采用先进蒙特卡洛方法进行多保真微结构诱导不确定性量化

Anh Tran[a], *, Pieterjan Robbe[b], Hojun Lim[c]

[a]Scientific Machine Learning Department Sandia National Laboratories Albuquerque NM 87123 ,,
[b]Plasma and Reacting Flow Science Department Sandia National Laboratories Livermore CA 94550
,,,[c]Computational Materials and Data Science, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM 87123

arXiv:2302.04221v2 [cond-mat.mtrl-sci] 9 Feb 2023

摘要

量化材料微结构变化所带来的不确定性可能是一项计算上极具挑战的任务，尤其是在晶体塑性有限元法（CPFEM）中使用先进本构模型和精细网格分辨率时。已有大量研究考察材料性能和表现对网格分辨率及本构模型选择的敏感性。然而，目前尚缺乏一种统一方法，能够同时考虑网格分辨率、积分时间步和本构模型等多种保真度参数。本文提出一种新颖的不确定性量化（UQ）方法，利用不同保真度层级构成的近似层级，通过 CPFEM 计算均质化材料的性质和性能。具体而言，我们展示了如何应用多层抽样方法，例如多层蒙特卡洛（MLMC）和多指标蒙特卡洛（MIMC），评估多晶材料微观结构变化对均质化材料性质预测结果的影响。我们表明，通过自适应地利用保真度层级，可以显著减少达到指定精度所需的微观结构数量。最后，我们展示了如何将该方法扩展至多保真度框架，在此框架中，底层本构模型可以选用唯象塑性模型或基于位错密度的模型。

关键词：晶体塑性有限元、不确定性量化、多层蒙特卡洛、多指标蒙特卡洛、多保真度蒙特卡洛

*通讯作者：anhtran@sandia.gov。A.T. 和 P.R. 对本文贡献相同。

目录

1 引言 **3**

2 蒙特卡罗抽样方法 **5**

2.1 符号说明.52.2 蒙特卡罗方法.62.3 多层蒙特卡洛（MLMC）方法.72.4 多指标蒙特卡罗（MIMC）方法.92.5 维度自适应多指标蒙特卡洛.112.6 算法.14

3 CPFEM 中的本构模型 **17**

3.1 唯象晶体塑性本构模型.183.2 基于位错密度的本构模型.18

4 方法论 **20**

5 案例研究 1：用于 α-钛的多层蒙特卡洛 **21**

5.1 α-钛的晶体塑性有限元模型.215.2 多层蒙特卡洛在 α-钛中的应用.21

6 案例研究2：铝的多指标蒙特卡洛 **25**

6.1 铝的晶体塑性有限元模型.256.2 自适应多指标蒙特卡罗在铝中的应用.27

7 讨论 **29**

8 结论 **31**

1. 引言

不确定性量化（UQ）在验证和确认许多集成计算材料工程（ICME）模型方面发挥着重要作用。在工艺-结构-性能-表现桥梁已得到充分确立的材料科学领域，量化微观结构相关的不确定性，是预测材料属性和材料表现变异性的一项重要任务。结构-性能关系中的均质化材料属性和表现可通过晶体塑性有限元法（CPFEM）计算。CPFEM 通过显式模拟离散晶粒及其基于位错滑移的滑移系，考虑晶粒尺度微观结构。在 CPFEM 中，材料的微观结构以代表性体积单元（RVE）定义，可将其视为整个多晶微观结构的一个随机样本。CPFEM 研究通常需要对这类 RVE 进行多次实现模拟。本文提出了一个适用于 CPFEM 的统一框架，该框架基于多层蒙特卡洛（MLMC）和多指标蒙特卡洛（MIMC）方法，利用具有不同保真度的模型层级。因此，运行 CPFEM 所需的 RVE 数量大幅减少，从而有效降低了确定材料属性和表现所需的计算成本。

众所周知，微观结构在空间和取向上都具有固有的随机性，通常需要以像素（二维图像中）以及体素（三维体积中）的形式进行高维表示。微观结构的变异性主要导致预测中的偶然不确定性，而集成计算材料工程模型中用于建立结构-性能关系的数值近似则主要导致认知不确定性。本文主要致力于严谨地处理从微观结构角度引起的偶然不确定性，同时也承认其他研究也对认知不确定性进行了探讨 [1]。

在工艺—结构—性能—表现的关联中，人们往往将集成计算材料工程模型视为正向模型或函数，用于将一个空间映射到另一个空间，例如从工艺映射到结构、从结构映射到性能，或从工艺映射到性能。大多数计算模型（包括集成计算材料工程模型）通常具有多保真层级，该层级依据计算精度与成本之间的权衡来定义。最显而易见的例子之一，是用于表示微结构代表性体积单元几何形状的网格尺寸。粗网格晶体塑性有限元法计算成本较低，可视为低保真度近似；而细网格晶体塑性有限元法计算成本较高，可视为高保真度近似。晶体塑性有限元法中的本构模型是多保真层级的另一个例子：唯象本构模型可视为低保真度近似，而基于位错密度的模型等物理基础更充分的模型则可视为高保真度近似。文献中已有大量网格敏感性分析研究，但尚无研究构建出能够同时统一网格尺寸和本构模型细化过程的方法。此外，这些研究的结果往往取决于材料体系以及所采用的数值求解器。我们的工作首次采用严格方法，利用本构模型的多保真度方法和代表性体积单元的多分辨率方法，同时研究晶体塑性有限元法对结构均质化材料属性的计算。我们的方法基于对多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡罗采样方法的自适应扩展 [2, 3, 4]。在单保真度设置下，我们的方法可简化为经典蒙特卡罗（MC）方法，在晶体塑性有限元法领域也称为“微结构代表性体积单元集合”方法。因此，这项工作可视为采用先进多保真度采样方法，对多保真度晶体塑性有限元法的推广。例如，这种多保真度晶体塑性有限元法可利用本构模型的保真度、积分时间步长、数值积分器的阶数、网格尺寸（h细化）以及单元的多项式阶数（p细化）。

鉴于不确定性量化对于材料科学中各类问题都至关重要，研究人员已开发出多种框架，以便在不确定性条件下提供稳健预测，参见例如 [5, 6, 7]。Honarmandi 和 Arr´oyave [8], Gabriel 等人 [9], 以及 Acar [10]对集成计算材料工程模拟中不确定性量化的应用进行了全面综述。例如，Zhao 等人 [11] 结合测量不确定性和参数不确定性，量化了通过纳米压痕测得的六方密堆积（HCP）钛合金临界分解剪切应力的不确定性。Lim 等人 [12] 研究了网格敏感性和多晶代表性体积单元，其中初始织构、硬化模型和边界条件均存在不确定性。Park 等人 [13]研究了各向异性、不同硬化模型及晶粒形貌对7079铝合金的影响。Tran 和 Wildey [14] 应用数据一致性反演方法，根据屈服应力分布推断微观组织特征的分布；通过异方差高斯过程近似得到的推前密度映射与所施加的屈服应力密度一致。Kotha 等人 [15, 16, 17, 18] 开发了不确定性量化的参数化均质化本构模型，用以捕捉微观组织相关应力-应变曲线以及随机屈服面的不确定性。这类模型已广泛应用于钛合金的多尺度疲劳裂纹萌生建模 [19, 20] ，以及采用支持向量回归作为底层机器学习模型的单晶镍基高温合金建模 [21]。Sedighiani 等人 [22, 23]将遗传算法和多项式近似应用于各种本构模型，包括唯象模型和基于位错密度的模型。Tran 等人 [24]将随机配置（SC）方法应用于相场模型，以量化枝晶形貌及其生长的不确定性。Acar 等人 [25]提出了一种线性规划方法，在假定输入和输出均服从高斯分布的条件下，使材料性能的均值最大化。Fernadez 等人 [26]利用贝叶斯推断量化应力-应变曲线的不确定性，并将模型参数视为随机变量。Tallman 等人 [27, 28] 结合高斯过程回归和材料知识系统框架，根据晶体学取向和织构的分布函数，预测一组具有不确定性的均质化材料性质。归纳式设计探索方法（IDEM） [29, 30, 31] 已作为一种材料设计方法提出，用于确定微观组织特征的可行且稳健的设计，并已广泛应用于许多实际问题。Zhang [32] 对先进蒙特卡罗方法进行了全面的数学综述。Chatterjee 等人 [33] 采用经典蒙特卡罗估计量，对 Ti-6Al-4V 的拉伸刚度与强度进行了统计研究。Acar 和 Sundararaghavan [34, 35] 分别量化了材料性能相对于实测极图和实验变异的不确定性。

在文献中，研究微观结构诱导的材料性质最常用的方法是考虑一组来自微观结构空间 Ω 的微观结构实现 $\{\omega^{(n)}\}_{n=1}^{N}$。如果两个微观结构 $\omega^{(1)}$和 $\omega^{(2)}$通过相同的概率律从同一空间 Ω 中独立同分布地抽样得到，则称它们在统计上等价。因此，微结构代表性体积单元集合方法在数学上等价于经典蒙特卡罗估计量：结构-性能映射记为 $Q(\omega)$ ，通常通过运行晶体塑性有限元法进行评估；与微观结构变化相关的偶然不确定性则可由从 Ω 中抽取的样本表示。蒙特卡洛方法广受欢迎，因为就所需的代表性体积单元组成数量而言，其效率不依赖于输入的维数（即输入参数的数量）。然而，这种与维数无关的特性是有代价的，因为通常需要进行大量代表性体积单元评估，才能达到规定的精度。经典蒙特卡罗估计量在理论上是 Q 的无偏估计量，但若考虑到数值评估结构-性能映射时必然涉及的近似值，情况便不再如此。利用这些数值近似值 $\{Q_\ell\}_{\ell=0}^{L}$ 至 Q 构成的多保真层级，可以显著降低蒙特卡洛方法的计算成本。具体而言，利用期望算子的线性性质，可以用不同保真度层级 Q_ℓ 和 $Q_{\ell-1}$之间相继的抵消差分所构成的伸缩和，替代针对 Q 的高保真度近似 Q_L 。将单个昂贵的

针对高保真度近似的蒙特卡罗估计量，替换为多个针对这些差分的低成本蒙特卡罗估计量，即可降低总体计算成本。这正是多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡洛抽样方法的核心思想。利用 [4], 中的结果，我们将说明如何在晶体塑性有限元法的背景下自适应地构建此类多保真层级。

本文其余部分安排如下。第2节回顾经典蒙特卡罗、多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡洛方法，并概述本研究采用的自适应多指标蒙特卡洛方法。第3 节介绍晶体塑性有限元法中本构模型的基础知识。第 4 节描述将 DREAM.3D [36] 与DAMASK [37]耦合的集成工作流程。第 5 节介绍采用多层蒙特卡洛方法研究 α-钛的第一个案例研究，其中考虑了多种网格分辨率。第 6 节介绍采用多指标蒙特卡洛方法研究铝的第二个案例研究，其中同时考虑了多个本构模型（唯象模型和基于位错密度的模型）以及多种网格分辨率。第 7 节进行讨论，第 8 节总结全文。

2. 蒙特卡罗抽样方法

多层和多指标抽样方法利用给定模型层级中多个模型输出之间的相关性，以降低对统计量（如模型输出的均值或方差）进行预测时的随机误差。误差的降低通常还能显著减少计算成本，因为达到相近误差所需的模型评估次数可减少数个数量级。本节回顾多层和多指标抽样方法，并说明如何将这些方法应用于晶体塑性有限元法。首先，我们回顾通过对随机体积单元（SVEs）取集合平均来预测目标材料属性均值的经典方法。接下来，我们讨论如何将网格分辨率作为细化参数，把这种方法扩展为多层采样方法。最后，我们展示如何进一步将多层采样方法扩展为多指标采样方法，同时将网格分辨率和底层本构模型作为细化参数。我们还讨论如何通过贪心自适应策略，从给定的模型集合中选取网格分辨率与模型保真度的适当组合。

2.1. 符号说明

对于给定的网格分辨率和给定的本构模型，我们用 $\omega \in \Omega$ 表示所研究材料的不确定微观结构。空间 Ω 表示所有可能的离散化微观结构 ω 的集合，其中 ω 从所有可用微观结构 Ω 所构成的空间中按均匀分布独立同分布（i.i.d.）采样。独立同分布假设构成了从所有微观结构的同一分布中抽取的不同 ω 在统计上等价的基础。在实际应用中，通过求解微结构重构问题来构造 ω，这通常会以纯计算方式引出另一个优化问题。

将从微观结构空间到均质化材料性能的映射记为 $Q(\omega) : \Omega \to D \subseteq \mathbb{R}$。由于底层微观结构 ω 存在不确定性，任何从该微观结构导出的量也都存在不确定性。因此，我们明确表示关注量对结果 ω 的依赖关系，即 $Q(\omega)$ 是一个随机变量。在本文余下部分，我们将关注计算关注量 $Q(\omega)$ 的一阶矩或期望值，其定义为

$$\mathbb{E}\left[Q(\omega)\right] := \int_{\Omega} Q(\omega) \mathrm{d}\omega \tag{1}$$

最后，由于每种材料属性 Q 都基于某种微观结构 ω，而该微观结构本身对应于给定的网格分辨率，因此我们将使用符号说明 $Q_L(\omega)$ 表示该材料属性是通过对网格分辨率层级为 L的微观结构进行近似而得到的。

2.2. 蒙特卡罗方法

给定一组独立同分布的微结构代表性体积单元 $\{\omega^{(n)}\}_{n=1}^{N}$ 及其对感兴趣材料属性的相应预测 $\{Q_L(\omega^{(n)})\}_{n=1}^{N}$，我们可以用以下平均值来近似（1）

$$\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}} \coloneqq \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} Q_L(\omega^{(n)}). \tag{2}$$

式（2）中的集合平均方法也称为蒙特卡罗（MC）方法，在晶体塑性有限元法文献中得到了广泛应用，例如，参见 [38, 39, 40]。在实践中，微观结构 $\omega^{(n)}$ 通常通过求解微结构重构问题获得，而该问题通常又被表述为一个优化问题。关于计算微结构代表性体积单元的综述，可参见 Groeber 等人 [41, 42], 、Bostanabad 等人 [43] 以及 Torquato [44] 。随后，反复执行晶体塑性有限元法，以评估每个微观结构 $Q_L(\omega^{(n)})$ 对应的 $\omega^{(n)}$， $n = 1$、2、.....、 N。

自然可以提出，对从微观结构 $\{\omega^{(n)}\}_{n=1}^{N}$ 中提取的一组材料属性取平均，以近似式（1）中的期望值。由于微结构代表性体积单元序列是独立同分布的，因此期望值$\mathbb{E}[Q_L(\omega^{(1)})] = \cdots = \mathbb{E}[Q_L(\omega^{(N)})] = \mathbb{E}[Q_L]$，且强大数定律保证 $\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}} \to \mathbb{E}[Q_L]$ 几乎必然成立，其中实现次数 N 趋于无穷大，参见 [45]。

式（2）中的蒙特卡罗估计量有两个误差来源：随机误差，即用平均值近似期望值所产生的误差；以及偏差，即用 $Q(\omega)$ 的样本近似 $Q_L(\omega)$的样本所产生的误差。这两种误差的贡献体现在蒙特卡罗估计量的均方误差（MSE）表达式中。我们有

$$\begin{aligned}
\mathrm{MSE}\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right) &\coloneqq \mathbb{E}\left[\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}} - \mathbb{E}\left[Q\right]\right)^2\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}} - \mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right]\right) + \left(\mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right] - \mathbb{E}\left[Q\right]\right)\right)^2\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}} - \mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right]\right)^2\right] + \left(\mathbb{E}\left[Q_L - Q\right]\right)^2 \\
&= \mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right] + \left(\mathbb{E}\left[Q_L - Q\right]\right)^2,
\end{aligned} \tag{3}$$

由于蒙特卡罗估计量是 Q_L的无偏估计量，即 $\mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right] = \mathbb{E}\left[Q_L\right]$，因此交叉乘积项为零。式（3）中的第一项是估计量的方差，表示随机误差。由于我们假设样本集彼此不相关，方差可写为

$$\mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}\right] = \frac{1}{N^2}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{V}\left[Q_L\right] = \frac{\mathbb{V}\left[Q_L\right]}{N}.$$

方差按 $\mathcal{O}(1/N)$ 衰减，可通过增加微结构代表性体积单元 N的数量来减小。式（3）中的第二项是偏差的平方。通过提高分辨率层级 L，即减小网格尺寸，可以减小该项。

如果要求均方误差小于或等于 ε^2，则一个充分条件是

$$\frac{\mathbb{V}\left[Q_L\right]}{N} \leqslant \frac{\varepsilon^2}{2} \quad \text{and} \quad \left|\mathbb{E}\left[Q_L - Q\right]\right| \leqslant \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}.$$

因此，微结构实例的数量 N 应随着 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$增加。假设单次模型评估的成本为 C_L，则可将式（2）中蒙特卡洛估计量的总计算成本表示为

$$\mathrm{cost}(\mathcal{Q}_{\mathrm{MC}}) = NC_L.$$

因此，蒙特卡罗估计量的计算成本会随着 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$ 的增加而增加。

