity finite element method, CPFEM) 或以快速傅立葉轉換 (fast fourier transform, FFT) 為基礎的求解器 (如開源軟體 Dusseldorf Advanced Material Simulation Kit, DAMASK⁽⁹⁾) 都能把這件事算得很準。

問題出在算力成本。單一 RVE 跑完一條非線性應力之應變歷程，動輒需要數十萬 CPU 秒。若要模擬整個零件，理論上可採 FE^2 方法⁽¹⁰⁾，其方法將巨觀有限元素模型的每個積分點內嵌一個微觀 RVE，巨觀把變形梯度下傳，微觀回傳均質化應力與切線模數，兩個尺度逐步互相回饋 (圖 1)。這在數學上完全正確，在算力上卻是災難。以百萬元素等級的沖壓模型估算，數萬個積分點乘上數百個時間增量，再乘上每個增量內的平衡疊代次數，微觀求解次數輕易突破 10^8 次。即使動用整座超級電腦，也難以在工程時程內完成。「算得準卻算不動」，正是雙尺度模擬數十年來多停留在學術示範的根本原因。

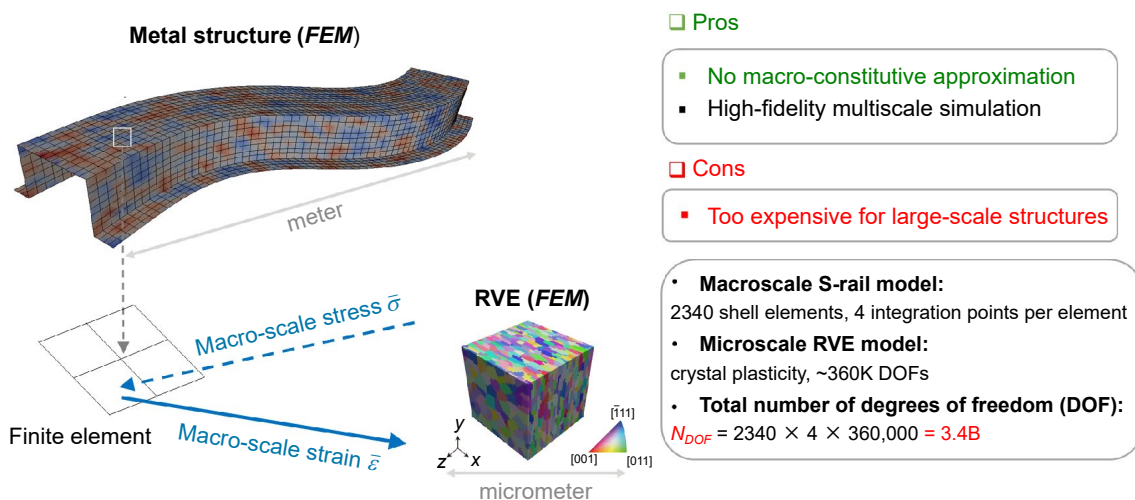


圖 1. 傳統雙尺度 (FE2) 模型說明圖。自由度太龐大 (約 34 億) 使計算無法在工程時間內完成。

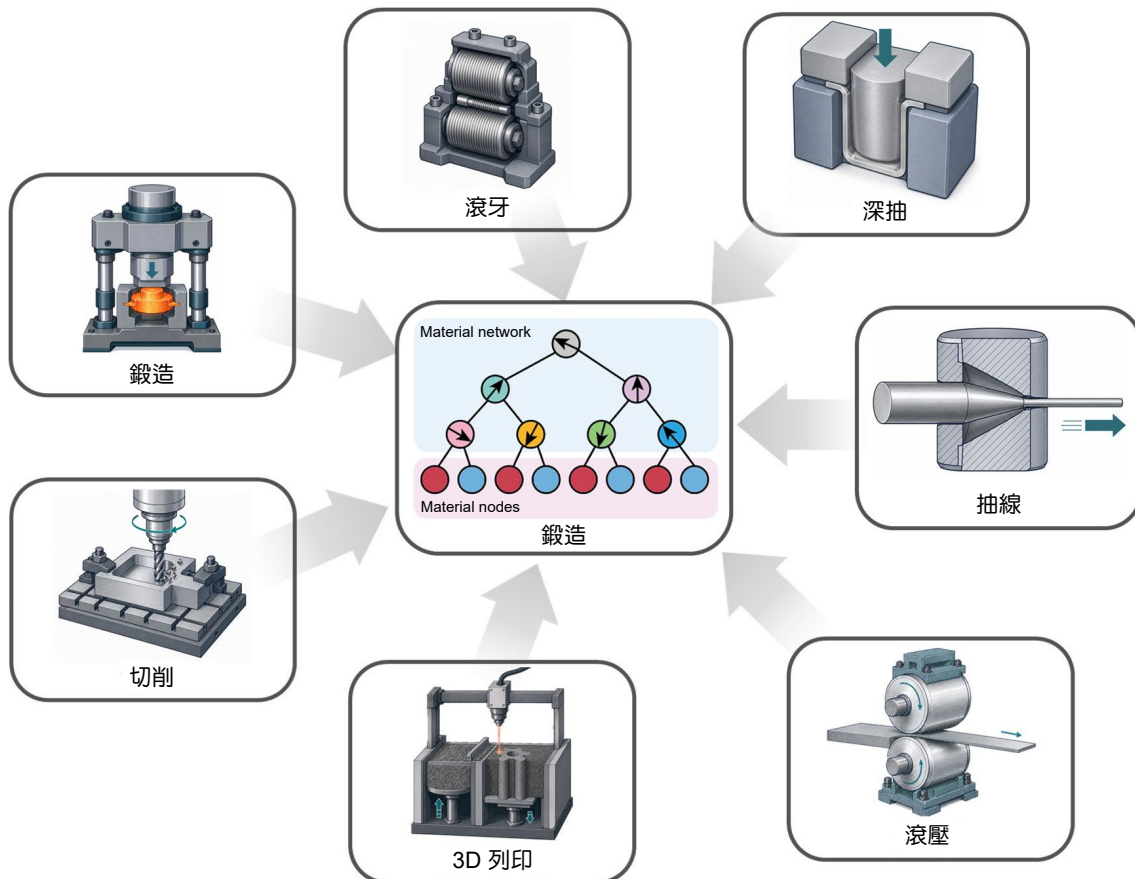


圖 2. 展示深度材料網路 (deep material network, DMN) 的通用建模概念。外圍為鍛造、滾壓、深抽、滾牙、抽線、切削與積層製造等製程，中央方框即一個 DMN，分為上下兩部分。上半部藍色區為材料網路 (material network)：它是一棵二元樹，每個節點代表一個兩相疊層的均質化單元，節點內的箭頭表示該疊層的介面法向，也就是這個單元的疊層方向，除介面法向之外，每個節點還包含體積分率。下半部粉色區為材料節點 (material nodes)：它們是樹的葉節點，每一個代表一小塊均勻材料並掛上自己的組成律，圖中以紅、藍兩色區分兩個材料相，每個葉節點上也包含體積分率。模型要學的就是這些權重與疊層方向；不同製程的差異只反映在這組參數上，因此同一套架構即可描述各類製程中材料的流動、變形與交互作用。註：外圍製程示意圖由 AI 生成，僅供參考。

要讓雙尺度模擬真正走向工程應用，關鍵在於用一個又快又準的「代理模型 (surrogate model)」取代微觀端的全域求解，而且這個代理模型必須夠快到可以被呼叫上億次，準到仍然能反映晶粒方位的物理。深度材料網路，就是為此而生 (圖 2)。

【名詞說明】RVE、均質化與切線模數

代表性體積元素 (representative volume element, RVE)：一小塊統計上足以代表整體的材料樣本；對多晶金屬而言就是一群晶粒的集合，其方位統計等於量測到的纖構。均質化 (homogenization)：把 RVE 內部不均勻的應力與應變場平均成一組等效的巨觀量，使巨觀模擬可以把這塊材料視為一個點。一致性切線模數 (consistent tangent)：應力對應變的導數，是隱式有限元素法進行平衡疊代時必須提供的量；它準不準，直接決定巨觀分析收斂得快不快、甚至收不收斂。這也是許多「AI 材料模型」無法真正嵌入商用軟體的關鍵原因。

三、深度材料網路：一個由力學組成的網路

深度材料網路是 2019 年由 Liu 與 Wu 等人提出的方法^(11, 12)。它常被歸類為「AI 材料模型」，但這個標籤容易造成誤解，它與一般用大量資料迴歸出來的神經網路，有本質上的差異。

DMN 的基本單元，是材料力學中最古老的解析解之一：兩相疊層 (two-phase laminate)。兩層材料黏合在一起承受變形時，介面上的牽引力必須連續、變形必須相容；由這兩個條件可以解析地寫出雙層結構的等效剛度。這一步不需要訓練，也不需要資料，是純粹的力學。DMN 的做法，是把這個單元堆成一棵二元樹：底層的葉節點是各個材料相，往上每一層將兩個子節點合併為一個等效介質，一路合併到樹根，就得到整個 RVE 的等效行為 (圖 3)。

模型網路要「學」的，只有每個節點的權重 (相當於體積分率) 與疊層方向。換句話說，DMN 學的是 RVE 的幾何拓撲，不是材料的反應。這一點帶來三項與傳統 AI 黑盒子神經網路截然不同的性質⁽¹³⁾：

1. **只需線彈性資料訓練**。既然學的是幾何，離線訓練只需要數百組線彈性剛度資料。在 RVE 上跑線彈性均質化即可取得，計算成本很低。訓練完成後，把節點的材料模型換成任何非線性組成律 (塑性、黏彈性、超彈性、晶體塑性)，網路就能直接外插預測，完全不需要非線性訓練資料。對導入者而言，這代表建模的前置成本從「建一個昂貴的非線性資料庫」降到「跑一批線彈性分析」。
2. **物理自洽**。DMN 由構造即滿足熱力學第二定律與能量凸性，外插到訓練範圍之外也不會產生負耗散或非物理的軟化，這是一般迴歸模型無法保證的。
3. **預測速度**。線上預測較全域模擬快三個數量級以上。

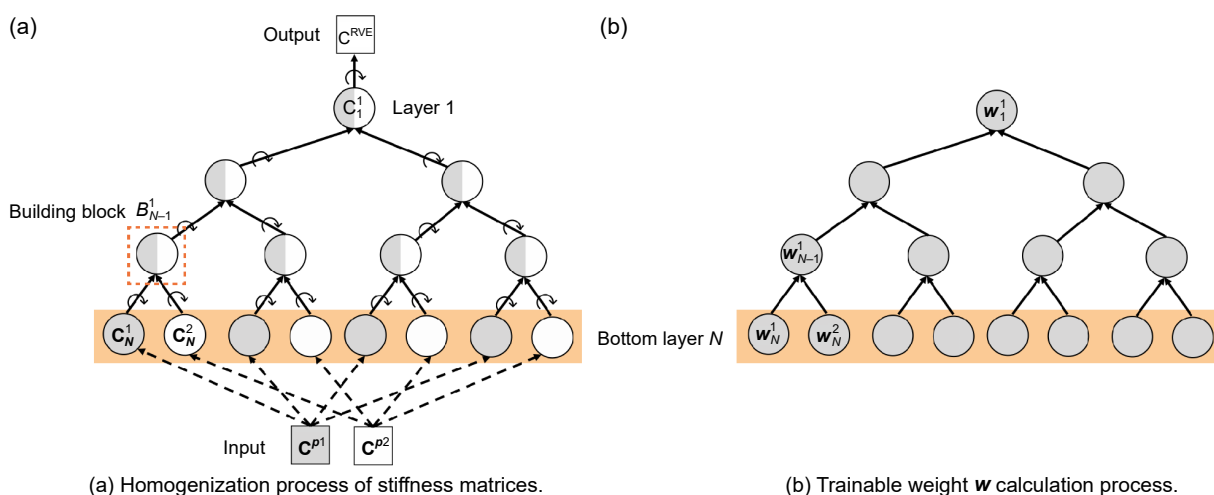


圖 3. 深度材料網路之階層式均質化架構。(a) 剛度矩陣由底層向上逐層均質化：最底層 (第 N 層) 的葉節點分別接收兩個材料相的剛度 C^{p1} 與 C^{p2} ；相鄰兩個節點構成一個兩相疊層單元 (building block)，依介面牽引力連續與變形相容的條件解析地合併成一個等效節點 C^p_l (下標 l 為層數，上標 p 為該層中的節點序號)；圖中橘色虛線框起者，即第 $N-1$ 層第一個疊層單元 B^1_{N-1} 合併後的節點。逐層向上合併至樹根即得整個 RVE 的等效剛度 C^{RVE} ；節點旁的彎曲箭頭代表該單元的疊層方向，是訓練參數之一。(b) 權重 w 的計算流程：底層各節點的權重 w^p_N 由訓練決定，上層節點的權重為其兩個子節點之和，一路加總至樹根的 w^1_1 ；權重相當於各節點所佔的體積分率 (取自參考文獻⁽¹⁴⁾)。

這些性質讓 DMN 很快走出實驗室。以隱式 UMAT¹ 在 ABAQUS² 每個積分點嵌入 DMN 的 FE-DMN 方法，已完成超過 900 萬自由度的無人機結構雙尺度分析⁽¹⁵⁾；Ansys LS-DYNA³ 團隊更與臺灣的科盛科技 (Moldex3D) 及本田技研合作，把射出成形模擬算出的纖維配向資訊轉為 DMN 代理模型，用於車用複合材料的大規模碰撞分析⁽¹⁶⁾。也就是說，DMN 在纖維複合材料領域已通過工業級驗證。下一個問題自然是：金屬材料呢？

四、ODMN：讓網路讀懂纖維

多晶金屬對 DMN 是更嚴苛的考驗。複合材料的微觀結構主要由幾何主導 (纖維形狀、配向、體積分率)；多晶金屬則不同，巨觀性能由連續分布的晶體方位主宰，而且這個分布還會隨變形持續演化。

原始 DMN 的旋轉自由度同時扮演兩種角色：既要描述晶體方位，又要決定疊層介面的方向，兩者糾纏在一起，訓練出的方位不具物理意義，自然無法描述纖維。後續的互動式材料網路 (interaction-based material network, IMN)⁽¹⁷⁾ 以 Hill-Mandel 條件重建了理論基礎、數值上更穩健，卻採「無旋轉」設計，先天無法表述晶體方位。

本團隊提出的方位感知深度材料網路 ODMN (orientation-aware interaction-based deep material network)，於 2025 年發表於計算力學領域旗艦期刊 CMAME⁽⁵⁾，補上了這塊拼圖。核心作法是「解耦」：在每個材料節點加入可訓練的晶體方位參數，專責描述纖維；另以獨立的互動機制學習 RVE 內部的應力平衡方向，專責均質化 (圖 4)。兩者分開之後，網路才真正讀得懂纖維。

僅以線彈性資料完成訓練後，ODMN 即可：

- 重建 RVE 的初始纖維，極圖與全域模擬高度吻合。
- 銜接晶體塑性組成律，精確預測單調拉伸、循環載荷與剪切下的非線性應力－應變反應，並捕捉應變速率效應。
- 追蹤大變形下的纖維演化，以及各相內部的應力分布統計。
- 相較 DAMASK 全域模擬加速二至三個數量級⁽⁵⁾。

圖 5 把 ODMN 在雙尺度模擬中一次呼叫所做的事，拆成依序執行的四個步驟：

1. 下傳 (downscaling)：巨觀有限元素在該積分點算出變形梯度 $\bar{\mathbf{F}}$ (本文中符號上加橫線者皆為巨觀量)，網路再依各節點的權重與疊層方向，把它分配成每個材料節點各自的局部變形梯度 $\mathbf{F}^i$ 。
2. 局部組成律評估：每個材料節點 $\mathbf{M}^i$ 就是一小塊均勻材料，以自己的組成律由 $\mathbf{F}^i$ 算出該節點的應力與局部切線模數；塑性部分經由塑性速度梯度 $\mathbf{L}_p^i$ 計算，彈性部分則經由右伸長張量 $\mathbf{U}^i$ ，因此可換用唯象晶體塑性、差排密度型晶體塑性或超彈性等不同模型。
3. 非線性求解：兩相疊層在介面上必須牽引力連續、變形相容，這在能量上等價於 Hill-Mandel 條件；網路以 Newton-Raphson 疊代調整節點之間的交互作用量，直到每一個疊層單元都滿足此條件為止。
4. 上傳 (upscaling)：把收斂後各節點的應力依權重平均，得到巨觀第一 Piola-Kirchhoff 應力 $\bar{\mathbf{P}}$ ；同時對其解析微分，得到圖中一併回傳的一致性切線模數 $\mathbf{L} = \frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial \bar{\mathbf{F}}}$ ，兩者都交還給巨觀求解器，完成這一次呼叫。