2.3. 多层蒙特卡洛（*MLMC*）方法

多层蒙特卡洛采样的核心思想是，我们不针对关注量从单个近似值 Q_L 中抽取样本，而是针对关注量在近似层级 $\{Q_\ell\}_{\ell=0}^{L}$ 上计算样本 Q。在晶体塑性有限元法中，该层级对应于在一系列网格上对材料参数进行近似，这些网格的分辨率层级逐步提高，其中层级 $\ell = 0$ 对应于成本最低、网格尺寸最粗的近似值，而层级 $\ell = L$对应于成本最高、网格尺寸最精细的近似值。此类多层级层次结构的示意图见 图1a 至 图1e，其示意图见 图1f。

由于期望值是线性算子，因此我们有

$$\mathbb{E}\left[Q_L\right] = \sum_{\ell=1}^{L} \mathbb{E}\left[Q_\ell - Q_{\ell-1}\right] + \mathbb{E}\left[Q_0\right] = \sum_{\ell=0}^{L} \mathbb{E}\left[\Delta Q_\ell\right] \tag{4}$$

其中

$$\Delta Q_\ell \coloneqq \begin{cases} Q_\ell - Q_{\ell-1} & \text{for } \ell > 0 \\ Q_\ell & \text{for } \ell = 0 \end{cases}.$$

使用独立蒙特卡洛估计量 f 对于每个 $L+1$ 右端的项（4），我们得到 MLMC 估计量 r

$$\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}} \coloneqq \sum_{\ell=0}^{L} \frac{1}{N_\ell} \sum_{n=1}^{N_\ell} \Delta Q_\ell(\omega^{(n)}). \tag{5}$$

实际上，这意味着我们在每个层级上使用一组独立同分布的微结构代表性体积单元$\{\omega^{(n)}\}_{n=1}^{N_\ell}$，即 $\ell = 0$，1，.....，L 来估计右端的期望值（4），其中我们假设每个层级上的微结构实例彼此独立。

式（5）中的多层蒙特卡洛估计量对于 $\mathbb{E}\left[Q_L\right]$仍然是无偏估计量，即:

$$\mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}\right] = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{1}{N_\ell} \sum_{n=1}^{N_\ell} \mathbb{E}\left[\Delta Q_\ell\right] = \sum_{\ell=0}^{L} \mathbb{E}\left[\Delta Q_\ell\right] = \mathbb{E}\left[\Delta Q_L\right]$$

其方差为

$$\mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}\right] = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{1}{N_\ell^2} \sum_{n=1}^{N_\ell} \mathbb{V}\left[\Delta Q_\ell\right] = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{\mathbb{V}\left[\Delta Q_\ell\right]}{N_\ell}.$$

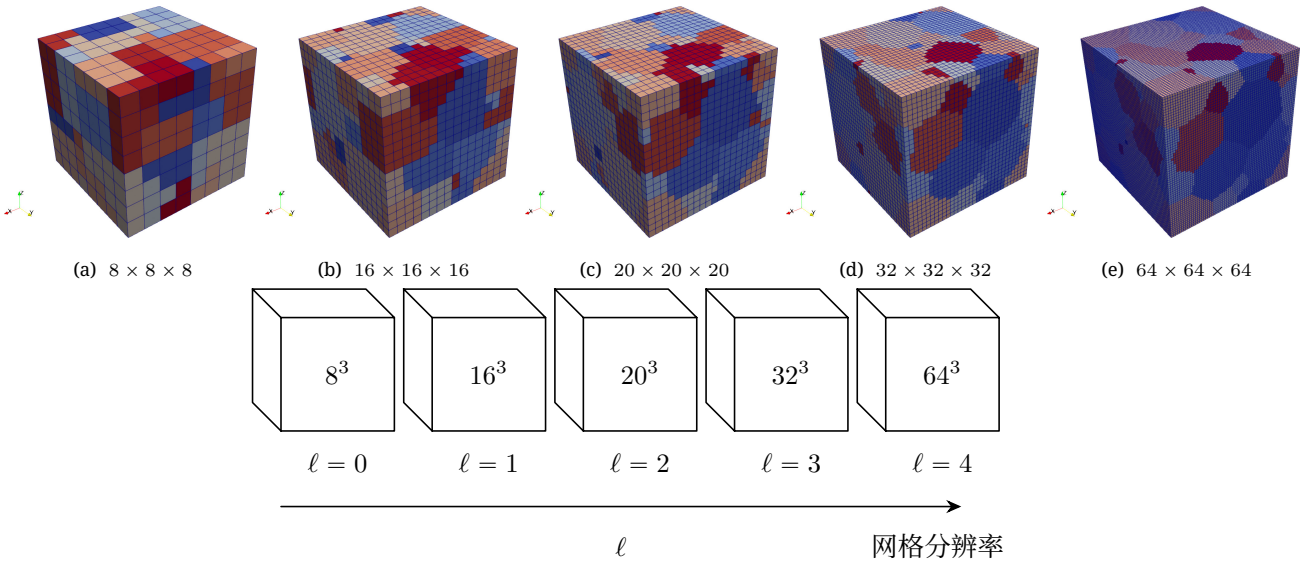
按照式（3）展开均方误差，得到

$$\mathrm{MSE}\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}\right) = \mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}\right] + \left(\mathbb{E}\left[Q_L - Q\right]\right)^2 = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{\mathbb{V}\left[\Delta Q_\ell\right]}{N_\ell} + \left(\mathbb{E}\left[Q_L - Q\right]\right)^2. \tag{6}$$

同样，均方误差由两项组成：估计量的方差和偏差的平方。注意，多层蒙特卡洛估计量的偏差与蒙特卡洛估计量的偏差相同。

一个关键观察是，与其直接在层级 ℓ 上估计期望值 $\mathbb{E}\left[Q_\ell\right]$，如果随机变量 Q_ℓ 和 $Q_{\ell-1}$ 强正相关，即，估计差值 $\mathbb{E}\left[\Delta Q_\ell\right]$的期望值要便宜得多，

$$\begin{aligned} \mathbb{V}\left[\Delta Q_\ell\right] &= \mathbb{V}[Q_\ell - Q_{\ell-1}] \\ &= \mathbb{V}\left[Q_\ell\right] + \mathbb{V}\left[Q_{\ell-1}\right] - 2\mathrm{cov}(Q_\ell, Q_{\ell-1}) \\ &\ll \mathbb{V}\left[Q_\ell\right] + \mathbb{V}\left[Q_{\ell-1}\right] \end{aligned}$$



(f) 通过改变模型中的网格分辨率所得到的多层级层次结构示意图。

其中 $\mathrm{cov}(Q_\ell,\ Q_{\ell-1}) = \rho_{\ell,\ \ell-1}\sqrt{\mathbb{V}[Q_\ell]\mathbb{V}[Q_{\ell-1}]}$ 是Q_ℓ和 $Q_{\ell-1}$之间的协方差，$\rho_{\ell,\ \ell-1}$是皮尔逊相关系数。为确保这种强相关性，需要注意，式（ $\Delta Q_\ell(\omega_\ell^{(n)})$ 5）中的差值是在相同的输入微观结构 $\omega_\ell^{(n)}$ 下计算的。在晶体塑性有限元法的语境中，这意味着该差值是根据同一个底层代表性体积单元的材料参数预测值计算得出的，但使用的是层级中的两种不同网格尺寸。

随着层级参数 $\ell \to \infty$的变化，我们预计近似值 Q_ℓ 将在均方意义上收敛到真实的关注量 Q，即 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell] \to 0$ 当 $\ell \to \infty$时。实际上，这意味着随着 ΔQ_ℓ 的增加，后续用于计算差值 ℓ的蒙特卡罗估计量所需的模型评估次数会减少。在这一假设下，我们发现，大多数样本会取自层级 $\ell = 0$，此处模型评估成本较低；而在更高层级，模型评估成本逐渐升高，所需样本数则较少。通常，在最高分辨率层级只需少量样本。请将此与 第 2.2 节中概述的蒙特卡洛方法进行比较，该方法的所有样本都取自同一高分辨率层级。

如果要求均方误差小于或等于 ε^2，一个充分条件是

$$\sum_{\ell=0}^{L} \frac{\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]}{N_\ell} \leqslant \frac{\varepsilon^2}{2} \quad \text{and} \quad |\mathbb{E}[Q_L - Q]| \leqslant \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}.$$

通过最小化多层蒙特卡洛估计量的总成本，并考虑上述对估计量方差的约束，可以得出每个层级 $\ell = 0$、1、.....、 L 所需统计体积单元 N_ℓ的表达式。多层蒙特卡洛估计量的总成本可表示为

$$\mathrm{cost}(\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}) = \sum_{\ell=0}^{L} N_\ell \Delta C_\ell,$$

其中 $\Delta\, C_\ell$ 表示计算多层差值 ΔQ_ℓ的样本所需的成本。由此可得 s

$$N_\ell = \frac{2}{\varepsilon^2}\sqrt{\frac{\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]}{\Delta C_\ell}}\left(\sum_{\ell=0}^{L}\sqrt{\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]\Delta C_\ell}\right), \tag{7}$$

请参见 [2] 以了解推导的详细信息。在实际应用中， N_ℓ 中的7样本数应向上取整到最接近的整数。这使得估计量在每个层级上的成本最多增加一个样本。

在 [46], 中给出了多层蒙特卡洛估计量渐近成本复杂度的理论界。假设

$$|\mathbb{E}\left[\Delta\mathcal{Q}_\ell\right]| \leqslant c_1\, 2^{-\alpha\ell}, \tag{C1}$$

$$\mathbb{V}\left[\Delta\mathcal{Q}_\ell\right] \leqslant c_2\, 2^{-\beta\ell} \text{ and} \tag{C2}$$

$$\Delta C_\ell \leqslant c_3\, 2^{\gamma\ell} \tag{C3}$$

当 $2\alpha \geqslant \min(\beta,\gamma)$ 时，我们有

$$\operatorname{cost}\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MLMC}}\right) \leqslant \begin{cases} c_4\, \varepsilon^{-2} & \text{if } \beta > \gamma, \\ c_4\, \varepsilon^{-2}(\log\varepsilon)^2 & \text{if } \beta = \gamma, \\ c_4\, \varepsilon^{-2-(\gamma-\beta)/\alpha} & \text{if } \beta < \gamma. \end{cases} \tag{8}$$

2.4. 多指标蒙特卡洛（*MIMC*）方法

MIMC 方法是对第 2.3 节中所述 MLMC 方法的多维扩展。MIMC 方法不再使用单个整数 $\ell = 0,\ 1,\ \ldots\ldots,\ L$ 来表示模型层级中的分辨率层级，而是使用一个 d维元组或多重索引 $\boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^d$，其中 $\mathbb{N}_0 = \{0,\ 1,\ 2,\ \ldots\}$。在晶体塑性有限元法中，额外的细化维度可以是本构模型的保真度。图 2 对此进行了说明，其中，[47]中的唯象塑性模型被视为低保真度本构模型，而 [48] 和 [49]中的非局部位错密度模型则被视为高保真度本构模型。

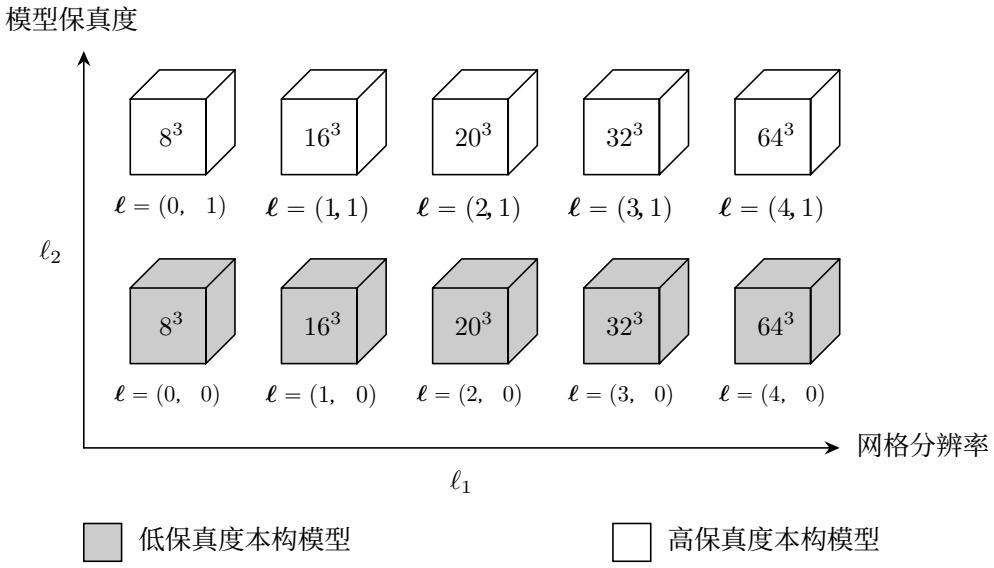


图 2：通过同时改变网格分辨率 (ℓ_1) 和模型保真度 (ℓ_2)得到的多保真层级示意图，其中较小的 ℓ 对应较低的保真度层级，较大的 ℓ 对应较高的保真度层级。

The 多指标构造始于单方向差分的张量积，即 .,

$$\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}} := \left(\bigotimes_{j=1}^{d} \Delta_j\right) Q_{\boldsymbol{\ell}} \quad \text{with} \quad \Delta_j Q_{\boldsymbol{\ell}} = \begin{cases} Q_{\boldsymbol{\ell}} - Q_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{e}_j} & \text{if } \ell_j > 0, \\ Q_{\boldsymbol{\ell}} & \text{if } \ell_j = 0, \end{cases} \tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{e}_j = (\delta_{ij})_{i=1}^d$ 和 δ_{ij} 是克罗内克δ。例如，当 $d = 2$ 和 $\boldsymbol{\ell} = (2,\ 1)$ 时，我们有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Delta} Q_{(2,1)} &= \Delta_2(\Delta_1 Q_{(2,1)}) \\ &= \Delta_2(Q_{(2,1)} - Q_{(1,1)}) \\ &= Q_{(2,1)} - Q_{(1,1)} - Q_{(2,0)} + Q_{(1,0)}, \end{aligned}$$

参见 图 2。一般而言，在计算 $\Delta Q_{\boldsymbol{\ell}}$ 的 d 维多重索引差分时，涉及 2^d 个不同的模型近似。靠近边界时，涉及 $2^{d'}$ 个不同的模型近似，其中 d' 是满足 $\ell_j > 0$ 的维度数， $j = 1$、2、.....、 d。

我们注意到，多指标差分也可以写成

$$\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}} = \sum_{\substack{\mathfrak{u} \subseteq \{1,\dots,d\} \\ \boldsymbol{\ell} - \boldsymbol{e}_{\mathfrak{u}} \in \mathbb{N}^d}} (-1)^{|\mathfrak{u}|} Q_{\boldsymbol{\ell} - \mathfrak{u}}, \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{e}_{\mathfrak{u}}$ 是一个向量，其 j分量在 $j \in \mathfrak{u}$ 时等于 1，其他位置均为 0。式（10）更接近于 稀疏组合技术，该技术源自 [50, 51, 52],并启发了 [3]中多指标蒙特卡洛方法的构造。

[3]提出的多指标蒙特卡洛方法使用独立的蒙特卡罗估计量来估计有限可求和多重索引差分子集中的每一项 $\mathfrak{I}_d$，即

$$\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}} = \sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \frac{1}{N_{\boldsymbol{\ell}}} \sum_{n=0}^{N_{\boldsymbol{\ell}}} \boldsymbol{\Delta} \mathcal{Q}_{\boldsymbol{\ell}}(\omega^{(n)}). \tag{11}$$

与 第 2.3 节中介绍的多层方法类似，多指标差分 $\mathcal{Q}_{\boldsymbol{\ell}}(\omega^{(n)})$ 基于相同的结果$\omega^{(n)}$ ，以确保不同近似值之间具有足够的正相关性，从而保证多指标差分的方差随着 $\boldsymbol{\ell} \to \infty$ 各分量逐渐增加时 $\boldsymbol{\ell}$ 能够充分衰减。随着方差充分衰减，大多数样本将取自低保真度指标，而在保真度逐渐提高的指标上所需的样本数将会减少。

注意，并非所有多指标集合 $\mathfrak{I}_d$ 都是合适的指标集。具体而言，为了使指标集可容许，我们对其施加约束，假设它是向下封闭的。关于可容许性的更多细节将在第 2.5 节中讨论。对于无限维的可容许指标集 $\mathfrak{I}_d$，由于多指标差分满足以下关系，多指标估计量是关注量期望值的无偏估计量

$$\sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^d} \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right] = \mathbb{E}\left[Q\right].$$

多指标蒙特卡洛估计量的方差为

$$\mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}}\right] = \sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \frac{1}{N_{\boldsymbol{\ell}}^2} \sum_{n=1}^{N_{\boldsymbol{\ell}}} \mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right] = \sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \frac{\mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]}{N_{\boldsymbol{\ell}}}.$$

(5) 中的多层蒙特卡洛估计量只是（11）在 $d = 1$时的一个特例。在这种情况下，元组 $\boldsymbol{\ell}$ 简化为一个标量层级 ℓ ，其构造不涉及差分的张量积。