1 ABAQUS 中的用戶定義材料子程式 (User-defined Material Subroutine)

2 商用有限元分析軟體

3 商用有限元分析軟體

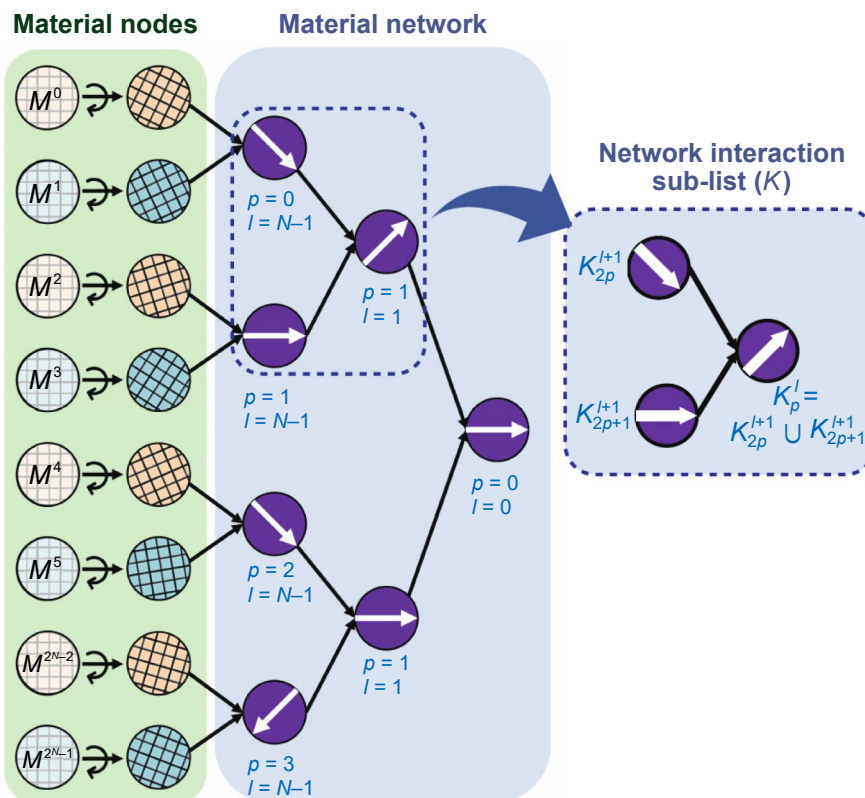


圖 4. ODMN 架構。左側綠色區為材料節點 (material nodes)，共 2^N 個，依序記為 M^0 至 M^{2^N-1} ；每個材料節點攜帶一組可訓練的晶體方位 (圖中以不同方向的網格花紋表示) 與權重，這就是「方位感知」機制，材料的纖構即由這 2^N 組方位與權重的統計來描述。中央藍色區為材料網路 (material network)：紫色圓為網路節點，圓內的白色箭頭代表該節點的交互作用方向，也就是該處的應力平衡方向；節點以 (l, p) 標定， l 為層數 ($l=0$ 為樹根， $l=N-1$ 為最底層；圖 3 的層數則自樹根第 1 層起算至最底層第 N 層，與本圖不同)， p 為該層中的序號。右側說明網路的索引關係：網路節點 (l, p) 所涵蓋的材料節點集合 K_p^l ，等於其兩個子節點集合 K_{2p}^{l+1} 與 K_{2p+1}^{l+1} 的聯集。晶體方位與交互作用方向分開訓練，正是 ODMN 能同時描述纖構與均質化的關鍵 (取自參考文獻⁽⁵⁾)。

這四個步驟在每個積分點、每個時間增量的每一次平衡疊代都要執行一次。由於切線模數是解析導出而非數值差分，巨觀平衡疊代得以維持隱式有限元素法應有的收斂速率；換句話說，ODMN 不是掛在有限元素軟體上的「AI 猜測器」，而是能像傳統材料模型一樣，透過商用有限元素軟體的正規組成律介面 (如 ABAQUS 的 UMAT) 直接接入既有分析流程的計算引擎。對於已經投資了 CAE (computer-aided engineering) 環境與工程師訓練的企業，這一點往往比任何準確度數字都重要。線上求解的數值穩定化細節，詳見本團隊投稿中的 GSH-ODMN 論文⁽¹⁸⁾。也正因為這個迴圈的呼叫次數極為龐大，代理模型每次呼叫的成本必須壓到極低，這正是第六節成本分析的主題。

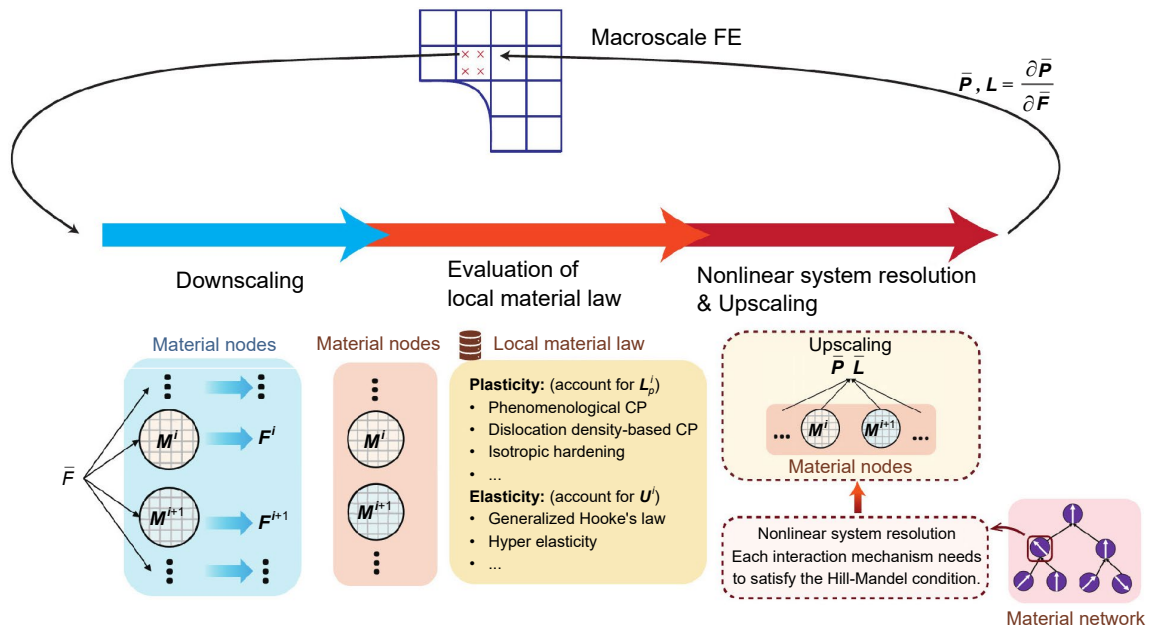


圖 5. 以深度材料網路為微觀代理之雙尺度模擬流程。巨觀有限元素模型 (Macroscale FE) 在每個積分點將變形梯度 $\bar{F}$ 下傳，網路把它分配為各材料節點的局部變形梯度 F^i ；每個材料節點 M^i 以自身的組成律更新應力，塑性部分透過塑性速度梯度 L_p^i 、彈性部分透過右伸長張量 U^i ；接著解非線性系統，調整節點間的交互作用量，使每個疊層單元都滿足 Hill-Mandel 條件；最後將各節點結果均質化上傳，回傳巨觀第一 Piola-Kirchhoff 應力 $\bar{P}$ 與一致性切線模數。圖中符號上加橫線者皆為巨觀量。此迴圈於每個積分點的每一次平衡疊代各執行一次 (取自參考文獻^(5, 14))。

五、TACS-GNN-ODMN：量完織構，模型就好了

ODMN 仍留下一個工業化的絆腳石：一個網路對應一種微觀組織。換一批料、換一種織構，就得重新訓練一次。對研究單位而言這只是多等幾個小時；對一年要驗上百批進料的鋼廠或線材廠而言，這是不可接受的。

本團隊於 2026 年再度在 CMAME 發表 TACS-GNN-ODMN 參數化代理框架⁽⁶⁾，把「換微結構組織就重新訓練」變成「量完織構直接推論」，分兩步完成 (圖 6)：

1. 織構自適應分群取樣 (texture-adaptive clustering and sampling, TACS)：EBSD 量到的可能是數萬顆晶粒的方位資料，直接建模並不經濟。TACS 先將任意的方位分布函數壓縮成一組統計等效的代表方位集，保留織構的統計特徵，但規模降到網路可處理的量級。
2. 圖神經網路推論：將代表方位集構成的晶粒交互圖輸入預先訓練好的圖神經網路 (graph neural network, GNN)⁽¹⁹⁾，直接推論出對應的 ODMN 力學平衡參數。整個過程是一次前向推論，沒有任何重新訓練。

成效如何？對四組未參與訓練的多晶織構 (材料採 AA6022-T4 鋁合金)，應力－應變曲線的平均相對誤差在循環載重下低於 2%、純剪下低於 1.5%，織構演化與局部應力統計皆與全域模擬吻合，線上計算加速 224－281 倍⁽⁶⁾。

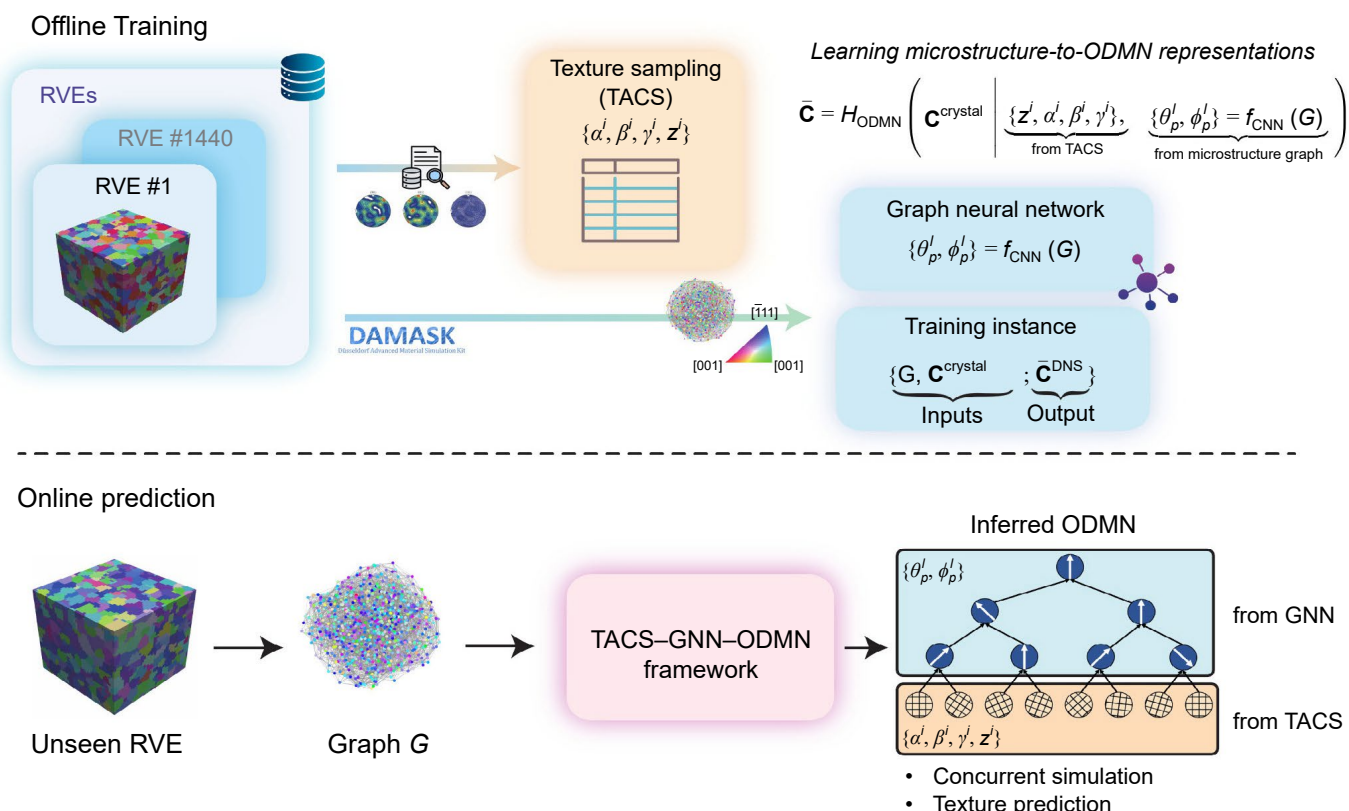


圖 6. TACS-GNN-ODMN 框架。上半部為離線訓練：由一批多晶 RVE 出發，一方面以纖維自適應分群取樣 (TACS) 把每組 RVE 的方位分布壓縮成 2^N 組代表方位與權重 α^i 、 β^i 、 γ^i 、 z^i ，其中 α 、 β 、 γ 為第 i 個材料節點的晶體方位角， z 為其權重參數；另一方面把同一個 RVE 化為晶粒交互圖 G ，輸入圖神經網路 (GNN) 推論出各網路節點的兩個方向角 θ_p^i 與 ϕ_p^i ，即圖中的 $f_{\text{GNN}}(G)$ 。兩者合起來即定義一個 ODMN：圖中的 H_{ODMN} 代表其均質化運算，把單晶剛度 $\mathbf{C}^{\text{crystal}}$ 與上述兩組參數代入網路逐層合併，算出整個 RVE 的均質化剛度 $\bar{\mathbf{C}}$ ；訓練的目標，是讓 $\bar{\mathbf{C}}$ 逼近 DAMASK 全域模擬算出的 $\bar{\mathbf{C}}^{\text{DNS}}$ 。下半部為線上預測：對一個從未見過的 RVE，只需建圖並做一次前向推論，即可得到該批材料專屬的 ODMN，直接用於併行模擬與織構預測，不需重新訓練 (取自參考文獻⁽⁶⁾)。

這一步讓量測儀器與模擬引擎第一次真正閉環。一批鋼捲或線材進廠，切樣、拋光、量 EBSD，資料送進 TACS-GNN-ODMN，產出的就是這一批料專屬的高擬真材料代理模型，可以視為一張「數位材料卡」。下游廠商要沖什麼零件、模擬要跑什麼路徑，直接呼叫這張卡即可。進料驗收也因此從「量硬度、拉幾根試片、確認規格沒有超出」，升級為「為這批料建立一個可計算的模型」。

這裡順帶回答兩個常見的疑問。其一，EBSD 是二維截面，晶粒卻是三維的：TACS 壓縮的對象是方位分布函數 (orientation distribution function, ODF)，也就是各方位所佔體積分率的統計，而非個別晶粒的三維幾何，在統計均勻的假設下，二維截面的面積分率即等於體積分率；晶粒的三維尺寸與形貌則另循一途，依照 EBSD 統計的晶粒尺寸與長寬比建立三維合成多晶 RVE，ODMN 的互動方向即由此 RVE 訓練而得，晶粒尺寸對強度的影響則反映在以拉伸試驗校正的滑移系臨界剪應力中。其二，同一零件不同位置的織構並不相同：雙

尺度架構的每個積分點都可指定各自的 ODMN，因此板厚方向有纖維梯度的板材可分層取樣、分層指派，鍛件與擠型材亦可分區處理。

六、規模化：MPI 平行雙尺度求解器與成形實績

有了快速且準確的微觀代理模型，還需要一套能把它掛上巨觀分析、並在數百個核心上穩定運行的求解器。本團隊開發的雙尺度求解器以 MPI (message passing interface) 平行化，可在數百個計算核心上有效擴展。

本團隊於 2026 年 7 月在德國慕尼黑舉行的第 17 屆世界計算力學大會 (WCCM-ECCOMAS 2026) 發表金屬成形的最新成果⁽²⁰⁾：深抽成形的全雙尺度模擬，巨觀模型的 27,676 個積分點，每一個都嵌入一個多晶 ODMN 代理模型，全程完成 $5 \times 10^7 - 10^8$ 次微觀求解⁴，成功重現由纖維主導的凸耳與回彈預測，以核心時間計較 FE^2 架構等效計算加速三個數量級 (估算基準見表 1)。值得注意的是「每個積分點一個多晶模型」這句話的含意：這個模型裡沒有 Hill48 或 Yld2000-2d 等異向性參數。凸耳的高度與方位，是從 27,676 個積分點各自的晶粒方位一路算出來的，沒有經過任何擬合。

表 1 是這個倍數的計量基準：所有倍數皆以「核心時間」(CPU 時間 $\times$ 使用核心數) 計，在同一材料點、同一組 11 條測試路徑 (七個方向的單軸拉伸與四種預應變的反向拉壓) 下，比較全域 RVE 求解器與 ODMN 的實測成本。

表 1. 材料點層級的核心時間比較 (同一材料點、同一組 11 條測試路徑)。

求解器與設定	設備	每條路徑平均核心時間	加速倍數
DAMASK-FFT 全域 RVE (64 ³ 體素、2,000 顆晶粒)	Intel Core i9-13900K，8 執行緒	1.67×10 核心秒 (34.7 分鐘 $\times$ 8 執行緒)	1 (基準)
ODMN，N = 4 (16 個材料節點)	同前工作站，單核心	2.8 核心秒	約 6,000 倍
ODMN，N = 6 (64 個材料節點，深抽案例所用)	同前工作站，單核心	4.5 核心秒	約 3,700 倍
ODMN，N = 8 (256 個材料節點)	同前工作站，單核心	16.9 核心秒	約 990 倍

深抽模擬全程在國家高速網路與計算中心的單一計算節點⁵ (112 核心) 耗時 59.1 小時，合計 6,619 核心小時；若把每個積分點的 ODMN 換成全域 RVE，依表 1 的單點成本推算需要約 7.4×10^5 核心小時⁶，約 ODMN 架構的 110 倍⁷。傳統 $FE^{2(10)}$ 以晶體塑性有限元素法求解微觀問題，在相同解析度下遠較 FFT 耗時⁽²¹⁾，故相對於傳統 FE^2 的倍數可再高一至二個數量級。

4 視接觸與摩擦設定而異。

5 測試於國網中心 Forerunner 1 的單一計算節點 (2 顆 Intel Xeon Platinum 8480+，共 112 核心)。

6 依單點量測的每增量成本 (183,264 核心秒 $\div$ 3,470 個增量，約 53 核心秒) 乘上實際發生的 5.05×10^7 次微觀求解，估計需約 7.4×10^5 核心小時。