按照（6）展开均方误差，可得

$$\mathrm{MSE}\left(\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}}\right) = \mathbb{V}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}}\right] + \left(\mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}} - Q\right]\right)^2 = \sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \frac{\mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]}{N_{\boldsymbol{\ell}}} + \left(\mathbb{E}[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}} - Q]\right)^2. \tag{12}$$

同样，均方误差由两项组成：估计量的方差和偏差的平方。通过选择，可以保证均方误差小于或等于 ε^2

$$\sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \frac{\mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]}{N_{\boldsymbol{\ell}}} \leqslant \frac{\varepsilon^2}{2} \quad \text{and} \quad \left|\mathbb{E}[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}} - Q]\right| \leqslant \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}. \tag{13}$$

(13) 中的第一个约束给出了每个指标所需样本数的表达式，与方程 (7) 非常相似，即:

$$N_{\boldsymbol{\ell}} = \frac{2}{\varepsilon^2} \sqrt{\frac{\mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]}{\boldsymbol{\Delta} C_{\boldsymbol{\ell}}}} \left(\sum_{\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d} \sqrt{\mathbb{V}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right] \boldsymbol{\Delta} C_{\boldsymbol{\ell}}} \right), \tag{14}$$

其中 $\boldsymbol{\Delta}C_\ell$ 表示计算一个多层差值样本的成本 $\boldsymbol{\Delta}Q_\ell$，参见 [3](13) 中的第二个约束将规定指标集 $\mathfrak{I}_d$的形状。常用的指标集包括总次数指标集

$$\mathfrak{I}_d = \left\{ \boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^d : \sum_{j=1}^{d} \ell_j \leqslant L \right\}$$

以及双曲交叉指标集

$$\mathfrak{I}_d = \left\{ \boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^d : \prod_{j=1}^{d} (\ell_j + 1) \leqslant L + 1 \right\},$$

其中 L 现在是一个控制指标集规模的参数。对于总次数指标集，关于 MIMC 估计量成本的理论分析（类似于8）已在 [3]中给出。

指标集 $\mathfrak{I}_d$ 的最优形状通常基于对当前问题的先验知识确定。然而，在大多数实际应用中，包括 CPFEM，这类知识并不容易获得。下一节将讨论如何以自适应方式构造指标集 $\mathfrak{I}_d$，从而使 MIMC 方法在实践中具有实用性。

2.5. 维度自适应多指标蒙特卡洛

多指标集 $\mathfrak{I}_d$ 的维度自适应构造已在 [4]中进行了研究。该构造方法的思想是：从最低分辨率指标开始，利用已计算模型评估的统计量作为多指标差分真实期望值和方差的代理，动态生成指标集。采用这种自适应构造方案的多指标估计量称为维度自适应多指标蒙特卡洛（AMIMC）。

在讨论一般的自适应过程之前，我们先更详细地考察指标集要满足哪些要求才能成为可容许指标集。可容许指标集是一个非空的多指标集合，对于所有满足 $\boldsymbol{\tau} \leqslant \boldsymbol{\ell}$ 逐分量关系的多指标 $\boldsymbol{\tau}$ 和 $\boldsymbol{\ell}$（其中 $\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d$），均有 $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{I}_d$。等价地，对于所有 $\boldsymbol{\ell} \in \mathfrak{I}_d$，我们有

$$\boldsymbol{\ell} - \boldsymbol{e}_j \in \mathfrak{I}_d \text{ for all } j = 1, \ldots, d \text{ where } \ell_j > 0,$$

其中 $\boldsymbol{e}_j$ 如方程（9）所定义。换言之，在可容许指标集中，至少有一个方向上的分量更小的所有指标也都包含在该集合中。根据方程（11）定义多指标估计量时，这一条件确保了基于抵消差分的望远镜求和展开有效。关于 $d = 2$ 的可容许与不可容许指标集示例见图 3。

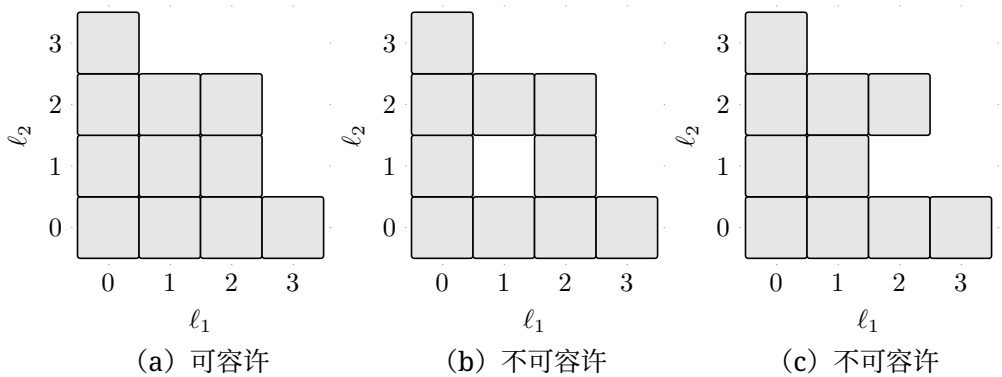


图 3：二维中可容许与不可容许指标集的示例（$d = 2$）。

接下来　　此外，我们还需要指标 $\boldsymbol{\ell}$的前向邻域 $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\ell}}$ 这一概念，其定义如下：

$$\mathcal{F}_{\boldsymbol{\ell}} = \{\boldsymbol{\ell} + \boldsymbol{e}_j, 1 \leqslant j \leqslant d\}.$$

类似地，指标 $\boldsymbol{\ell}$ 的后向邻域 $\mathcal{B}_{\boldsymbol{\ell}}$ 定义如下：

$$\mathcal{B}_{\boldsymbol{\ell}} = \{\boldsymbol{\ell} - \boldsymbol{e}_j : \ell_j > 0, 1 \leqslant j \leqslant d\}.$$

可容许指标集包含集合中所有指标的后向邻域。可容许性也称为向下封闭性，参见 [53]。可容许的指标集也称为向下封闭指标集。

指标集 $\mathcal{I}_d$ 的最优形状是一个约束优化问题的解：在满足（13）中的偏差约束的同时，最小化（11）中多指标蒙特卡洛估计量的总成本。利用（14），（11）中的多指标蒙特卡洛估计量的总成本可写为

$$\operatorname{cost}(\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}}) = \frac{2}{\varepsilon^2}\left(\sum_{\boldsymbol{\ell}\in\mathcal{I}_d}\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}}\right)^2. \tag{15}$$

此外，由于指标集 $\mathcal{I}_d$ 必然是有限的，因此在估计期望值$\mathbb{E}[Q]$时，多指标蒙特卡洛估计量存在偏差。该偏差等于所有被忽略贡献之和，即有

$$\left|\mathbb{E}\left[\mathcal{Q}_{\mathrm{MIMC}} - Q\right]\right| = \left|\sum_{\boldsymbol{\ell}\notin\mathcal{I}_d}\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right| \leqslant \sum_{\boldsymbol{\ell}\notin\mathcal{I}_d}\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|.$$

因此，最优指标集 $\mathcal{I}_d$ 是以下问题的解

$$\begin{aligned} &\min_{\mathcal{I}_d\subseteq\mathbb{N}_0^d}\sum_{\boldsymbol{\ell}\in\mathcal{I}_d}\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}} \\ &\text{subject to}\sum_{\boldsymbol{\ell}\notin\mathcal{I}_d}\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right| \leqslant \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{16}$$

除非对 $\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]$、$\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}$ 和$\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|$作出进一步假设，否则无法解析地求解该最小化问题。这些假设将直接决定指标集在理论上的最优形状。然而在实践中，很难先验地确定哪些假设最适合对当前问题进行建模。相反，我们将把优化问题（16）重新表述为一个类似于 [50]的0-1背包问题。0-1背包问题是一种组合优化问题：必须将具有相关成本和值的不同物品纳入一个集合，使总价值最大化，同时总成本不超过某个限值。在0-1背包问题中，每种物品只有一个。这对应于当前问题，其中唯一的物品（或指标）具有一定的“价值”（偏差降低），同时也具有一定的“成本”（计算成本）。

每个指标的取值用 $\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|$ 表示。该值越高，将此指标加入指标集后，偏差降低得越多。因此，指标集 $\mathcal{I}_d$ 的总值 v 为

$$v(\mathcal{I}_d) = \sum_{\boldsymbol{\ell}\in\mathcal{I}_d}\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|.$$

每个指标的成本以其对总工作量的贡献表示，$\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}}$，参见方程（15）。指标集 w 的总工作量 $\mathcal{I}_d$ 为

$$w(\mathcal{I}_d) = \sum_{\boldsymbol{\ell}\in\mathcal{I}_d}\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}}.$$

这促使我们构　　为每个指标构造一个收益指标 $P_{\boldsymbol{\ell}} > 0$，定义为其值与成本之比：

$$P_{\boldsymbol{\ell}} = \frac{\left|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|}{\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}}}. \tag{17}$$

收益越高，将该指标纳入指标集的益处就越大。因此，指标集仅包含收益指标高于某个阈值 ρ的指标：

$$\mathcal{I}_d = \{\boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^d : P_{\boldsymbol{\ell}} \geqslant \rho\}.$$

这意味着，最优指标集的形状是利润指标的水平集。

利用（17）中的利润指标，可以通过渐进式扩充多指标集 $\mathcal{I}_d$来求解方程（16）中的优化问题。随后，贪心过程将从指标集 $\mathcal{I}_d = \{(0,\ldots,0)\}$开始，逐步向该集合添加指标，以尽可能降低偏差，同时确保在该过程的每次迭代中，指标集始终保持可容许。此类贪心过程的一种可行策略是将指标集 $\mathcal{I}_d$ 划分为两个互不相交的子集： $\mathcal{O}_d$ 和 $\mathcal{A}_d$。容许多指标集 $\mathcal{O}_d$ 包含已考虑纳入指标集的旧多指标。这些指标在 $\mathcal{I}_d = \mathcal{O}_d \cup \mathcal{A}_d$中至少有一个前向邻居。集合 $\mathcal{A}_d$包含适合纳入活动指标的候选项 $\mathcal{O}_d$。根据定义，这些指标的前向邻居均未被纳入指标集 $\mathcal{I}_d$。活动指标构成指标集的外边界，并用于通过以下启发式方法计算偏差估计

$$\left|\sum_{\boldsymbol{\ell}\notin\mathcal{I}_d} \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right| \approx \left|\sum_{\boldsymbol{\ell}\in\mathcal{A}_d} \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]\right|. \tag{18}$$

在贪心过程中，每次迭代都会从 $\mathcal{A}_d$ 中选取收益指标最大的指标 $\boldsymbol{\tau}$，收益由方程（17）定义。该指标从活动指标集 $\mathcal{A}_d$ 移至旧指标集 $\mathcal{O}_d$。随后，多指标集 $\mathcal{A}_d$ 将由以下所有多重索引扩充： $\boldsymbol{\kappa}$ 属于 $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\tau}}$ 的前向邻域 $\boldsymbol{\tau}$，且其后向邻居 $\mathcal{B}_{\boldsymbol{\kappa}}$ 均包含在旧指标集 $\mathcal{O}_d$中。

图4展示了 $d = 2$ 贪婪指标集增长过程中的一个示例步骤。假设在某次迭代中，指标集如图4(a)所示。具有最大收益的指标 $\boldsymbol{\tau} = (2,1)$由表示。首先，在图4(b)中，将该指标从活动集 $\mathcal{A}_2$ ( )移至旧集 $\mathcal{O}_2$ ( )，并考察前向邻域$\mathcal{F}_{(2,1)} = \{(3,1),(2,2)\}$。前向邻域$\mathcal{F}_{(2,1)}$ 以粗黑线标示。指标$(3,1)$ 在旧集中是可容许的，因为构成其后向邻域的两个指标$\mathcal{B}_{(3,1)} = \{(2,1),(3,0)\}$均已包含在旧集中。因此，在图4(c)中，将指标 $(3,1)$ 添加到活动集 $\mathcal{A}_2$中。然而，指标 $(2,2)$在 $\mathcal{O}_2$中不可容许，因为指标 $(1,2)$ 属于活动集 $\mathcal{A}_2$，而不属于旧集 $\mathcal{O}_2$。因此，不对指标 $(2,2)$ 进行处理。有关贪婪指标集增长的详细描述，请参见算法 1。

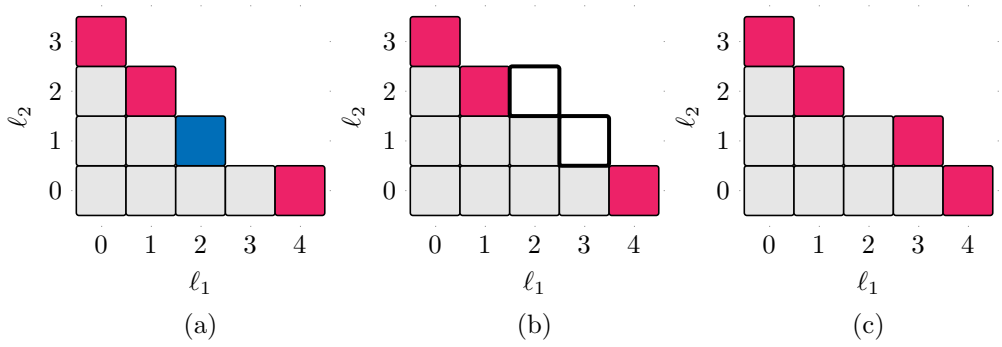


图4：二维（$d = 2$）自适应算法示意图。图中展示了多指标集 $\mathcal{I}_2$的演变，并区分旧指标集 $\mathcal{O}$ ( )和活动指标集 $\mathcal{A}$ ( )。本次算法迭代中收益最大的指标以 标示。

算法 1 多指标集的自适应构造

输入： 旧集 $\mathcal{O}_d$ 和活动集 $\mathcal{A}_d$

输出： 更新后的旧集 $\mathcal{O}_d$ 和更新后的活动集 $\mathcal{A}_d$，新添加的指标集合 $\mathcal{N}$

过程扩展指标集($\mathcal{O}_d$, $\mathcal{A}_d$)
  计算每个指标 $\boldsymbol{\ell} \in \mathcal{A}_d$的收益指标 $P_{\boldsymbol{\ell}}$
  从 $\mathcal{A}_d$ 中选择利润最大的指标 $\boldsymbol{\tau}$ $P_{\boldsymbol{\tau}}$
  $\mathcal{A}_d \leftarrow \mathcal{A}_d \backslash \{\boldsymbol{\tau}\}$
  $\mathcal{O}_d \leftarrow \mathcal{O}_d \cup \{\boldsymbol{\tau}\}$
  $\mathcal{N} \leftarrow \varnothing$
  对于每个 $\boldsymbol{\kappa} \in \mathcal{F}_{\boldsymbol{\tau}}$ **执行**
    有效 ←为真
    对于每个 $\boldsymbol{\ell} \in \mathcal{B}_{\mathcal{F}_i}$ **do**
      如果 $\boldsymbol{\ell} \notin \mathcal{O}_d$ **那么** 有效 ← 为假
    结束循环
    如果 有效 = 为真 **那么** $\mathcal{N} \leftarrow \mathcal{N} \cup \{\boldsymbol{\kappa}\}$
  结束循环
  $\mathcal{A}_d \leftarrow \mathcal{A}_d \cup \mathcal{N}$
结束过程

不难看出，该过程确实只生成可容许的指标集。通过将具有最大收益的指标从活动集移至旧集，旧集仍然是可容许的，因为该指标属于活动集，并且根据定义，活动集中的所有指标对于旧集都是可容许的。此外，在将具有最大收益指标的前向邻域中的指标添加到活动集之前，还会检查它们对于旧集的可容许性。因此，构成新 活动集的多指标对于新的旧集都是可容许的。这意味着它们的所有后向邻居 $\mathcal{B}_{\boldsymbol{\ell}}$ 均已包含在旧指标集中。根据定义，如果一个集合中所有指标的后向邻居都包含在该集合中，则该集合就是可容许指标集，正如所要求的那样。

2.6. 算法

自适应多指标蒙特卡洛模拟的完整过程如算法 2所示。该过程的输入为关注量 ε 的均方根误差(RMSE)期望值的指定容差 Q。RMSE定义为式（12）中定义的均方误差（MSE）的平方根。该方法返回的输出为多指标蒙特卡洛估计量的值E，以及对所达到的RMSE的估计error。下面将阐明该算法的一些关键组成部分。

我们使用样本均值作为多指标差分真实均值的近似，即:

$$\mathsf{E}_{\boldsymbol{\ell}} \coloneqq \frac{1}{N_{\boldsymbol{\ell}}} \sum_{n=1}^{N_{\boldsymbol{\ell}}} \boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}(\omega^{(n)}) \approx \mathbb{E}[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}]. \tag{19}$$

我们使用样本方差作为多指标差分真实方差的近似，即:

$$\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}} \coloneqq \frac{1}{N_{\boldsymbol{\ell}} - 1} \sum_{n=1}^{N_{\boldsymbol{\ell}}} \left(\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}(\omega^{(n)}) - \mathsf{E}_{\boldsymbol{\ell}} \right)^2 \approx \mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta} Q_{\boldsymbol{\ell}}]. \tag{20}$$

成本 $\boldsymbol{\Delta} C_{\boldsymbol{\ell}}$ 可以替换为 计算一次多指标差分样本所需的墙钟时间 $\mathsf{C}_{\boldsymbol{\ell}}$.