7 以上估計皆以目前最快的全域求解器 (FFT) 為基準。整體倍數低於表一的單點倍數，是因為微觀成本降低之後，時間已由巨觀端的接觸與線性求解主導。

回到這個深抽案例本身。圖 7 是它的模型設定：胚料為半徑 85 mm、厚 1 mm 的 AA6022-T4 鋁板，沖頭半徑 50 mm、行程 55 mm，下模開口半徑 51.055 mm，胚料與沖頭的直徑比 (拉伸比) 為 1.7。巨觀模型取四分之一對稱，板厚方向分四層元素，前述的 27,676 個積分點即分布在這個網格上，每一個都掛著一個 $N = 6$ 、共 64 個材料節點的 ODMN (表 1 中深抽案例所用的設定)。分析分為下沖 55 mm、卸載與回彈三個步驟；沖頭－胚料、壓料板－胚料、胚料－下模三組接觸對與摩擦，仍由巨觀求解器以既有方式處理。

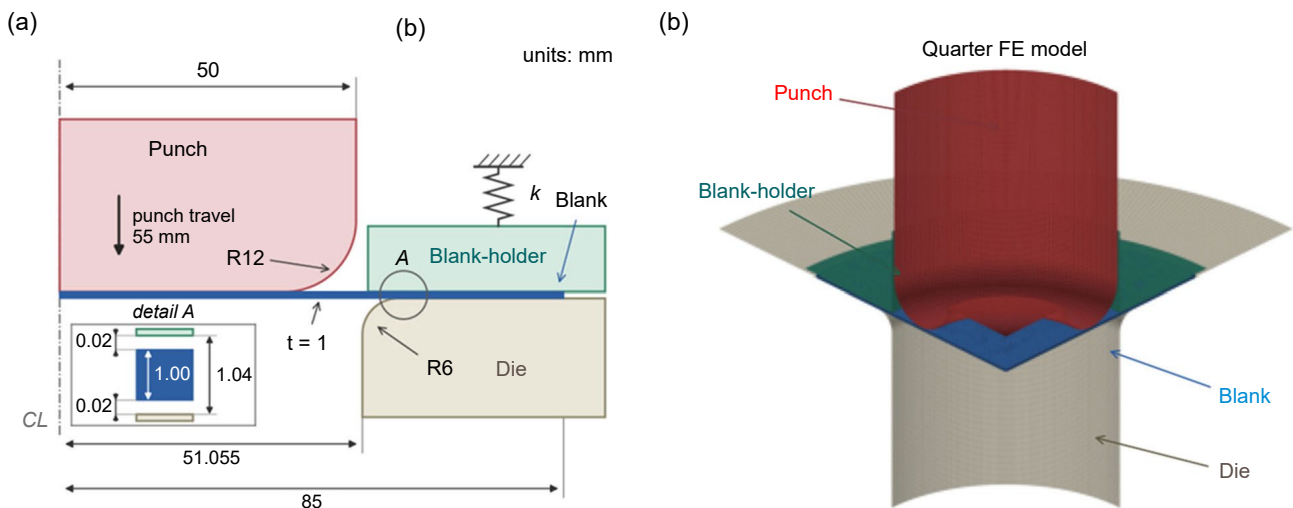


圖 7. 雙尺度深抽成形模擬的模型設定。(a) 通過對稱軸的剖面與主要尺寸 (單位: mm, CL 為對稱軸): 沖頭半徑 50 mm、鼻端圓角 R12, 下模開口半徑 51.055 mm、肩圓角 R6, 胚料半徑 85 mm、厚度 $t = 1$ mm, 沖頭行程 55 mm; 壓料板由勁度 k 的彈簧加壓, 細部 A 為壓料區的初始配置: 胚料厚 1.00 mm, 上下各留 0.02 mm 間隙, 即壓料板與下模之間 1.04 mm 的壓料間隙。(b) 四分之一對稱的三維有限元素模型, 圖中為沖頭 (紅)、壓料板 (綠)、胚料 (藍) 與下模 (灰); 胚料以 27,676 個減積分六面體元素離散 (每個元素一個積分點), 板厚方向分四層、每層 0.25 mm。

圖 8 是完整的成形歷程。沖頭下行時，法蘭區 (flange area) 的材料被逐步拉入模口，杯壁沿環向長出四處高應變區；到了最後一張，沖頭走完 55 mm 全行程、卸載回彈之後，杯緣已清楚呈現四個凸耳。四個凸耳出現的位置、長多高，完全由 27,676 個積分點各自的晶粒方位在成形過程中的轉動決定。

不過，雙尺度模擬真正獨有的產出不是杯子的形狀，而是圖 9 這一類的資訊：同一個杯件上八個位置的晶體方位分布。三種位置走上三條不同的路：杯緣的 (a)-(c) 轉動最劇烈，而且三個位置的方位各自走向不同；沖頭圓角上的 (d)-(f) 是整團方位一起轉，纖構的強弱幾乎沒變；杯底中心的 (g)、(h) 則連轉都幾乎沒轉，因為它從頭到尾貼在沖頭端面上，不再經歷什麼變形。(d)-(f) 同時給出板厚的上、下層，可以看出連同一個位置的內外表面都已經不同。這些極圖都是模擬直接輸出的結果，可以與 EBSD 的量測比對，也可以作為下一道製程分析的輸入。

同一框架已推進至鍛造製程 (見圖 10)。初步的全雙尺度鍛造模擬以 256 個 MPI 程序平行執行，單一負載歷程完成約 3.7×10^8 次微觀晶體塑性求解，其中首次嘗試即收斂的比例

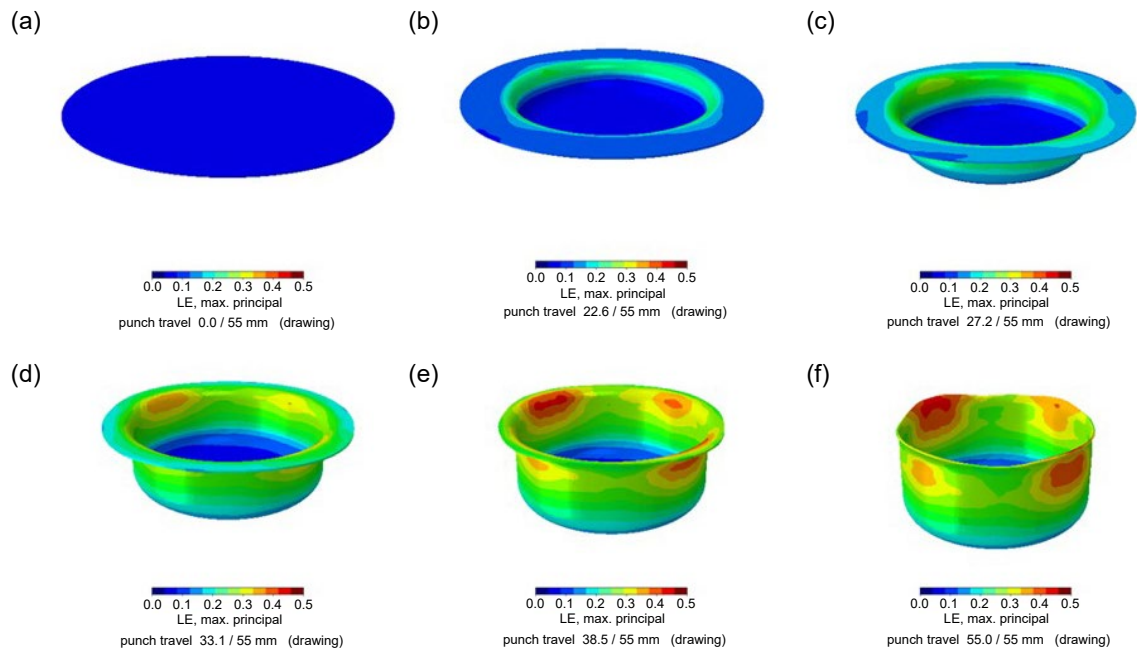


圖 8. 雙尺度深抽成形模擬的變形歷程⁸：(a) 初始胚料，沖頭行程 0 mm；(b) 22.6 mm；(c) 27.2 mm；(d) 33.1 mm；(e) 38.5 mm；(f) 沖頭走完 55 mm 全行程並卸載回彈後的最終杯件⁹。圖例為最大主對數應變 (LE, max. principal)，六張子圖共用 0 至 0.5 的同一色階。隨著行程增加，法蘭區的材料逐步被拉入模口，杯壁沿環向出現四處高應變區，杯緣則在行程後段發展出四個凸耳。

達 99.999% 以上。未於首次收斂者，程式會在該積分點內自動細化測試路徑重新求解，因此條件更嚴苛的深抽案例 (三組接觸對、法蘭起皺與回彈) 雖然首次收斂率為 99.51%，最終收斂率仍是 100%。對工業規模的非線性問題而言，這個收斂率比速度更能說明技術的成熟度。它代表求解器不會在數億次微觀計算中的某一次失敗，進而拖垮整個巨觀分析。

至於商用軟體的介接，ODMN 在巨觀求解器眼中只是一個逐點評估的材料模型：接收變形梯度與時間增量，回傳應力與一致性切線模數，介面規格與內建材料模型完全相同；幾何複雜度、接觸與摩擦仍由巨觀求解器以既有方式處理，不會因材料模型換成 ODMN 而多出新的收斂困難，前述的深抽案例本身就是這類工業級接觸問題。

鍛造件上的纖構差異更為劇烈。圖 11 展示的是鍛造件內五個代表位置的 (011) 極圖，隨壓縮量從 0.1% 到 22.1% 的演化。模具邊緣、剪切帶與死區的纖構發展路徑截然不同。同一個零件，不同位置的材料在製程結束時，實質上已經是「不同的材料」。這正是成品異向性、後續加工性與疲勞性能落差的來源，而傳統巨觀模擬完全無法提供這類資訊。

歸納而言，「ODMN 為核、GNN 泛化、MPI 擴展」的組合，已跨過從論文到應用的門檻：訓練只需線彈性資料、線上求解具二次收斂的數值品質、可接入商用求解器介面、對新纖構免重訓練。這套技術已經是「應用就緒」(application-ready) 的狀態。

8 影片連結：<https://youtu.be/kimHFQ8WMcs>

9 影片連結：<https://youtu.be/5nDLQbbIMh4>

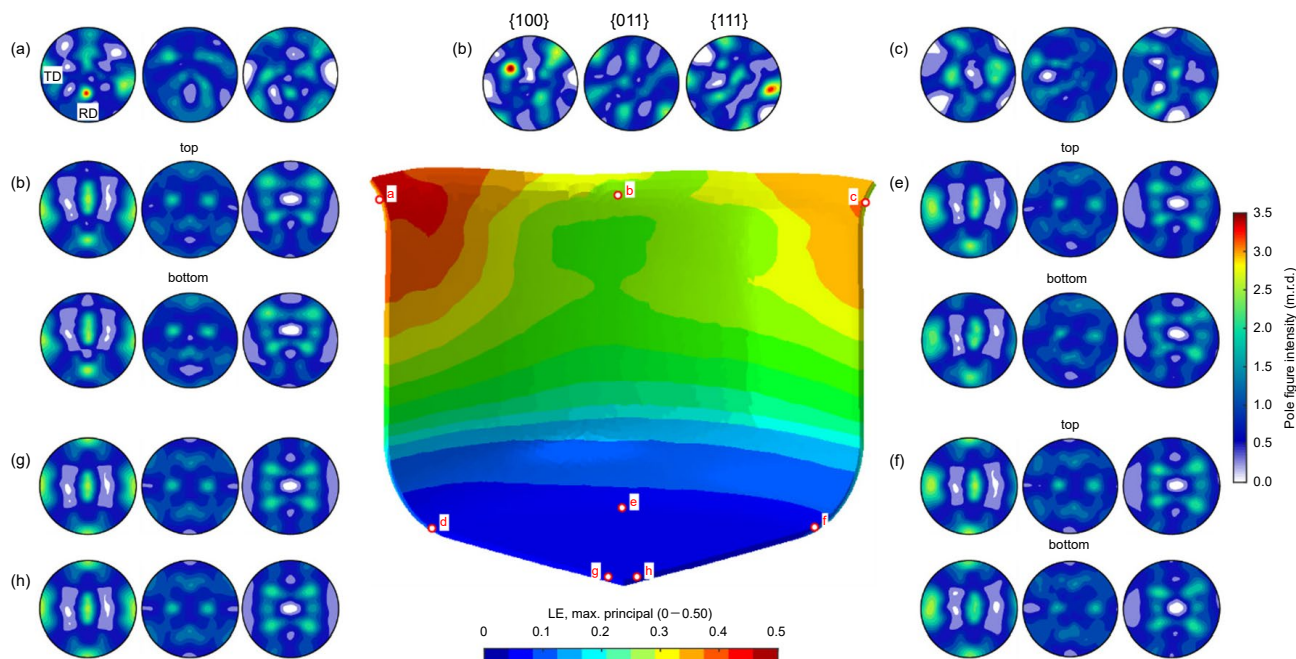


圖 9. 深抽杯件內不同位置的織構預測¹⁰ (沖頭行程 55 mm、卸載回彈後)。中央為杯件的最大主對數應變分布 (LE, max. principal，色階 0 至 0.5)，並以 a-h 標出八個取樣位置：(a)-(c) 在杯緣，(d)-(f) 在沖頭圓角 (杯底轉角) 處；(g)、(h) 則在杯底中心附近。周圍每一列是該位置 ODMN 所繪製的 $\{100\}$ 、 $\{011\}$ 、 $\{111\}$ 極圖；其中 (d)、(e)、(f) 分別給出板厚最上層 (top，沖頭側) 與最下層 (bottom，下模側) 兩組，以顯示厚度方向的差異，其餘位置各取一層。所有極圖共用右側同一色階，單位為 m.r.d. (multiples of a random distribution，數值愈高代表該方位愈集中)；(a) 的第一張極圖標示了 RD (縱軸) 與 TD (橫軸)，其餘各圖方位相同。

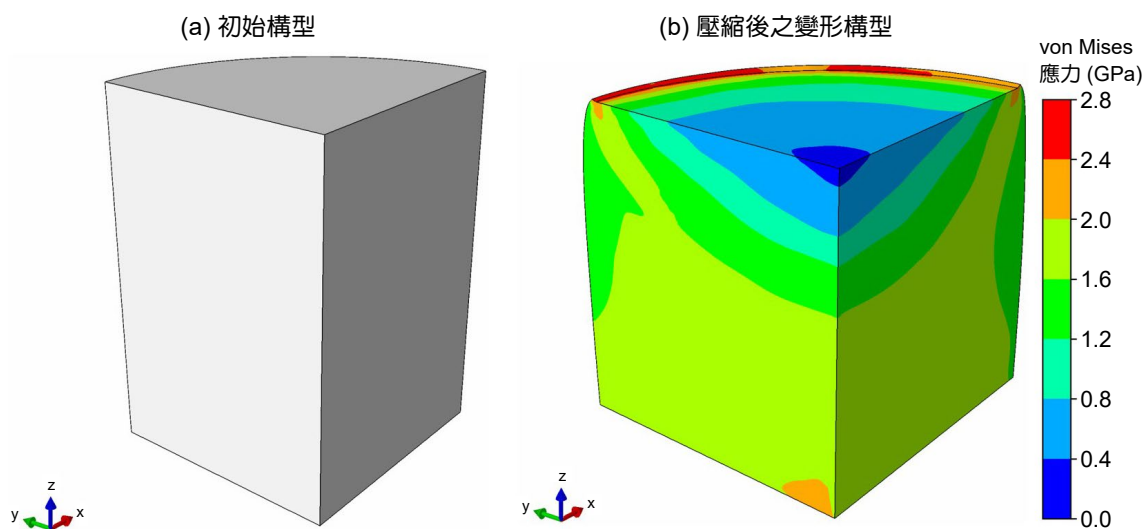


圖 10. 全雙尺度鍛造模擬初步結果 (1/4 對稱模型)：(a) 初始構型；(b) 壓縮後之變形構型與內部 von Mises 應力分布。模擬以 256 個 MPI 程序平行執行，共完成約 3.7×10^8 次微觀晶體塑性求解。