从 $\mathcal{O}_d(0) = \varnothing$ 和 $\mathcal{A}_d(0) = \{(0,\ldots,0)\}$开始，算法按照 $\mathcal{I}_d$ 中所述的流程逐步扩展指标集 算法 1。对于加入指标集的每个新指标 $\boldsymbol{\ell}$，我们通过取 $\tilde{}$个预热样本，计算其方差贡献的初始估计 N。当有足够的低分辨率指标可用时，我们使用外推值来估计 $\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}}$ 和 $\mathsf{C}_{\boldsymbol{\ell}}$，并利用（14）估计最优样本数。随后，我们确保该指标至少取 2 个预热样本，以便使用 公式（20）计算样本方差，参见 第 12 行。这种样本数回归 方法最初是在多层蒙特卡洛（MLMC）背景下提出的，参见 [54], 但很容易扩展到多指标情形。一旦获得每个指标 $\boldsymbol{\ell}$的方差和成本估计，我们就会重新计算方程（14），以确定每个指标上的准最优样本数，并据此额外进行相应次数的模型评估。

请注意，使用主动集算法不会浪费计算资源。也就是说，一旦某个指标被加入活动集，其样本也会用于最终计算式（11）中的多指标蒙特卡洛估计量。事实上，若仅为计算收益指标而在这些活动指标上抽取样本，随后却在最终估计值的计算中排除这些样本，这样做毫无意义。

与所有自适应算法一样，该算法可能会受到某个关注量的误导：在某个阶段，扩展指标集似乎没有任何益处，但在指标集任意更深处却隐藏着重要贡献。例如，假设某个指标 $P_{\boldsymbol{\ell}}$ $\boldsymbol{\ell}$ 对应的收益指标 $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\ell}}$恰好很小，那么算法就会判定继续细化前向邻域 $\boldsymbol{\ell}$ 没有益处。现在有两种可能：或者 $\boldsymbol{\ell}$的前向邻居的收益指标小于（或至多与） $\boldsymbol{\ell}$ 的收益指标，因此自适应过程正确地停止了该方向上的自适应；或者， $P_{\boldsymbol{\ell}}$的某个前向邻居的收益指标远大于，因此需要进一步细化。不幸的是，除非对关注量进行先验分析，否则无法避免这一问题；实际上，这种分析会彻底破坏自适应算法的基本前提。关于椭圆偏微分方程（PDE）模型问题中此类分析的示例，请参见 [55] 。当然，可以通过实际计算前向邻域 $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\ell}}$中各指标的收益指标来避免这个问题，但这只会把问题推迟，因为前向邻居的前向邻域也可能遇到同样的问题。

在自适应稀疏网格的背景下，另一种收益指标为

$$P_{\boldsymbol{\ell}} = \max\left(\zeta\frac{|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}\right]|}{|\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\Delta}Q_{\mathbf{0}}\right]|}, (1-\zeta)\frac{\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\mathbf{0}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\mathbf{0}}}}{\sqrt{\mathbb{V}[\boldsymbol{\Delta}Q_{\boldsymbol{\ell}}]\boldsymbol{\Delta}C_{\boldsymbol{\ell}}}}\right),$$

其中， $0 \leqslant \zeta \leqslant 1$ 用于衡量每个指标 $\boldsymbol{\ell}$ 对偏差和计算成本的贡献。这种表述的好处是，用户可以指定保护参数 ζ，从而可选择加大每个多重索引取值的权重，并放宽工作量约束。然而，我们通过数值实验发现，式（17）中定义的收益指标能够产生相近的准最优索引集，无需校准额外参数 ζ。

在实际应用中，收益指标的计算依据的是一组预热样本，或由较粗层级的外推值得到。这意味着这些收益指标，尤其是较大指标处的收益指标，可能极不可靠。为避免算法陷入局部次优搜索方向，选择次优指标进行进一步细化可能有所助益。例如，可以采用类似接受—拒绝的算法，以一定的接受率 r仅选择收益最大的指标，否则从活动集中随机选取另一个指标。接受率越低，自适应算法就越倾向于沿所有坐标方向进行全局搜索，并可能识别出上述评注中提到的隐藏特征。在晶体塑性有限元法中，模型保真度作为额外细化方向时只有两个可能的候选项，因此我们认为这种随机化方法没有必要。不过，当在模型层级中加入其他细化方向（例如改变时间步长）时，类似接受—拒绝的算法

算法 2 自适应多重指标蒙特卡罗

输入： RMSE 容差 ε

输出： Q 的均值近似值 E，误差估计 error

过程 AMIMC(ε)
  B $\leftarrow \infty$
  $\mathcal{O}_d \leftarrow \varnothing$
  $\mathcal{A}_d \leftarrow \{(0,\ldots,0)\}$
  重复
    $\mathcal{O}_d$, $\mathcal{A}_d$, $\mathcal{N} \leftarrow$ 扩展指标集($\mathcal{O}_d$, $\mathcal{A}_d$)
    对每个 $\boldsymbol{\ell} \in \mathcal{N}$ **执行**
      如果 最大值($\boldsymbol{\ell}$) $\leqslant 2$，**则**
        在指标 $\boldsymbol{\ell}$ 处抽取预热样本，使其至少达到 $\tilde{N}$
      else
        估计 $N_{\boldsymbol{\ell}}$ （14）使用以下对象的外推值：$\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}}$ 和 $\mathsf{C}_{\boldsymbol{\ell}}$
        取 $\max(2,\min(\tilde{N}, N_{\boldsymbol{\ell}}))$ 个指标为 $\boldsymbol{\ell}$ 的预热样本
      结束条件
      判断
      计算 $\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}}$，使用（20）并计算 $\mathsf{C}_{\boldsymbol{\ell}}$
    结束循环
    E $\leftarrow 0$ 和 V $\leftarrow 0$
    对于每个 $\boldsymbol{\ell} \in \mathcal{I}_d$ **执行**
      计算样本的最佳数量 $N_{\boldsymbol{\ell}}$ 使用（14）
      在指标 $\boldsymbol{\ell}$ 处获取额外样本，使其至少达到 $N_{\boldsymbol{\ell}}$
      E $\leftarrow$ E $+\mathsf{E}_{\boldsymbol{\ell}}$ 其中 $\mathsf{E}_{\boldsymbol{\ell}}$ 使用（19）计算
      Var $\leftarrow$ Var $+\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}}/N_{\boldsymbol{\ell}}$ 其中 $\mathsf{V}_{\boldsymbol{\ell}}$ 使用（20）计算
    结束循环
    计算偏差的估计值 B 使用（18）
    误差 $\leftarrow \sqrt{\mathrm{V} + \mathrm{B}^2}$
  直到 B $\leqslant \varepsilon/\sqrt{2}$
结束过程

这种策略对于确保充分探索模型搜索空间可能至关重要。

3. 晶体塑性有限元法中的本构模型

对于小变形，弹塑性分解可以采用加法形式计算；而对于大变形，采用变形梯度的乘法分解更为合适，即

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{p}},$$

随后，速度梯度的弹塑性分解为

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{F}}_{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{e}}^{-1} + \mathbf{F}_{\mathrm{e}} \cdot \dot{\mathbf{F}}_{\mathrm{p}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{p}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{e}}^{-1} = \mathbf{L}_{\mathrm{e}} + \mathbf{F}_{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{L}_{\mathrm{p}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{e}}^{-1},$$

其中，$\mathbf{L}_{\mathrm{P}}$ 和$\mathbf{L}_{\mathrm{e}}$ 分别为塑性和弹性速度梯度。第二类皮奥拉-基尔霍夫应力张量$\mathbf{S}$是在中间构形中定义的对称二阶张量，其表达式为

$$\mathbf{S} = \frac{\mathbb{C}}{2} : (\mathbf{F}_{\mathrm{e}}^{T}\mathbf{F}_{\mathrm{e}} - \mathbf{I}) = \mathbb{C} : \boldsymbol{e}_{\mathrm{e}} = J\mathbf{F}^{-1} \cdot \sigma \cdot \mathbf{F}^{-T},$$

其中，$\mathbb{C}$ 为四阶弹性张量，$\mathbf{F}_{\mathrm{e}}$ 为弹性变形梯度，$\mathbf{F}_{\mathrm{P}}$ 为塑性变形梯度[47]，$\boldsymbol{e}_{\mathrm{e}} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{F}_{e}^{T}\mathbf{F}_{\mathrm{e}} - \mathbf{I}\right)$ 为弹性格林-拉格朗日应变，而 σ 为柯西应力张量（参见 [56], 第 3.3 节）。非弹性变形梯度$\mathbf{F}_{\mathrm{P}}$ 的演化由相应的速度梯度$\mathbf{L}_{\mathrm{P}}$ 通过流动法则给出

$$\dot{\mathbf{F}}_{\mathrm{p}} = \mathbf{L}_{\mathrm{p}}\mathbf{F}_{\mathrm{p}},$$

塑性　　性速度梯度$\mathbf{L}_{\mathrm{P}}$ 在中间（松弛）构型中由以下公式确定

$$\mathbf{L}_{\mathrm{p}} = \dot{\mathbf{F}}_{\mathrm{p}} \cdot \mathbf{F}_{\mathrm{p}}^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \left(\mathbf{s}_{\mathrm{s}}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\mathrm{s}}^{\alpha}\right),$$

其中，$\mathbf{s}_{\mathrm{s}}^{\alpha}$和$\mathbf{n}_{\mathrm{s}}^{\alpha}$ 分别是沿滑移方向和滑移面法向的单位向量（参见第 6.2, [37] 节）。 τ^{α}对 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 的驱动力根据施密特定律表示为

$$\tau^{\alpha} = \mathbf{M}_{\mathrm{p}} \cdot \left(\mathbf{s}_{\mathrm{s}}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\mathrm{s}}^{\alpha}\right),$$

其中$\mathbf{M}_{\mathrm{P}}$ 是曼德尔　　应力，位于塑性构型中，由第二类 Piola-Kirchhoff 应力$\mathbf{S}$计算得到。

本节简要总结了DAMASK中提供的两个本构模型。Roters 等人已对该软件进行了全面评述。 [37] （参见第 6.2.2 和 6.2.3 节），为使本文内容完整，相关内容分别见第 3.1 节和第 3.2 节。希望深入了解的读者可参阅 Roters 等人的工作 [47, 37] ，以全面了解一般的晶体塑性有限元法模型以及DAMASK 的具体内容。关于谱求解器的实现，可参阅 Eisenlohr 等人 [57] 和 Shanthraj 等人的工作。 [58, 59]。

事实上，多层方法并不要求每个层级的自由度数量具有几何结构。原则上，任何能够使多层差值的方差随着层级参数增加而衰减，同时使计算成本增加的层次结构，都可能适用于多层蒙特卡洛。然而，对于这类层次结构而言，哪一种是最佳选择，即能够产生最低总体成本的选择，目前尚不先验可知。我们在本文中选择网格分辨率的几何结构，出于两个方面的考虑。首先，在多层蒙特卡洛方法渐近成本复杂度的理论处理中，例如 [2, 46], 所述，通常假设计算成本随层级参数增加而遵循“幂律”。这对应于第 *2.3* 节中的条件（*C3*）。

每个样本的成本随层级参数变化。在随机微分方程（SDE）的背景下，几何结构是自然的，参见 [60] ；对于椭圆型偏微分方程源问题，参见 [46]。在后者中，作者提到，这种结构受多重网格文献的启发。其次，也是或许更重要的一点是，已有研究表明，对于椭圆型源问题，几何关系是多层级层次结构的最优选择，参见例如 [61]。

3.1. 唯象晶体塑性本构模型

Hutchinson 最先提出了一种用于面心立方（FCC）晶体的唯象晶体塑性本构模型 [62] ，随后 Kalidindi 将其扩展至变形孪生 [63]。塑性分量通过 N_{s} 滑移系和 N_{tw} 孪晶系上的阻力 ξ 进行参数化。 $\alpha = 1, \ldots, N_{\mathrm{s}}$ 滑移系上的阻力从 ξ_0 演变至与系统相关的饱和值，并根据滑移系和孪晶系上的剪切量而变化，具体如下：

$$\dot{\xi}^{\alpha} = h_0^{\text{s-s}} \left(1 + c_1 \left(f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}}\right)^{c_2}\right) \left(1 + h_{\mathrm{int}}^{\alpha}\right) \left[\sum_{\alpha'=1}^{N_{\mathrm{s}}} |\dot{\gamma}^{\alpha'}| \left|1 - \frac{\xi^{\alpha'}}{\xi_{\infty}^{\alpha'}}\right|^{a} \operatorname{sgn}\left(1 - \frac{\xi^{\alpha'}}{\xi_{\infty}^{\alpha'}}\right) h^{\alpha\alpha'}\right] + \sum_{\beta'=1}^{N_{\mathrm{tw}}} \dot{\gamma}^{\beta'} h^{\alpha\beta'},$$

其中， $f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}}$ 为总孪晶体积分数， h 表示滑移-滑移和滑移-孪晶相互作用矩阵的分量，$h_0^{\text{s-s}}$、 h_{int}、 c_1、 c_2 为模型特定的拟合参数， ξ_{∞} 表示饱和阻力。

$\beta = 1, \ldots, N_{\mathrm{tw}}$ 孪晶系上的阻力以类似方式演变：

$$\dot{\xi}^{\beta} = h_0^{\text{tw-s}} \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{s}}} |\gamma_{\alpha}|\right)^{c_3} \left(\sum_{\alpha'=1}^{N_{\mathrm{s}}} |\dot{\gamma}^{\alpha'}| h^{\beta\alpha'}\right) + h_0^{\text{tw-tw}} \left(f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}}\right)^{c_4} \left(\sum_{\beta'=1}^{N_{\mathrm{tw}}} \dot{\gamma}^{\beta'} h^{\beta\beta'}\right),$$

其中， $h_0^{\text{tw-s}}$、 $h_0^{\text{tw-tw}}$、 c_3和 c_4 为模型特定的拟合参数。每个滑移系上的剪切量以如下速率演变：

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = (1 - f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}}) \dot{\gamma_0}^{\alpha} \left|\frac{\tau^{\alpha}}{\xi^{\alpha}}\right|^{n} \operatorname{sgn}(\tau^{\alpha}).$$

其中，考虑到孪晶形成的单向特性，机械孪生引起的滑移计算方式略有不同，

$$\dot{\gamma} = (1 - f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}}) \dot{\gamma_0} \left|\frac{\tau}{\xi}\right|^{n} \mathcal{H}(\tau),$$

其中， $\mathcal{H}$ 为Heaviside阶跃函数。总孪晶体积计算如下

$$f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}} = \max\left(1.0, \sum_{\beta=1}^{N_{\mathrm{tw}}} \frac{\gamma^{\beta}}{\gamma_{\mathrm{char}}^{\beta}}\right),$$

其中， γ_{char} 是机械孪生引起的特征剪切，并取决于孪晶系 .