¹⁰ 影片連結：<https://youtu.be/tlmsYDwFILw>

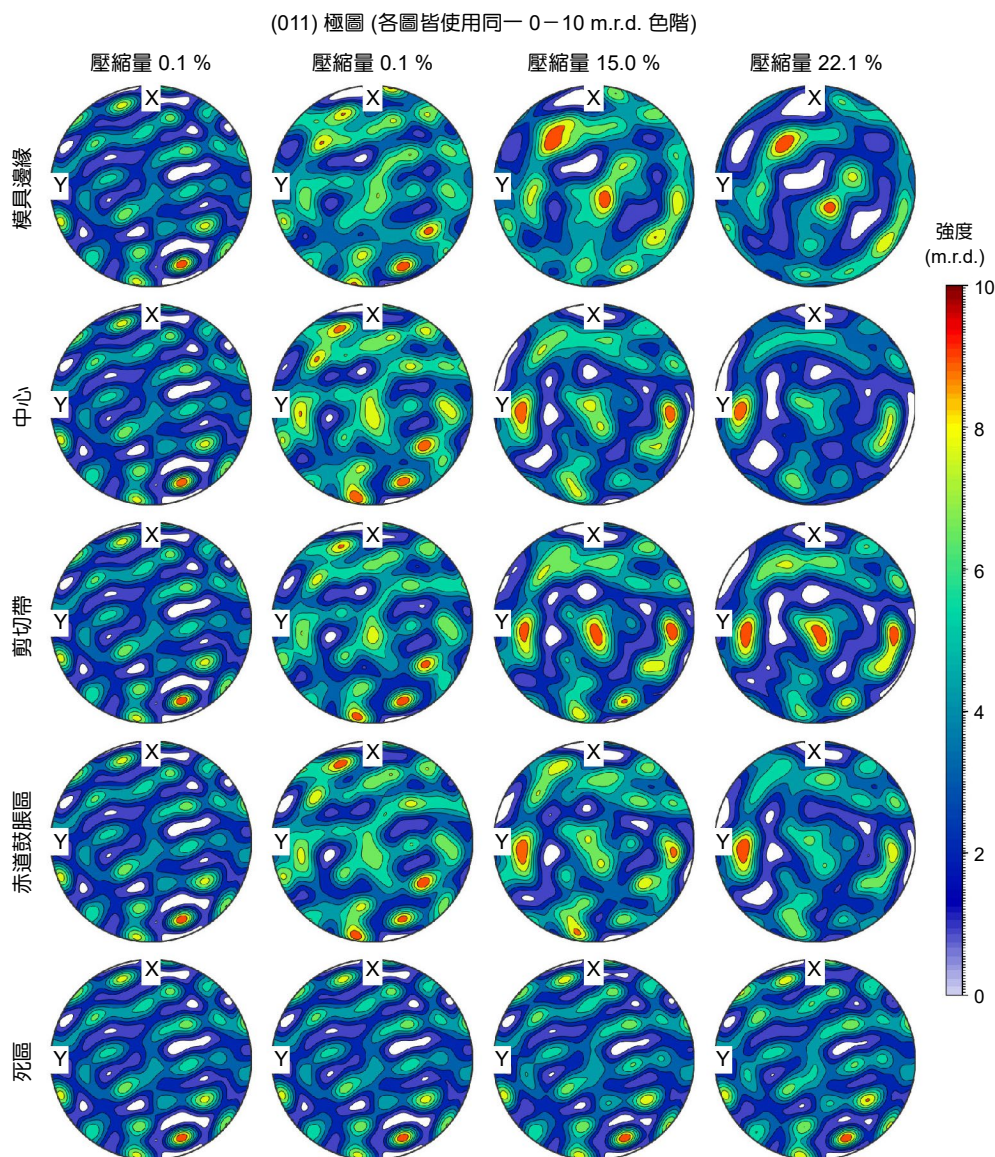


圖 11. 鍛造件內五個代表位置 (模具邊緣、中心、剪切帶、赤道鼓脹區、死區) 之 (011) 極圖隨壓縮量 (0.1 % — 22.1 %) 之演化。所有極圖共用右側同一色階，單位為 m.r.d. (multiples of a random distribution，數值愈高代表該方位愈集中)。圖中 X、Y 為試件座標軸，X 朝上、Y 朝左。各位置組織發展路徑迥異，此類資訊唯有雙尺度模擬能夠提供。

七、導入需要什麼：資料與驗證

企業評估一項新技術時，最實際的兩個問題是：企業要提供什麼資料？憑什麼相信結果？

第一個問題的答案，是這套技術與現行做法最大的差別所在：它的輸入是組織量測，不是曲線擬合。企業提供的是「這批料的晶粒長什麼樣、方位怎麼分布」，模型自己算出降伏面該長什麼樣，而且是隨變形一路改變的降伏面。多數企業手上原本就有的品保資料，如：拉伸試驗、硬度、金相等，都能直接派上用場。

第二個問題的答案，在於把「校正」與「驗證」分清楚。校正用實驗資料決定模型參數，驗證則用模型去預測沒有參與校正的實驗，再與實際結果比對。兩者若混在一起，就會得到看起來很準、實際上什麼都預測不了的模型。本團隊的作法是：滑移系的臨界剪應力與硬化參數，只用最單純、最便宜的單軸拉伸試驗校正（因為這些是材料的本質性質，與試件形狀無關）；校正完成後即凍結參數，直接拿去預測深抽的凸耳高度、鍛造件的鼓脹形狀與各處組織，這些預測沒有任何一個參數是為它們調整過的。表 2 整理了各項資料在框架中的角色。

表 2. 導入所需資料與驗證項目。

資料／量測項目	角色	在框架中的用途
EBSD 方位圖、XRD 宏觀組織 (極圖/ODF)	建模輸入	建立 RVE 方位統計；TACS 壓縮為代表方位集
金相、晶粒尺寸與形貌	建模輸入	建立三維合成 RVE 的晶粒尺寸與形貌統計；RVE 的線彈性均質化資料決定模型的拓撲參數
材料成分與製程履歷 (軋延／退火／抽線條件)	建模輸入	判定組織來源與適用範圍
單軸拉伸曲線 (含不同方向、 r 值)	參數校正	校正滑移系臨界剪應力與硬化參數
反向拉壓、循環載荷試驗	驗證	包辛格效應與背應力，與回彈預測直接相關
液壓鼓脹、成形極限圖 (FLD)	驗證	雙軸與各種應變路徑下的成形極限
成形後各位置的 EBSD	驗證 (關鍵)	組織演化預測，唯有雙尺度模擬能比對
殘留應力量測 (XRD)	驗證	殘留應力場與回彈
成品幾何量測 (3D 掃描、凸耳高度、回彈角)	驗證	巨觀成形結果
既有試模與量產紀錄 (含不良品)	驗證	模型適用範圍與誤差界定

值得一提的是最後兩類資料的價值。企業累積多年的試模紀錄與不良品資料，過去只能作為經驗傳承；在這套框架中，它們是驗證模型最有力的素材，尤其不良品，往往比良品更有資訊量。而模擬的回饋也是雙向的：一個沖壓件切幾個位置做 EBSD 是可行的，切一百個位置不可行；模擬提供的是全場的組織與應力演化，量測提供的是幾個位置的錨點。用少數幾個位置的量測驗證模型，再用模型去看整個零件，這才是「製程虛擬學生」真正的意義。

八、可切入的製程場景

表 3 整理了本技術可切入的製程、對應的微觀組織課題，以及虛擬學生可以回答、而傳統巨觀模擬回答不了的問題。

表 3. 雙尺度虛擬孿生於各金屬製程的應用場景。

製程	現場常見課題	背後的微觀組織機制	虛擬孿生可回答的問題
深抽／沖壓	凸耳、回彈、局部頸縮、批次差異	軋延織構造成的塑性異向性與其演化	凸耳高度與方位、回彈補償量、成形極限、胚料形狀最佳化；換一批織構不同的料，成型窗口要如何調整
熱軋／冷軋 (板材、箔材)	道次規劃、下游成形性不穩定	織構隨道次與退火演化	織構控制策略、道次分配對下游成形性的影響、異向性指標預測
滾軋成形／ 螺紋滾造	牙底填充不足、疲勞強度分散	表層劇烈剪切造成的織構梯度與加工硬化	預成形 (胚料尺寸) 設計、表層織構與殘留應力分布、疲勞性能的組織依據
抽線／盤元 加工	扭轉試驗開裂、中心破裂、後續冷鍛開裂	抽線纖維織構與中心區三軸拉應力	模具半角與減面率的組合、中間退火時機、線材異向性對後續冷鍛成形性的影響
冷鍛／熱鍛	充填不良、模具負載、成品異向性	鍛流線與晶粒方位演化	預成形設計、模具負載預測、成品各部位的異向性與後續加工性
熱處理／退火	再結晶織構不易掌握	變形儲存能分布與再結晶織構	變形織構與儲存能的空間分布，作為再結晶模擬的輸入
切削加工	表面完整性、疲勞壽命分散	表層晶粒細化與殘留應力	切削參數對表層組織與殘留應力的影響
積層製造	成品異向性、後處理規劃	凝固織構、柱狀晶成長	異向性評估、後處理與熱處理製程設計

三個具體情境，或許更能說明它的價值。

情境一：讓進料差異說得清楚

一家沖壓廠長期受困於「A 廠的料好沖、B 廠的料不好沖，但兩家的成分與拉伸規格都落在同一個範圍」。用傳統試驗說不清楚，因為差別在織構，而織構不在規格書上。透過 TACS-GNN-ODMN，兩批料各量一次織構、各建一張數位材料卡、各跑一次成形模擬，差異即可量化呈現，也能據此與供應商討論具體的織構指標，而不是含糊的「品質不穩」。

情境二：把試模次數換成模擬次數

一個新的深抽件或鍛造件從首次試模到量產，反覆修模是常態。若能在開模前先用雙尺度模擬掃過胚料形狀、壓邊力與潤滑條件的組合，把凸耳與回彈的趨勢先算出來，省下的不只是模具費，更是交期。以 ICME 的國際經驗換算 (開發時程縮短 15—25%⁽⁴⁾)，效益可直接反映在成本與上市時程上。

情境三：從「控成分」到「控織構」

對上游鋼廠與線材業者而言，這套技術最長遠的意義，是讓織構從一個學術名詞變成可設計、可承諾的產品規格。當您能算出「這樣的織構配上客戶的製程，成型窗口會有多寬」，材料就從商品變成解決方案，這是高值化最實在的一條路徑。

九、未來展望

在研究層面，這套框架仍有幾個正在推進的方向。其一是網路深度與成本的取舍：以廣義球諧函數 (generalized spherical harmonics, GSH) 將量測織構直接壓縮成模型材料節點的初始方位，使較淺的模型深度即可精確表述複雜織構，並同步處理熱—力耦合問題⁽¹⁸⁾。其二是再結晶與晶粒成長：這類機制不只是讓既有晶粒轉動，還會產生原本不存在的新方位、並重新分配各方位的體積分率，模型的材料節點因此必須能夠增減與改變權重。其三是更嚴苛的製程條件，例如：冷軋的大應變與板厚方向織構梯度、切削的劇烈剪切與熱軟化，以及顯式動力求解器的介接。其四是以自監督預訓練建立多晶材料的基礎模型，使新織構的推論更為泛化。

在應用層面，本團隊誠摯邀請國內金屬產業的先進共同合作，把這套技術帶進產線。為了讓合作從一開始就務實可行，以下說明典型的推進方式：

1. 界定場景：由業者提出一個具體、有痛感、且已累積歷史資料的製程課題 (例如某深抽件的凸耳與回彈、某鍛件的晶粒流向、某批線材的抽線異常)。我們通常建議第一個題目選「老問題」而非「新問題」。因為老問題已有大量試模與量產紀錄，正好用來驗證模型。
2. 建立材料數位分身：以既有的材料試驗與織構量測資料，或由本團隊協助規劃量測，建立該批材料專屬的 ODMN 代理模型。
3. 建置雙尺度虛擬孿生：完成該製程的全雙尺度模擬，與既有的試模／量產結果交叉驗證，並明確界定模型的適用範圍與誤差。
4. 製程優化與技術移轉：以虛擬孿生進行參數掃描與最佳化，並將模型、工作流程與操作方式移轉至業者端，讓貴公司的工程師能自行運用。

業者提供的資料與衍生模型均以保密協定規範，智慧財產歸屬於合作契約中議定。舉凡深抽／沖壓、軋延、滾軋成形與螺紋滾造、抽線、鍛造、熱處理、切削加工、積層製造。只要產品性能與晶粒組織、織構息息相關，都非常歡迎與我們聯繫 (聯絡人：陳俊杉特聘教授，dchen@ntu.edu.tw)。

十、結論

本文的結論可歸納為四點。第一，在方法上，深度材料網路把「快」與「準」的矛盾解開了：模型學的是 RVE 的幾何拓撲而非材料反應，因此只需數百組線彈性資料即可完成離線訓練，換上晶體塑性組成律後即可直接外插；ODMN 再以方位感知機制讓網路讀懂織構與其演化，TACS-GNN-ODMN 則讓量測到的織構經一次前向推論即產出材料模型，對四組未參與訓練的多晶織構，應力預測的平均相對誤差低於 2%，線上計算加速 224—281 倍。第二，在規模上，這套代理模型已通過工業級尺寸的驗證：深抽成形的全雙尺度模擬在 27,676 個積分點各嵌入一個多晶 ODMN，全程完成 $5 \times 10^7 - 10^8$ 次微觀求解，以核心時間計較 FE² 架構等效計算加速三個數量級；整個模型裡沒有任何異向性擬合參數，四個凸耳的方位與高度都是從各積分點的晶粒方位所算出來的；鍛造案例則以 256 個 MPI 程序完成約 3.7×10^8 次微觀晶體塑性求解。第三，在產出上，雙尺度模擬獨有的價值不只是杯子的外形與凸耳：在同一個深抽杯件上取八個位置，極圖顯示杯緣的晶粒方位轉動最劇烈；沖頭圓角處是整個方位一起轉動；杯底中心則幾乎沒有變化，連同一位置的板厚上、下層都已經不同。鍛造件五個代表位置的 (011) 極圖，演化路徑更是截然不同。這些織構都是模擬的直接

輸出，可與 EBSD 量測比對，也可作為下一道製程與性能評估的輸入，而傳統巨觀模擬完全無法提供這類資訊。第四，在數值品質上，ODMN 解析導出一致性切線模數，可經由商用軟體的標準組成律介面 (如 ABAQUS 的 UMAT) 直接接入既有分析流程；鍛造案例首次嘗試即收斂的比例達 99.999% 以上，條件更嚴苛的深抽案例為 99.51%，未收斂者全數由局部子步驟回復，最終收斂率為 100%。

從 2019 年 DMN 問世，到 ODMN 讓網路讀懂纖構、TACS-GNN-ODMN 讓量測直接產出模型，再到嵌入數萬個多晶代理模型的全雙尺度成形模擬，「以晶粒組織為本的製程虛擬孿生」已從願景走到應用門前。對金屬產業而言，這代表老師傅口中的「手感」，第一次有機會被寫成算得動的物理；也代表纖構這個過去只存在於實驗室報告中的名詞，可以成為產品規格與製程設計的一部分。臺灣擁有完整的金屬加工聚落與深厚的現場經驗，正是把這項技術轉化為產業競爭力最合適的土壤。我們期待與產業夥伴攜手，讓下一個世代的金屬製程，在電腦模擬中先成形一次。

誌謝

本研究承國家科學及技術委員會 (計畫編號 111-2221-E-002-054-MY3、112-2221-E-007-028、113-2221-E-007-005、114-2221-E-002-010-MY3) 經費支持，並感謝國家高速網路與計算中心 (NCHC) 及國震中心-台大土木人工智慧研究中心提供計算資源。

參考文獻

1. Rodney Hill, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, **193** (1033), 281 (1948).
2. Frederic Barlat et al., *International Journal of Plasticity*, **19** (9), 1297 (2003).
3. National Research, C., *Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security*. 2008, Washington, DC: The National Academies Press.
4. John Allison, Mei Li, C. Wolverton, XuMing Su, *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, **58** (11), 28 (2006).
5. Ting-Ju Wei, Tung-Huan Su, Chuin-Shan Chen, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **441**, 117977 (2025).
6. Ting-Ju Wei, Tung-Huan Su, Chuin-Shan Chen, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **461**, 119250 (2026).
7. 李士勛,《更上一層樓篇》手工工具產業的「攻」與「守」：工業級工具,臺灣手工工具敲開國際市場,中華民國對外貿易發展協會, (2025). Please refer to the website: <https://www.taitra.org.tw/cp.aspx?n=37>
8. 廖鴻瑞, 金屬製品產業年鑑—扣件篇, 財團法人金屬工業研究發展中心 (2025).
9. Franz Roters et al., *Computational Materials Science*, **158**, 420 (2019).
10. Frederic Feyel, Jean-Louis Chaboche, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **183** (3-4), 309 (2000).
11. Zeliang Liu, C.T. Wu, M. Koishi, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **345**, 1138 (2019).
12. Zeliang Liu, C.T. Wu, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **127**, (2019).
13. Ting-Ju Wei, Wen-Ning Wan & Chuin-Shan Chen, *Multiscale Science and Engineering*, **8**, 1 (2026).
14. 魏廷儒, 深度材料網路於微結構學習與多尺度建模之研究, 國立臺灣大學土木工程學系, 國立臺灣大學: 臺北市 (2026).
15. Gajek, S., M. Schneider, and T. Bohlke, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **384**, 113952 (2021).
16. Haoyan Wei et al., *Journal of Engineering Mechanics*, **149** (3), 04023003 (2023).
17. Van Dung Nguyen and Ludovic Noels, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **389**, 114300 (2022).
18. Ting-Ju Wei and Chuin-Shan Chen, *From Compact Orientation Distributions to Texture Evolution: GSH-Initialized Orientation-Aware Deep Material Networks*. (2026).

19. Jimmy Gaspard Jean *et al.*, *Computational Mechanics*, **75**,113 (2025).
20. Chuin-Shan Chen and Ting-Ju Wei, “Two-Scale Modeling of Polycrystalline Metals with Orientation-Aware Deep Material Networks”, *17th World Congress on Computational Mechanics & 10th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (WCCM-ECCOMAS 2026)*, July 19-24 (2026).
21. Arun Prakash and Ricardo Lebensohn, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **17** (6), 064010 (2009).

作者簡介

李國頌先生現為國立臺灣大學土木工程學系博士生。

Guo-Chi Li is currently a Ph.D. student in the Department of Civil Engineering at National Taiwan University.

魏廷儒先生為國立臺灣大學土木工程學系博士，現為國立臺灣大學土木工程學系博士後研究員。

Ting-Ju Wei received his Ph.D. in Civil Engineering from National Taiwan University and is currently a Postdoctoral Researcher in the Department of Civil Engineering at National Taiwan University.

陳俊杉先生為美國康乃爾大學土木與環境工程博士，現為國立臺灣大學土木工程學系特聘教授暨材料科學與工程學系特聘教授。

Chuin-Shan Chen received his Ph.D. in Civil and Environmental Engineering from Cornell University, USA. He is currently a Distinguished Professor in the Department of Civil Engineering and the Department of Materials Science and Engineering at National Taiwan University.