3.2. 基于位错密度的本构模型

Kalidindi [63] 提出了一种包含机械孪生和相变贡献的塑性速度梯度模型，其表达式为

$$\mathbf{L}_{\mathrm{p}} = (1 - f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}} - f_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{tot}}) \sum_{\alpha=1}^{N_{\mathrm{s}}} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{s}_{\mathrm{s}}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\mathrm{s}}^{\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_{\mathrm{tw}}} \dot{\gamma} \mathbf{s}_{\mathrm{tw}}^{\beta} \otimes \mathbf{n}_{\mathrm{tw}}^{\beta} + \sum_{\chi=1}^{N_{\mathrm{tr}}} \dot{\gamma}^{\chi} \mathbf{s}_{\mathrm{tr}}^{\chi} \otimes \mathbf{n}_{\mathrm{tr}}^{\chi},$$

其中， $\chi = 1$，……， N_{tr} 是体积分数为 f_{tr}、包含 N_{tr} 个相变系的 ε马氏体；$\mathbf{s}_{\mathrm{s}}^{\alpha}$和$\mathbf{n}_{\mathrm{s}}^{\alpha}$分别是 N_{s} 滑移系 α的剪切方向和剪切面法线的单位向量；$\mathbf{s}^{\beta}{}_{\mathrm{tw}}$ 和$\mathbf{n}^{\beta}{}_{\mathrm{tw}}$ 分别是 N_{tw} 孪生系 β的剪切方向和剪切面法线的单位向量；而$\mathbf{s}^{\chi}{}_{\mathrm{tw}}$ 和$\mathbf{n}^{\chi}{}_{\mathrm{tr}}$ 分别是 N_{tr} 相变系 χ的剪切方向和剪切面法线的单位向量。奥罗万方程将滑移系 α 上的剪切速率表示为

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \rho_e b_{\mathrm{s}} \nu_0 \exp\left[-\frac{Q}{k_B T}\left\{1 - \left(\frac{\tau_{\mathrm{eff}}^{\alpha}}{\tau_{\mathrm{sol}}}\right)^{p}\right\}^{q}\right],$$

其中， b_{s} 是滑移伯格斯矢量的长度， ν_0 是参考速度， Q_{s} 是滑移活化能， k_B 是玻尔兹曼常数， T 是温度， τ_{eff} 是有效分解剪应力， τ_{sol} 是固溶强化强度，$0 < \rho \leqslant 1$ 而 $1 \leqslant q \leqslant 2$ 是控制滑移阻力曲线的拟合参数。Blum and Eisenlohr [64] 对位错密度的演化进行建模，尤其是单极位错密度的生成和位错偶极子的形成，分别表示为

$$\dot{\varrho} = \frac{|\dot{\gamma}|}{b_{\mathrm{s}}\Lambda} - \frac{2\hat{d}}{b_{\mathrm{s}}}\varrho|\dot{\gamma}|, \quad \dot{\varrho}_{\mathrm{di}} = \frac{2(\hat{d}-\check{d})}{b_{\mathrm{s}}}\varrho|\dot{\gamma}| - \frac{2\check{d}}{b_{\mathrm{s}}}\varrho_{\mathrm{di}}|\dot{\gamma}| - \varrho_{\mathrm{di}}\frac{4\nu_{\mathrm{cl}}}{\hat{d}-\check{d}},$$

其中，位错攀移速度为 $\nu_{\mathrm{cl}} = \dfrac{GD_0V_{\mathrm{cl}}}{\pi(1-\nu)k_{\mathrm{B}}T}\dfrac{1}{\hat{d}+\check{d}}\exp\left(-\dfrac{\mathcal{Q}_{\mathrm{cl}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$。应变硬化通过位错平均自由程来描述，其中平均自由程记为 Λ。 D_0 是自扩散系数的前因子， V_{cl} 是攀移活化体积， $\mathcal{Q}_{\mathrm{cl}}$ 是攀移活化能，$\hat{d} = \dfrac{3Gb_{\mathrm{s}}}{16\pi|\tau|}$ 是两个位错形成稳定偶极子时的滑移面间距阈值，$\check{d}$； $d = D_a b_{\mathrm{s}}$ 是两个位错自发湮灭时的距离阈值。滑移平均自由程建模为

$$\frac{1}{\Lambda_{\mathrm{s}}} = \frac{1}{D} + \frac{1}{\lambda_{\mathrm{s}}} + \frac{1}{\lambda_{\mathrm{tw}}} + \frac{1}{\lambda_{\mathrm{tr}}}$$

其中

$$\frac{1}{\lambda_{\mathrm{s}}^{\alpha}} = \frac{1}{i_{\mathrm{s}}}\left(\sum_{\alpha'=1}^{N_{\mathrm{s}}} p^{\alpha\alpha'}(\varrho^{\alpha'} + \varrho_{\mathrm{di}}^{\alpha'})\right)^{1/2}, \quad \frac{1}{\lambda_{\mathrm{tw}}^{\alpha}} = \sum_{\beta=1}^{N_{\mathrm{tw}}} h^{\alpha\beta}\frac{f_{\mathrm{tw}}^{\beta}}{t_{\mathrm{tw}}(1-f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}})}, \quad \frac{1}{\lambda_{\mathrm{tr}}^{\alpha}} = \sum_{\chi=1}^{N_{\mathrm{tr}}} h^{\alpha\chi}\frac{f_{\mathrm{tr}}^{\chi}}{t_{\mathrm{tr}}(1-f_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{tot}})},$$

其中， D 是平均晶粒尺寸， i_{s} 是拟合参数， t_{tw} 是平均孪晶厚度， t_{tr} 是平均 ε-马氏体厚度。孪生和相变的平均自由程分别计算如下

$$\frac{1}{\Lambda_{\mathrm{tw}}^{\beta}} = \frac{1}{i_{\mathrm{tw}}}\left(\frac{1}{D} + \sum_{\beta'=1}^{N_{\mathrm{tw}}} h^{\beta\beta'} f_{\mathrm{tw}}^{\beta'}\frac{1}{t_{\mathrm{tw}}(1-f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}})}\right), \quad \frac{1}{\Lambda_{\mathrm{tr}}^{\chi}} = \frac{1}{i_{\mathrm{tr}}}\left(\frac{1}{D} + \sum_{\chi'=1}^{N_{\mathrm{tr}}} h^{\chi\chi'} f_{\mathrm{tr}}^{\chi'}\frac{1}{t_{\mathrm{tr}}(1-f_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{tot}})}\right),$$

9 9 9i_{w} 和 i_{tr} 为拟合参数。孪晶和 ε-马氏体的形核速率为 $N = N_0 P_{\mathrm{ncs}} P$。 N_0 是单位时间内潜在孪晶或 ε-马氏体形核体的数密度。孪晶或 ε-马氏体晶核形成的概率建模为

$$P_{\mathrm{ncs}} = 1 - \exp\left[-\frac{V_{\mathrm{cs}}}{k_{\mathrm{B}}T}(\tau_{\mathrm{r}} - \tau)\right],$$

其中， V_{cs} 为交滑移活化体积。

由外加剪应力形成孪晶晶核所需的应力为

$$\hat{\tau}_{\mathrm{r}} = \frac{Gb_s}{2\pi(x_0 + x_{\mathrm{c}})} + \frac{Gb_{\mathrm{s}}\cos(\pi/3)}{2\pi x_0},$$

其中，面心立方金属中肖克利不全位错的平衡间距 x_0 计算如下

$$x_0 = \frac{G}{\Gamma_{\mathrm{sf}}}\frac{b_{\mathrm{s}}^2}{8\pi}\frac{2+\nu}{1-\nu},$$

其中， Γ_{sf} 为层错能， ν 为泊松比。

晶核弓出并形成孪晶或 ε-马氏体的概率 P 为

$$P_{\mathrm{tw}} = \exp\left[-\left(\frac{\hat{\tau}_{\mathrm{tw}}}{\tau}\right)^{p_{\mathrm{tw}}}\right], \quad P_{\mathrm{tr}} = \exp\left[-\left(\frac{\hat{\tau}_{\mathrm{tr}}}{\tau}\right)^{p_{\mathrm{tr}}}\right],$$

p_{tw} 和 p_{tr} 是拟合参数。孪晶和 ε马氏体生长的临界应力为

$$\hat{\tau}_{\mathrm{tw}} = \frac{\Gamma_{\mathrm{sf}}}{3b_{\mathrm{tw}}} + \frac{3Gb_{\mathrm{tw}}}{L_{\mathrm{tw}}}, \tag{21}$$

$$\hat{\tau}_{\mathrm{tr}} = \frac{2\sigma^{\gamma/\varepsilon}}{3b_{\mathrm{tr}}} + \frac{3Gb_{\mathrm{tr}}}{L_{\mathrm{tr}}} + \frac{h\Delta G^{\gamma\to\varepsilon}}{3b_{\mathrm{tr}}}, \tag{22}$$

其中， b_{tw} 和 b_{tr} 分别是孪生和相变的柏氏矢量大小， L_{tw} 和 L_{tr} 分别是相应形核体的宽度， $\sigma^{\gamma/\varepsilon}$ 是 $\gamma-$ 相与 $\varepsilon-$ 相之间的界面能， $\Delta G^{\gamma\to\varepsilon}$ 是从面心立方相到六方密堆积相每单位体积的吉布斯自由能变化。

孪晶和 ε-马氏体的体积分数演化遵循以下速率

$$\dot{f} = (1 - f_{\mathrm{tw}}^{\mathrm{tot}} - f_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{tot}})V\dot{N},$$

其中，其体积 V 假设为薄圆盘 $V = \frac{\pi}{4}\Gamma^2 t$。 β 孪晶系和 χ 相变系的剪切速率为

$$\dot{\gamma} = \gamma_{\mathrm{char}}\dot{f}.$$

我们注意到，基于位错密度的本构模型的描述已在 Roters等人 第 6.2.3 节中完整阐述 [37]。

4. 方法论

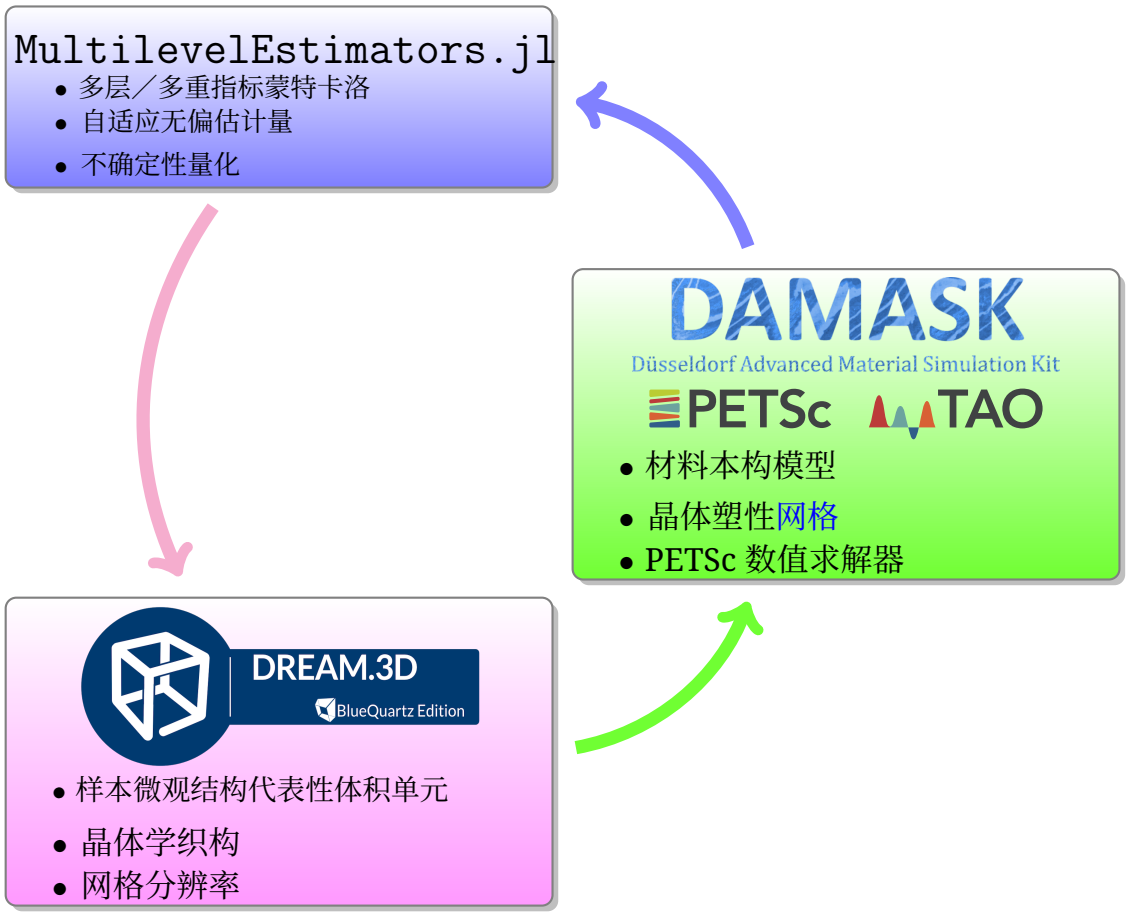


图 5：用于 CPFEM 的多保真度不确定性量化工作流程。在每次迭代中， `MultilevelEstimators.jl` 请求用户代码针对一个 *fixed* 随机样本（即一个固定的微观结构RVE实现）在不同保真度层级下进行评估。随后， `DREAM.3D`用于在多种网格分辨率下生成微结构代表性体积单元。 `DAMASK` 使用生成的微观结构几何结构，随后通过一种或多种本构模型与数值配置的组合评估关注量。

在本节中，我们介绍自动工作流，该工作流将 DREAM.3D [36], 这一用于生成所需微观结构的工具、DAMASK [65], 这一统一的多物理场晶体塑性有限元模拟软件包，以及 MultilevelEstimators.jl 这一不确定性量化软

件包结合起来；该软件包实现了第 2.5 节所述的自适应多指标多层蒙特卡洛方法。我们开发了 Python 脚本，用于将信息从 DREAM.3D 传递至 DAMASK，再从 DAMASK 传递至 MultilevelEstimators.jl。我们采用了 Diehl 等人 [65] 提出的 DREAM.3D 与 DAMASK 自动耦合工作流 [66]。整体不确定性量化工作流由 MultilevelEstimators.jl 控制。在每次迭代中，软件包都会请求用户代码针对特定指标 ℓ （在多层设置中）或特定元组 $\boldsymbol{\ell}$ （在多指标设置中）进行评估。该请求会发送至 DREAM.3D，以抽取一个独特的微结构代表性体积单元，随后将其从细网格分辨率逐级粗化至粗网格分辨率，从而生成多个近似同一微结构代表性体积单元的几何结构，如图1a至图1e所示。由于 DREAM.3D 目前不支持微结构重构的可重复性，因此必须保存生成的微观结构几何结构，以便计算多层或多指标差分。在多指标设置中，还需先选择合适的本构模型，然后调用 DAMASK 运行晶体塑性有限元模拟。通过后处理获得关注量，最终将其返回至 MultilevelEstimators.jl。算法持续迭代，直至满足用户指定的收敛准则。不确定性量化软件包支持并行评估用户代码，以便充分利用高性能计算系统上的计算资源。不过，在本研究中，我们将演示范围限定为顺序蒙特卡洛抽样。图5以示意图展示了这一耦合工作流，其中 MultilevelEstimators.jl 作为不确定性量化工具箱，DREAM.3D 作为微结构生成器，DAMASK 作为正向晶体塑性有限元软件包。需要指出的是，由于 DAMASK 基于 PETSc 构建（参见 [67, 68], ），因此还可将时间步长等其他数值参数作为保真度参数。

5. 案例研究 1： α-钛的多层蒙特卡洛

5.1. α-钛的晶体塑性有限元模型

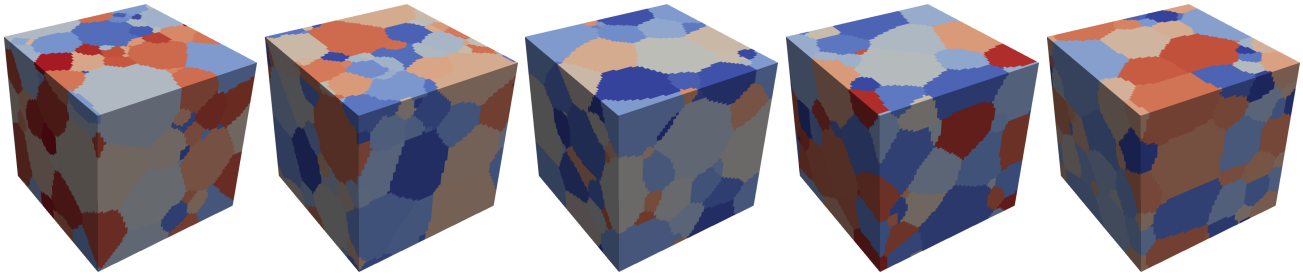
本节介绍第一个案例研究，采用多种网格分辨率下的多层蒙特卡洛和晶体塑性有限元法，研究的材料体系为六方密堆积 α-钛。唯象本构模型参数列于表1。该本构模型描述了位错滑移对α-钛塑性行为的贡献。晶粒尺寸服从对数正态分布，即:

$$p_D(d;\mu_D,\sigma_D) = \frac{1}{d\sigma_D\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln d - \mu_D)^2}{2\sigma_D^2}\right), \tag{23}$$

其中， μ_D 和 σ_D 分别为 4.0 和 1.2， d 的单位为 μm。 α-钛的晶体学织构如图 7 所示，其欧拉角为 $(\phi_1$、 θ、 $\phi_2) = (90$、0、 $0)$。在多种网格分辨率下，考虑尺寸为 $320\mu\mathrm{m}^3$ 的微结构代表性体积单元。施加单轴加载条件，加载时间为 $\dot{F}_{11} = 10^{-3}\mathrm{s}^{-1}$。图6展示了一个示例性微观结构集合，其中包含五个$\alpha$-钛微结构代表性体积单元，其晶粒尺寸和晶体学织构如前所述。本案例研究的关注量为有效屈服应力，通过将有效应变偏移 0.2% 来计算。对于 α-钛晶体塑性有限元法建模，读者可参阅先前关于基于位错密度的本构模型 [69], 、各向异性压痕响应 [70], 以及晶界对塑性变形的影响 [71]的研究。该本构模型未考虑孪生，因为纳米压痕实验 [70, 71], 中未观察到孪生；尽管后续关于电子背散射衍射和劳厄微衍射的实验研究 [72] 证实存在两种拉伸孪生模式 T1 $\{1012\}\langle 1011\rangle$ 和 T2$\{1121\}\langle 1126\rangle$，以及另外两种压缩孪生模式 C1 $\{1122\}\langle 1123\rangle$ 和 C2 $\{1011\}\langle 1012\rangle$。

5.2. 多层蒙特卡洛在 α-钛中的应用

通过改变微结构代表性体积单元的网格尺寸，构建低保真模型层级，示意见图1a 至图1e 。最粗糙的微结构代表性体积单元（层级 $\ell = 0$）采用 $8 \times 8 \times 8$ 网格构建。最精细的



(a) 钛代表性体积单元 1。 (b) 钛代表性体积单元 2。 (c) 钛代表性体积单元 3。 (d) 钛代表性体积单元 4。 (e) 钛代表性体积单元 5。

图6： 5 α-钛代表性体积单元的微观结构集合示意图。

表1：用于 α-钛的本案例研究 [70, 71]。

变量	描述	单位	参考值
c/a	晶格参数比	–	1.587
C_{11}	弹性常数	GPa	160.9
C_{12}	弹性常数	GPa	90.0
C_{13}	弹性常数	GPa	66.0
C_{33}	弹性常数	GPa	181.7
C_{44}	弹性常数	GPa	46.5
$\dot{\gamma}_0$	滑移参考剪切速率	s^{-1}	0.001
$\tau_{0,\mathrm{basal}\langle a\rangle}$	基面 $\langle a\rangle$ 滑移阻力	MPa	349.3
$\tau_{0,\mathrm{pris}\langle a\rangle}$	柱面 $\langle a\rangle$ 滑移阻力	MPa	568.6
$\tau_{0,\mathrm{pyr}\langle c+a\rangle}$	锥面 $\langle c+a\rangle$ 滑移阻力	MPa	1107.9
$\tau_{\infty,\ \mathrm{basal}\langle a\rangle}$	基面 $\langle a\rangle$ 饱和应力	MPa	568.6
$\tau_{\infty,\ \mathrm{pris}\langle a\rangle}$	柱面 $\langle a\rangle$ 饱和应力	MPa	1505.2
$\tau_{\infty,\ \mathrm{pyr}\langle c+a\rangle}$	锥面 $\langle c+a\rangle$ 饱和应力	MPa	3420.1
$h_0^{\mathrm{s-s}}$	滑移-滑移硬化参数	MPa	15
n_{s}	滑移应变率敏感参数	–	20
a	滑移硬化参数	–	2.0

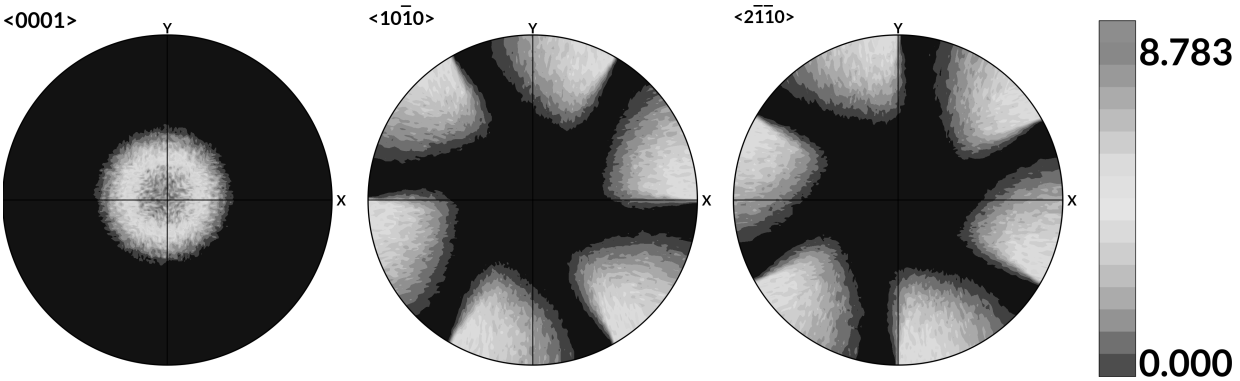


图 7： α-钛的微观结构晶体学织构，其中 $(\phi_1,\ \theta,\ \phi_2) = (90,\ 0,\ 0)$。

微观结构代表性体积单元（层级 $\ell = 4$）构建于 $64 \times 64 \times 64$ 网格上。中间层级的每个维度分别采用16（$\ell = 1$）、20 ($\ell = 2$)和32（$\ell = 3$）个体素。采用这些低保真模型后，随着层级参数 ℓ增大，每个样本的计算成本约翻一倍，见图8。这意味着模型层级满足条件（C3），其中 $\gamma \approx 1.38$。每个层级的自由度数量采用这种几何结构是一种自然选择，其灵感来自多重网格文献，并已在其他场景中提出，例如 [46]中的偏微分方程问题。

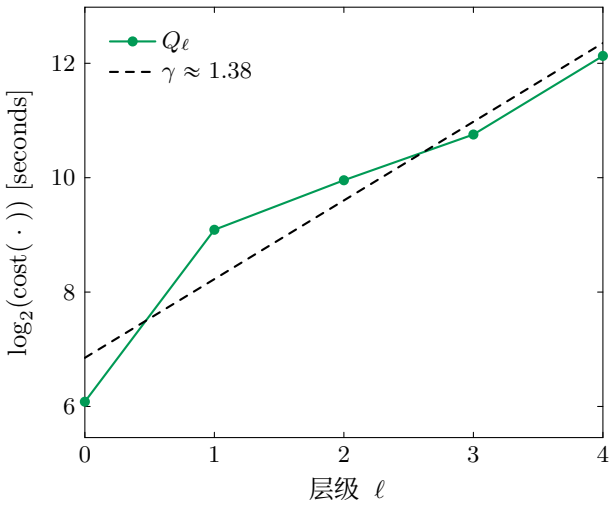


图8：采用网格细化作为多层蒙特卡洛实验中的保真度参数时，每个样本的平均计算成本（以秒为单位）随层级参数 ℓ 变化的情况。虚线表示对计算成本与 2^{γ}成正比的拟合，其中 $\gamma \approx 1.38$，见条件（C3）。

基于这一低保真模型层级结构，我们针对一系列逐渐减小的 RMSE 绝对容差开展了多层蒙特卡洛实验，容差依次为 $\varepsilon^{(k)} = \dfrac{\varepsilon^{(K)}}{f^{K-k}}$, $k = 1, 2, ..., K$，其中 $f = 1.3$, $K = 10$，目标绝对容差为 $\varepsilon^{(K)} = 5$。在图 9 中，我们绘制了不同目标容差 $\varepsilon^{(k)}$下各层级 $\ell = 0, 1, \ldots, 4$ 所需的模型评估次数。请注意，大多数模型评估都发生在较粗层级，因为这些层级的样本成本较低，而在较精细层级只需少量模型评估。例如，在最精细层级 $\ell = 4$ 且目标容差为 $\varepsilon^{(K)}$时，只需进行两次模型评估。请注意，对于层级 $\ell = 0, 1$ 和 2，需要至少 $N_\ell = 10$ 个样本。这些预热样本用于估计多层差值 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$的方差，因为它们出现在表达式（7）中，用于计算最优样本数 N_ℓ。在层级 $\ell = 3$ 和 $\ell = 4$，多层差值的方差通过线性外推进行估计，外推依据是先前层级上已有的 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$ 估计值。

在图 10 中，我们展示了多层差值 $\mathbb{E}[\Delta Q_\ell]$ 期望值的衰减，以及多层差值 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$方差的衰减。后者表示低保真模型作为关注量的控制变量时的效率。方差 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$衰减得越快，多层蒙特卡洛估计量的效率就越高。在本次实验中，我们通过数值拟合得到，$\mathbb{E}[\Delta Q_\ell] \propto 2^{-\alpha \ell}$ 与 $\alpha \approx 1.04$，以及 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell] \propto 2^{-\beta \ell}$与 $\beta \approx 2.89$。请注意，层级 $\ell = 4$ 处的 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$ 和 $\mathbb{E}[\Delta Q_\ell]$ 的数值仅根据两次模型评估提取，因此对多层差值的期望值和方差的预测值可能不准确。因此，速率 β 可能低估了实际值。无论如何，当 $2\alpha \geqslant \min(\beta, \gamma)$ 和 $\beta > \gamma$时，我们预计多层蒙特卡洛估计量的成本将按 $O(\varepsilon^{-2})$的规律变化，其中 ε 是对均方根误差施加的容差，即式（8）中最乐观的情形。这一点在图15中得到了证实：图中展示了多层蒙特卡洛估计量的成本（以墙钟时间，即秒为单位）随施加的容差 ε变化的情况。作为比较，我们也在图15中标出了等效单保真度蒙特卡洛模拟的成本。由于计算需求过高，我们并未实际执行这些模拟，而是依据高保真模拟的平均成本和关注量的估计方差，估算相应蒙特卡洛模拟的成本。

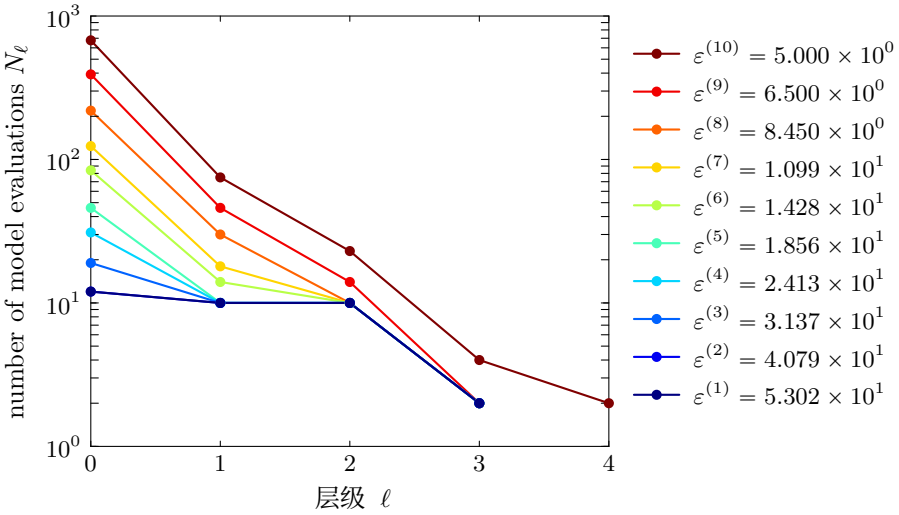
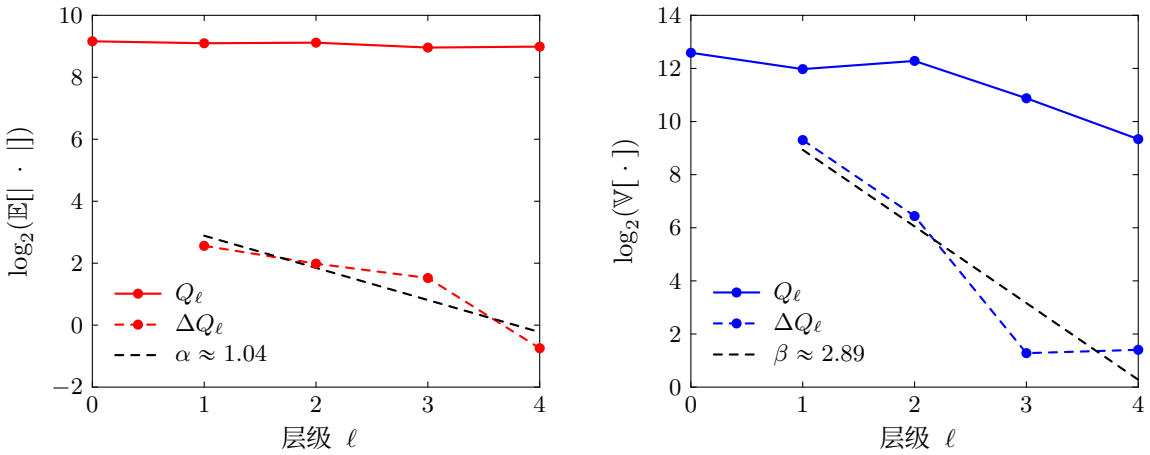


图 9：在多层蒙特卡洛实验中，为达到目标精度 $\varepsilon^{(k)}, k = 1, 2, \ldots\ldots, 10$，各层级 $\ell = 0, 1, \ldots\ldots, 4$ 所需的样本数 N_ℓ。在层级 $\ell = 0, 1$ 和 2 上，设定了最少预热样本数 $N_\ell = 10$，以获得多层差值 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell]$ 方差的初始估计。对于目标容差 $\varepsilon^{\text{target}} = \varepsilon^{(10)}$，只需对高保真模型进行两次评估。请注意，图中 $\varepsilon^{(1)}$ 和 $\varepsilon^{(2)}$ 的样本数 N_ℓ 重合。

但估算了相应蒙特卡洛模拟的成本，所用依据是高保真模拟的平均成本和关注量的估计方差。请注意，对于目标容差 $\varepsilon^{\text{target}} = 5$，多层蒙特卡洛模拟的速度约为等效蒙特卡洛模拟的12倍，因为计算成本从31天降至两天半。数值观测到的多层蒙特卡洛方法的成本复杂度率为 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$，在 $\varepsilon \to 0$的渐近情形下与预测一致。



使用网格细化作为保真度参数时，关注量 Q_ℓ 的期望值（*left*）和方差（*right*）以及多层差值 ΔQ_ℓ 随层级 ℓ 变化的情况。我们对数值 $\mathbb{E}[\Delta Q_\ell] \propto 2^{-\alpha\ell}$ 和 $\mathbb{V}[\Delta Q_\ell] \propto 2^{-\beta\ell}$ 分别进行了数值拟合，使用的是 $\alpha \approx 1.04$ 和 $\beta \approx 2.89$。

图 11 展示了不同层级的总成本随 ε MLMC 估计量的均方根误差容差变化的分布。当容差 ε 降低时，MLMC 估计量的成本增加，较大比例的成本花费在较粗层级上，而较细层级上的成本占比仅很小一部分。此处的总成本以在这些层级上花费的计算时间（单位：秒）来衡量。

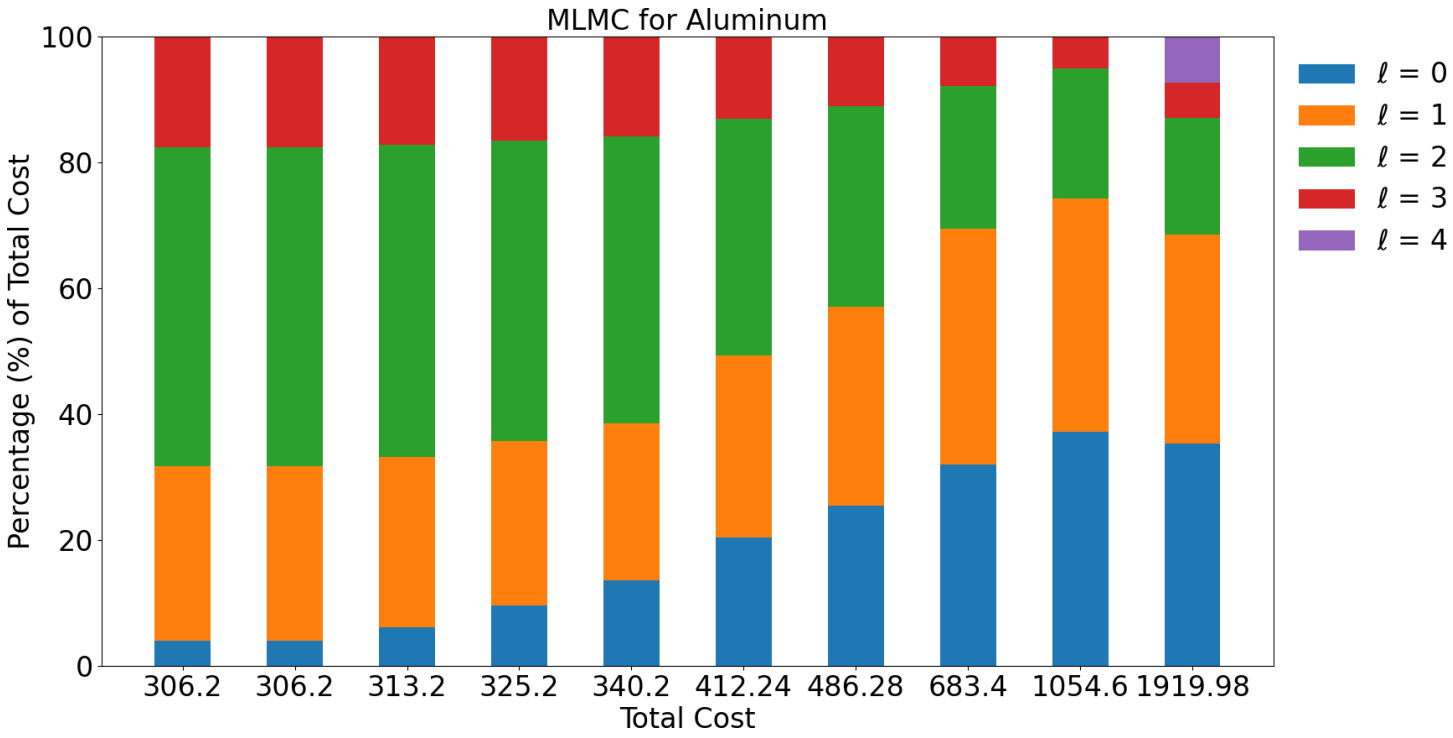


图 11：不同层级下总成本的分布。保真度层级对应于网格的离散化： 8^3 ($\ell = 0$),16^3 ($\ell = 1$), 20^3 ($\ell = 2$), 32^3 ($\ell = 3$), 64^3 ($\ell = 4$).

6. 案例研究2：铝的多指标蒙特卡洛

6.1. 铝的晶体塑性有限元模型

表2： 铝的唯象本构模型参数（参见 Roters 等人 [37]）。

变量	描述	单位	参考值
C_{11}	弹性常数	GPa	106.75
C_{12}	弹性常数	GPa	60.41
C_{44}	弹性常数	GPa	28.34
$\dot{\gamma}_0$	参考剪切速率	s^{-1}	0.001
τ_0	滑移阻力	MPa	31.0
τ_∞	饱和应力	MPa	63.0
h_0	滑移硬化参数	MPa	75
n	应变率敏感性参数	–	20
a	滑移硬化参数	–	2.25
$h^{\alpha\beta'}$	滑移-滑移相互作用矩阵分量	–	1.0 或 1.4

在该案例研究中，我们同时考虑具有多种网格分辨率和多种本构模型的 MIMC 案例研究。第一个指标 ℓ_1 of $\boldsymbol{\ell} = (\ell_1, \ell_2)$ 对应于网格分辨率指标，而第二个指标ℓ_2 分别对应于本构模型指标。唯象本构模型（即 $\ell_2 = 0$）被视为低保真度模型，而基于位错密度的模型（即 $\ell_2 = 1$）被视为高保真度本构模型。同样，在该案例研究中考虑了微结构代表性体积单元的多种网格分辨率，其变化范围为

表3：P　基于位错密度的铝本构模型参数（参见 Kords [48] 中的表7.1　）.

变量	描述	单位	参考值
C_{11}	弹性常数	GPa	106.75
C_{12}	弹性常数	GPa	60.41
C_{44}	弹性常数	GPa	28.34
μ	各向同性剪切模量	GPa	26.27
ν	泊松比		0.345
b	伯格斯矢量长度	nm	0.286
Ω	原子体积	nm^3	0.017
$\breve{d}_{\mathrm{e}}$	最小刃位错偶极子间距	nm	1.6
$\breve{d}_{\mathrm{s}}$	最小螺位错偶极子间距	nm	10
λ_0	位错增殖常数	–	60
k_1	刃型位错对增殖的贡献	–	0.1
ρ_0	初始总位错密度	m^{-2}	$6 \cdot 10^{10}$
D_{SD}	自扩散系数（在 $T = 300K$）	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$	$7 \cdot 10^{-29}$
Q_{S}	固溶体激活能	eV	1.25
c_{at}	固溶体浓度	–	$1.5 \cdot 10^{-6}$
d_{obst}	固溶体尺寸	nm	0.572
τ_{Peierls}	佩尔斯应力	MPa	0.1
w_{k}	双扭折宽度	nm	2.86
p	能垒轮廓常数	–	1.0
q	能垒轮廓常数	–	1.0
ν_α	攻击频率	GHz	50
η	位错黏度	Pa s	0.01
k_3	边缘扭折形成因子	–	1.0

8^3, 16^3, 20^3, 32^3, 以及 64^3, 其对应于 $\ell_1 = 0$，1、2、3、4，分别与第一个案例研究（第 5 节）类似。多保真层级的示意图如图 2所示。根据先前的研究 [37, 73, 74, 75], ，我们分别采用表2 和表3 中列出的模型参数，用于唯象本构模型和基于位错密度的本构模型。

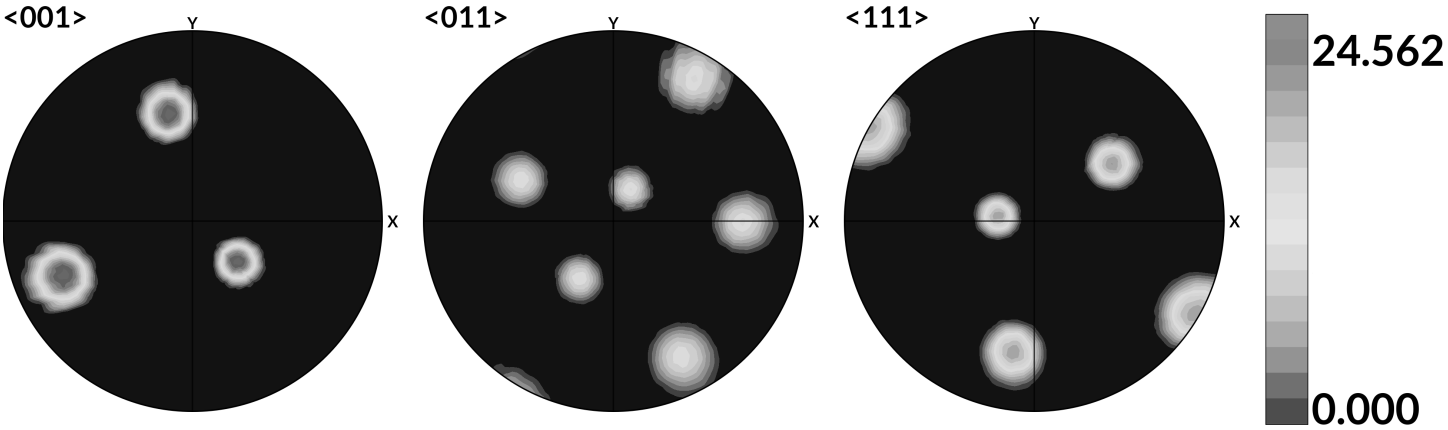
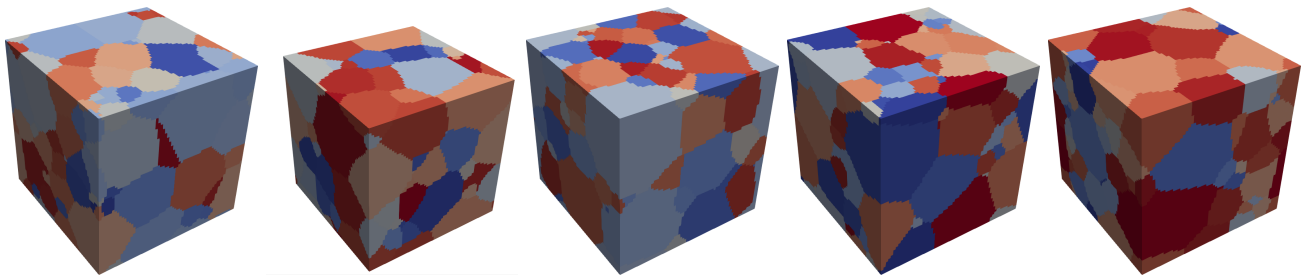


图 12：铝的微观结构晶体学织构，$(\phi_1,\ \theta,\ \phi_2) = (45,\ 35,\ 65)$。

.

晶粒尺寸按照公式（23）所示的对数正态分布进行描述，其中 $\mu_D = 4$ 以及 $\sigma_D = 1.2$。图 α-钛的晶体学织构如图 12 所示，其欧拉角为 $(\phi_1$、θ、$\phi_2) = (45$、35、$65)$。在多种网格分辨率下考虑 $320\mu\mathrm{m}^3$ 的微结构代表性体积单元：$64^3, 32^3, 20^3, 16^3, 8^3$。施加单轴加载条件，$\dot{F}_{11} = 10^{-3}\mathrm{s}^{-1}$。图13 展示了一个由五个铝微结构代表性体积单元组成的示例性微观结构集合，其具有上述晶粒尺寸和晶体学织构。在本案例研究中，关注量为有效屈服应力，通过将有效应变偏移 0.2% 进行计算。



(a) 铝代表性体积单元 1。 (b) 铝代表性体积单元 2。 (c) 铝代表性体积单元 3。 (d) 铝代表性体积单元 4。 (e) 铝代表性体积单元 5。

图 13：由五个铝代表性体积单元组成的微观结构集合示例。

6.2. 自适应多指标蒙特卡罗在铝中的应用

我们扩展了基于可变网格尺寸的低保真模型一维层级，加入了另一个基于唯象塑性的本构模型。因此，我们增加了一个可通过 第 2.4 节所述的多指标蒙特卡洛方法加以利用的细化或粗化维度。我们针对同一组逐渐减小的容差 $\varepsilon^{(k)}$、$k = 1$、2、.....、10，运行自适应多指标蒙特卡洛算法，并在每次运行时使用贪心自适应算法构建要纳入的指标集合。 图 14展示了自适应算法针对目标容差 $\varepsilon^{\mathrm{target}} = 5$所构建的低保真层级序列。请注意，高保真模型，即采用最大网格和基于位错的

本构模型、对应于 $\ell = 4$ 的模型，在 第 5.2 节的多层蒙特卡洛实验中始终未被启用。自适应算法构建的最终指标集合包含 6 个保真度各异的模型。

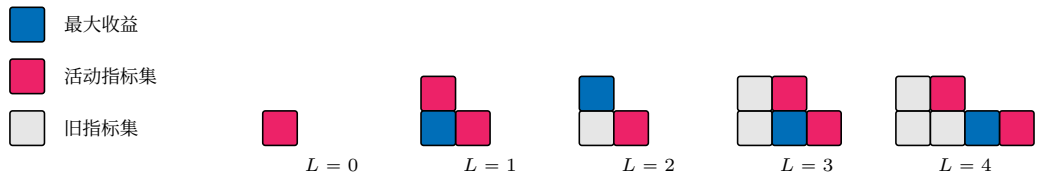


图14：自适应算法不同迭代过程中构建的指标集形状。左下角的指标对应于指标 $(0,\ 0)$，即最粗的网格尺寸和低保真度唯象模型。水平轴上的指标表示网格尺寸更小，而垂直方向上的指标表示本构模型发生变化（从唯象模型变为基于密度的模型）。请注意，高保真模型（即使用最大网格和基于位错的本构模型）从未被启用。

为考察自适应多指标蒙特卡洛算法在我们的晶体塑性有限元法应用中的性能，我们绘制了自适应构建的多指标蒙特卡洛估计量的成本（以墙钟时间（秒）表示）随施加的容差 ε 变化的曲线，见图15。请注意，当 ε 足够小时，自适应多指标蒙特卡洛方法能够以更短的时间达到所要求的容差 ε 。对于本实验中考虑的两个最大容差 $\varepsilon^{(1)}$ 和 $\varepsilon^{(2)}$ ，自适应多指标蒙特卡洛算法所需时间略长于多层蒙特卡洛方法；不过，对于这些容差，它仍比相应蒙特卡洛模拟的预测成本低得多。对于目标容差 $\varepsilon^{\text{target}} = 5$，自适应多指标蒙特卡洛模拟约比相应的多层蒙特卡洛模拟快2.7倍。与标准的单保真度蒙特卡洛模拟相比，总体加速比超过 $30\times$ 。请注意，计算工作量的这一优势主要体现在前置系数上，即自适应多指标蒙特卡洛方法的成本复杂度率仍为 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$。这与 [4]中报告的结果一致。

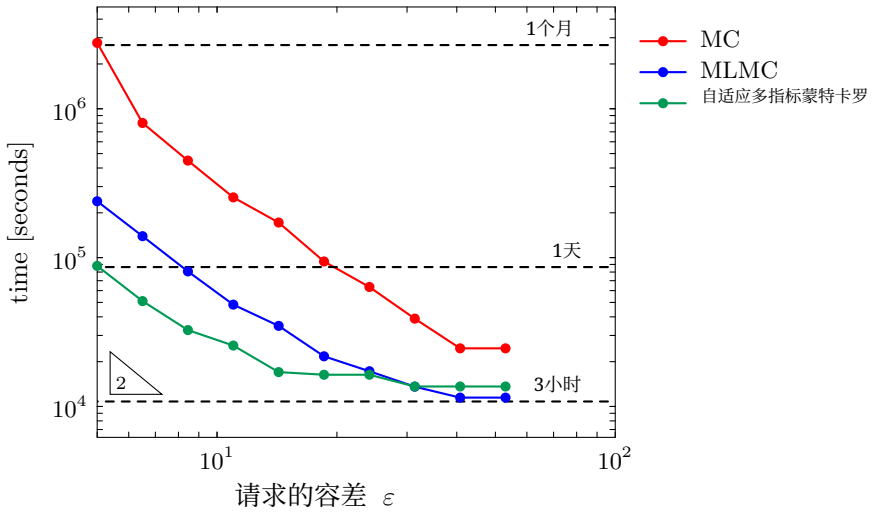


图15：AMIMC和多层蒙特卡洛方法的成本与单层蒙特卡洛方法的（估算）复杂度对比，以总模拟时间（秒）表示，并展示其随均方根误差（RMSE）容差 ε 的变化。对于目标 RMSE 容差 $\varepsilon = 5$，多层蒙特卡洛方法的速度约为蒙特卡洛方法的 11.6 倍，而自适应多指标多层蒙特卡洛方法的速度是多层蒙特卡洛方法的2.7倍，因此自适应多指标蒙特卡罗方法相较蒙特卡洛方法最终提速 $31.5\times$。

图 16 展示了不同指标上的总成本分布随容差变化的情况，容差针对的是 ε 多指标蒙特卡洛估计量的均方根误差。随着容差 ε 减小，多指标蒙特卡洛估计量的成本随之增加；成本中用于较粗指标的比例更大，而用于较细指标的比例则很小。此处的总成本以这些指标所耗费的计算时间（秒）衡量。

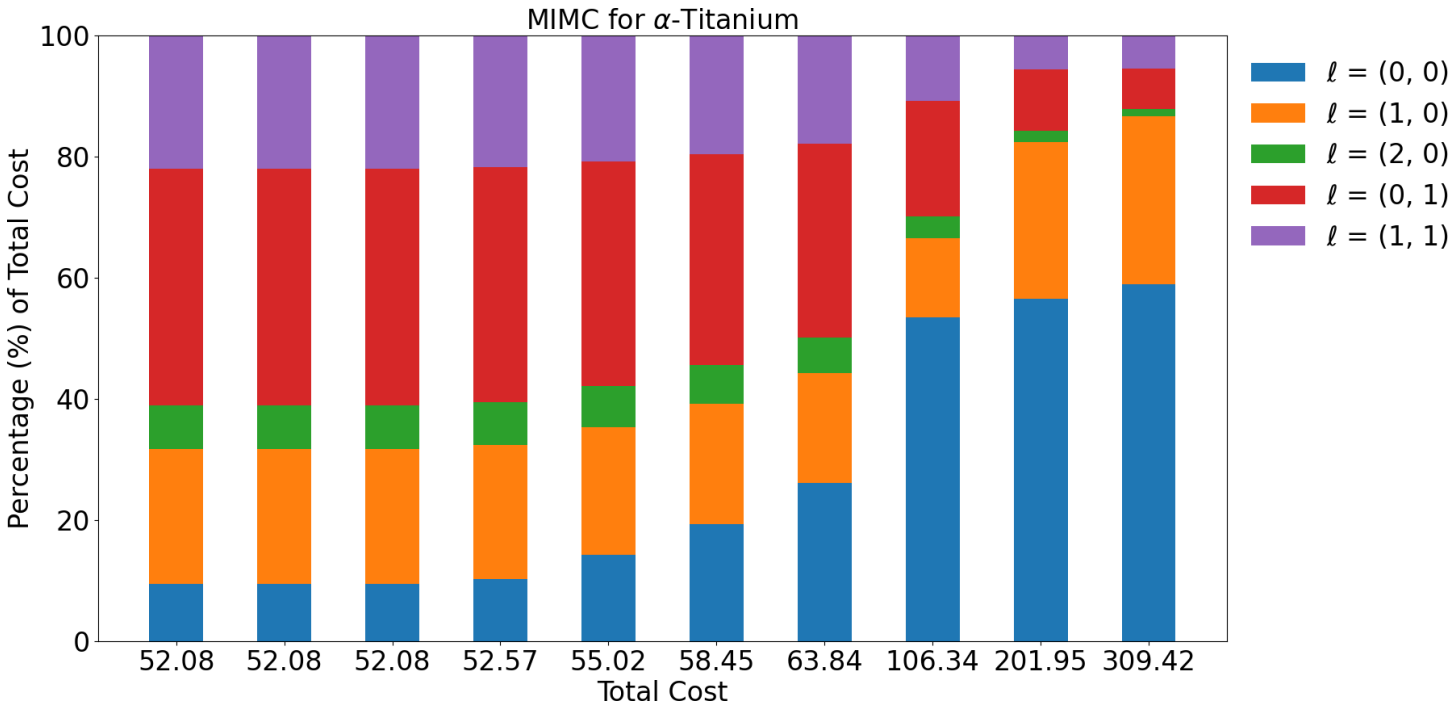


图16：不同指标下总成本的分布。保真度指标的第一个指标 ℓ_1 对应网格的离散化： 8^3 （$\ell_1 = 0$）、 16^3 （$\ell_1 = 1$）、 20^3 （$\ell_1 = 2$）、 32^3 （$\ell_1 = 3$）、 64^3 （$\ell_1 = 4$）。保真度指标的第二个指标 ℓ_2 对应本构模型：唯象模型（$\ell_2 = 0$）、基于位错密度的模型（$\ell_2 = 1$）。

7. 讨论

微观结构通常以像素化图像或体素化体积表示，具有高维特征，而且本质上带有噪声。微观结构内在的随机性，即偶然不确定性，以及其高维表示，使工艺-结构关系中的不确定性量化与结构-性能关系中的不确定性量化存在实际差异。在工艺-结构关系中，不确定性与（高维）输出相关；不确定性量化领域的文献提供了许多工具，可高效求解不确定性量化的正问题和逆问题。在结构-性能关系中，不确定性与（高维）输入相关，这实质上需要采用采样方法（例如，对微观结构集合进行蒙特卡罗估计）。可以说，解决具有随机输出的不确定性量化问题，比解决具有随机输入的问题拥有更多数学工具。简而言之，从概念上看，工艺-结构关系和结构-性能关系中的不确定性量化问题在数学性质上相同；但在实践中并非如此，因为微观结构具有高维特征且本质上是随机的。因此，与工艺-结构关系相比，结构-性能关系的计算复杂度更高。

与工艺-结构关系相比，结构-性能关系更容易受到不确定性的影响，因此通常需要采用不确定性量化框架来量化偶然不确定性和认知不确定性。在结构-性能关系中，偶然不确定性可理解为由微观结构引起的不确定性，而认知不确定性通常可归因于参数误差和模型形式误差。本文提出的框架专门用于量化结构-性能关系中的偶然不确定性问题。

对于偶然不确定性显著的某些应用，例如增材制造 [76, 77]或小尺度部件，可采用所提出的框架进一步加快不确定性量化流程。Jared 等人 [78] 指出，均匀化材料性质所涉及的偶然不确定性可能归因于这样一个事实：增材材料性能“会因零件

几何形状和工艺输入的变化而出现显著的局部变化，无论这些变化是受控的还是随机的”。本研究提出的框架可用于进一步加快增材制造零件的鉴定，从而改善材料性能。

疲劳应用与增材制造有着相同的论点：在疲劳寿命问题中，统计效应发挥着更为重要的作用。文献中反复指出了疲劳寿命的统计学概念 [79, 80]，其中，冈贝尔 [81, 82]，威布尔 [83, 84]，和（对数）正态分布 [83] 常用于对极值统计进行建模。近十年来，利用晶体塑性有限元法研究微观组织敏感性疲劳已受到关注，至今仍是一个活跃的研究领域，其中 David McDowell 及其合作者的研究尤为突出 [85, 86, 87, 88,89, 90, 91, 92]。

我们还应指出，UQ 在材料设计过程中发挥着关键作用，能够提高材料设计的可靠性。材料基因组计划（MGI）旨在通过革新材料设计方法，大幅加快材料设计进程。在 MGI 成立之前，材料设计主要基于实验和理论分析，通常需要 20 到 50 年才能完成。为大幅缩短这一耗费大量资源的流程 [93]，MGI 采用集成计算材料工程（ICME）方法，借助计算材料模型和模拟来设计材料；近年来，机器学习进一步增强了这一方法，使材料设计能够作为工艺-结构-性能关系中的一个逆问题来求解。由于微观结构会带来显著的变异性，因此通常希望采用能够在过程中考虑不确定性的稳健设计框架。MLMC 和 MIMC 是重要的数学不确定性量化工具，能够便捷地完成不确定性量化任务。不确定性量化与优化密不可分：将材料设计视为不确定性下的优化问题，便可通过限制材料的微观组织敏感行为来实现稳健的材料设计。

在本研究中，我们仅以多种网格分辨率和本构模型分别作为多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡洛的示例；不过，还可以采用许多其他参数。值得注意的示例包括底层数值积分器中的时间步长和数值积分器阶数（对于 DAMASK，本研究使用的底层数值求解器是 PETSc）、多种网格分辨率、多种本构模型，以及按 Blondeel 等人 [95] 所述，以 hp-公式表示的有限元公式中的单元类型（Feather 等人 [94]）。关于 DAMASK 中 hp细化的讨论，也可参见 Shanthraj 等人 [59]。

本文与基础版多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡洛一样，将关注量限制为一个。虽然当然可以扩展这些多层蒙特卡洛和多指标蒙特卡洛算法，以处理多个关注量，从而捕捉应力随应变的变化，但本文仅着重展示这些算法相较于晶体塑性有限元文献中仍在使用的经典蒙特卡罗算法的效率，并将进一步的潜在应用留待未来研究。

除 MLMC 和 MIMC 外，文献中还提出了许多其他方法，例如但不限于：多保真度蒙特卡洛（MFMC） [96, 97, 98]，、MFMC 的近似控制变量推广 [99]，、多重网格（准）蒙特卡洛 [100, 101]，以及多指标随机配置 [102, 103, 104]。值得注意的是，机器学习预测可以作为低保真度方法，具有较低的计算成本和相对较高的误差，正如我们此前的一项研究所示 [105]。值得一提的是，与网格分辨率相比，有时很难确定不同本构模型的保真度。然而，对于唯象模型和基于位错密度的模型，一般而言，基于位错密度的模型在预测均匀化行为方面更准确。

8. 结论

在本研究中，我们提出了一种通用的 MLMC 和 MIMC 方法，通过多保真度框架量化结构-性能关系中的不确定性。所提出的方法基于 MLMC 和 MIMC 的应用数学研究，将微结构代表性体积单元视为随机样本，并在该单元上采用不同保真度的网格分辨率、本构模型和数值求解器，以实现从材料微结构空间到材料性能空间的映射。我们通过两个案例研究展示了该方法。在第一个案例研究中，我们考虑多种网格分辨率，展示了 MLMC 的效率。在第二个案例研究中，我们同时考虑多种网格分辨率和多种本构模型，展示了 MIMC 的效率。在这两个案例中，关注量均为有效屈服应力。与采用微观结构集合方法的经典蒙特卡洛方法相比，在第一个案例研究中，MLMC 的加速因子为 $12\times$ ；在第二个案例研究中，MIMC 比 MLMC 加速 $2.7\times$ 倍，而 MLMC 相较于 MC 加速 $11.6\times$ 倍。我们得出结论，本文提出的多保真度不确定性量化方法能够显著降低计算成本，从而量化晶体塑性有限元法（CPFEM）中与微观结构变化相关的不确定性。

致谢

本文所表达的观点不一定代表美国能源部或美国政府的观点。桑迪亚国家实验室是一家多任务实验室，由桑迪亚国家技术与工程解决方案有限责任公司管理和运营。该公司是霍尼韦尔国际公司的全资子公司，负责为美国能源部国家核安全管理局提供服务，合同编号为 DE-NA-0003525。

参考文献

[1] A. Tran, T. Wildey, H. Lim，采用随机配置法对晶体塑性有限元本构模型进行微观结构敏感的不确定性量化，《Frontiers in Materials》9 (2022) 1–20。[2] M. B. Giles，多层蒙特卡洛方法，Acta Numerica 24 (2015) 259–328。[3] A.-L. Haji-Ali, F. Nobile, R. Tempone，多指标蒙特卡洛：稀疏性与采样的交汇，Numerische Mathematik 132 (4) (2016) 767–806。[4] P. Robbe, D. Nuyens, S. Vandewalle，应用于换热器模型的维度自适应多指标蒙特卡洛方法，载于：科学计算中的蒙特卡洛与拟蒙特卡洛方法国际会议，Springer，2016，第429–445页。[5] J. H. Panchal, S. R. Kalidindi, D. L. McDowell，集成计算材料工程中的关键计算建模问题，Computer-Aided Design 45 (1) (2013) 4–25。[6] D. L. McDowell，面向材料与产品协同设计的仿真辅助材料设计，JOM 59 (9) (2007) 21–25。[7] S. R. Kalidindi, A. J. Medford, D. L. McDowell，面向未来材料创新生态系统的数据与信息学愿景，JOM 68 (8) (2016) 2126–2137。

[8] P. Honarmandi, R. Arroyave，计算材料科学与仿真辅助材料设计中的不确定性量化与传播，Integrating Materials and Manufacturing Innovation (2020) 1–41。 J. J. Gabriel, N. H. Paulson, T. C. Duong, F. Tavazza, C. A. Becker, S. Chaudhuri, M. Stan，金属原子尺度建模中的不确定性量化及其对介观和连续体建模的影响：综述，JOM (2020) 1–15。[9] P. Acar，小尺度材料科学中不确定性量化的最新进展，Progress in Materials Science 117 (2021) 100723。[10] Z. Zhao, M. R. Ruiz, J. Lu, M. A. Monclus, J. M. Molina-Aldareguía, T. R. Bieler, P. Eisenlohr，量化六方钛合金中由纳米压痕测得的临界分解剪切应力值的不确定性，Experimental Mechanics (2022) 1–13。[11] H. Lim, C. C. Battaile, J. E. Bishop, J. W. Foulk III，研究晶体塑性有限元模拟中的网格敏感性与多晶代表性体积单元，《国际塑性学杂志》121 (2019) 101–115。 T. Park, H. Lim, B. Reedlunn, S. Kramer, E. Corona, F. Pourboghrat，非均质微观结构特征对塑性各向异性晶体塑性建模的影响，Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 29 (7) (2021) 075004。 A. Tran, T. Wildey，利用数据一致性反演和机器学习求解性能—结构关联的随机逆问题，JOM 73 (2020) 72–89。[12] S. Kotha, D. Ozturk, S. Ghosh，基于微观力学晶体塑性有限元模拟的参数化均质化本构模型（PHCM）：第一部分：钛合金的敏感性分析与参数识别，《国际塑性学杂志》120 (2019) 296–319。[13] S. Kotha, D. Ozturk, S. Ghosh，基于微观力学晶体塑性有限元模拟的参数化均质化本构模型（PHCM）：第二部分：经实验验证的钛合金热弹塑性模型，《国际塑性学杂志》120 (2019) 320–339。[14] S. Kotha, D. Ozturk, B. Smarslok, S. Ghosh，用于微观结构集成结构模拟的不确定性量化参数化均质化本构模型，Integrating Materials and Manufacturing Innovation 9 (4) (2020) 322–338。[15] S. Kotha, D. Ozturk, S. Ghosh，双相[16] /[17] 钛合金的不确定性量化参数化均质化本构模型（uq-phcms），npj Computational Materials 6 (1) (2020) 1–20。[18] D. Ozturk, S. Kotha, A. L. Pilchak, S. Ghosh，利用参数化均质化本构模型双向多尺度预测钛合金中的疲劳裂纹萌生，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 128 (2019) 181–207。 αD. Ozturk, S. Kotha, A. L. Pilchak, S. Ghosh，用于钛合金疲劳裂纹萌生多尺度预测的参数化均质化本构模型（PHCM），JOM 71 (8) (2019) 2657–2670。β G. Weber, M. Pinz, S. Ghosh，机器学习辅助的单晶镍基高温合金参数化均质化晶体塑性模型（PHCPM），JOM 72 (12) (2020) 4404–4419。

[22] K. Sedighiani, M. Diehl, K. Traka, F. Roters, J. Sietsma, D. Raabe，从宏观尺度应力–应变曲线中确定晶体塑性本构定律材料参数的一种高效稳健方法，《国际塑性学杂志》134 (2020) 102779.[23] K. Sedighiani, K. Traka, F. Roters, D. Raabe, J. Sietsma, M. Diehl，温度相关的基于位错密度的晶体塑性模型本构参数的确定与分析，《材料力学》164 (2022) 104117.[24] A. Tran, D. Liu, H. A. Tran, Y. Wang，量化Al-Cu凝固过程中的工艺-结构关系不确定性，Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 27 (6) (2019) 064005.[25] P. Acar, S. Srivastava, V. Sundararaghavan，利用线性求解器进行微观结构随机设计优化，《美国航空航天学会杂志》55 (9) (2017) 3161–3168.[26] P. Fernandez-Zelaia, V. R. Joseph, S. R. Kalidindi, S. N. Melkote，利用贝叶斯方法通过球形压痕估计力学性能，《材料与设计》147 (2018) 92–105.[27] A. E. Tallman, K. S. Stopka, L. P. Swiler, Y. Wang, S. R. Kalidindi, D. L. McDowell，高斯过程驱动的自适应采样，用于多晶α-Ti中织构效应的降阶建模，JOM 71 (8) (2019) 2646–2656.[28] A. E. Tallman, L. P. Swiler, Y. Wang, D. L. McDowell，基于晶体塑性的降阶模型中的不确定性传播，《计算力学与工程方法》365 (2020) 113009.[29] B. D. Ellis, D. L. McDowell，通过多尺度建模和归纳式设计探索方法（IDEM）实现面向特定应用的计算材料设计，Integrating Materials and Manufacturing Innovation 6 (1) (2017) 9–35.[30] D. L. McDowell, J. Panchal, H.-J. Choi, C. Seepersad, J. Allen, F. Mistree，多尺度、多功能材料与产品的集成设计，Butterworth-Heinemann, 2009.[31] H.-J. Choi, D. L. Mcdowell, J. K. Allen, F. Mistree，面向不确定性下层级系统设计的归纳式设计探索方法，《工程优化》40 (4) (2008) 287–307.[32] J. Zhang，高效不确定性量化与传播的现代蒙特卡洛方法：综述，《Wiley跨学科评论：计算统计学》(2020) e1539.[33] K. Chatterjee, M. P. Echlin, M. Kasemer, P. G. Callahan, T. M. Pollock, P. Dawson，利用实例化体积单元和晶体塑性预测Ti-6Al-4V的拉伸刚度与强度，《材料学报》157 (2018) 21–32.[34] P. Acar, V. Sundararaghavan，量化实测极图变异导致的微观结构特性不确定性，《材料学报》124 (2017) 100–108.[35] P. Acar, V. Sundararaghavan，量化实验变异导致的微观结构特性不确定性，《美国航空航天学会杂志》55 (8) (2017) 2824–2832.[36] M. A. Groeber, M. A. Jackson，DREAM.3D：用于三维微观结构分析的数字表征环境，Integrating Materials and Manufacturing Innovation 3 (1) (2014) 5.

[37] F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S. L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H.- O. Fabritius, 等，DAMASK——D¨usseldorf Advanced Material Simulation Kit，用于对从单晶到构件尺度的多物理场晶体塑性、热效应和损伤现象进行建模，《计算材料科学》158 (2019) 420–478.[38] N. H. Paulson, M. W. Priddy, D. L. McDowell, S. R. Kalidindi，基于二点统计的多晶微观结构降阶结构-性能关联，《材料学报》129 (2017) 428–438.[39] K. Teferra, L. Graham-Brady，一种基于随机场的方法，用于估计计算均匀化中表观性能的收敛性，《计算力学与工程方法》330 (2018) 253–270.[40] N. H. Paulson, M. W. Priddy, D. L. McDowell, S. R. Kalidindi，用于多晶微观结构高周疲劳性能排序的数据驱动降阶模型，《材料与设计》154 (2018) 170–183.[41] M. Groeber, S. Ghosh, M. D. Uchic, D. M. Dimiduk，三维多晶微观结构自动化分析与模拟框架。第1部分：统计表征，《材料学报》56 (6) (2008) 1257–1273.[42] M. Groeber, S. Ghosh, M. D. Uchic, D. M. Dimiduk，三维多晶微观结构自动化分析与模拟框架。第2部分：合成结构生成，《材料学报》56 (6) (2008) 1274–1287.[43] R. Bostanabad, Y. Zhang, X. Li, T. Kearney, L. C. Brinson, D. W. Apley, W. K. Liu, W. Chen，计算微观结构表征与重构：先进技术综述，Progress in Materials Science 95 (2018) 1–41.[44] S. Torquato，微观结构的统计描述，《材料研究年度评论》32 (1) (2002) 77–111.[45] C. Robert, G. Casella，蒙特卡罗统计方法，Springer Science & Business Media, 2013.[46] K. A. Cliffe, M. B. Giles, R. Scheichl, A. L. Teckentrup，多层蒙特卡洛方法及其在随机系数椭圆型偏微分方程中的应用，《科学计算与可视化》14 (1) (2011) 3–15.[47] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. Tjahjanto, T. R. Bieler, 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概述：理论、实验与应用，《材料学报》58 (4) (2010) 1152–1211.[48] C. Kords，位错输运在晶体塑性本构描述中的作用，博士论文，亚琛工业大学 (2013).[49] C. Reuber, P. Eisenlohr, F. Roters, D. Raabe，单晶镍压痕周围的位错密度分布：非局部晶体塑性有限元预测与实验的比较，《材料学报》71 (2014) 333–348.[50] T. Gerstner, M. Griebel，利用稀疏网格进行数值积分，《数值算法》18 (3-4) (1998) 209.[51] V. Barthelmann, E. Novak, K. Ritter，稀疏网格上的高维多项式插值，《计算数学进展》12 (4) (2000) 273–288.[52] H.-J. Bungartz, M. Griebel，稀疏网格，Acta Numerica 13 (2004) 147–269.

[53] N. Dyn，M. S. Floater，下集上的多元多项式插值，《逼近理论杂志》177（2014年）34–42。[54] N. Collier，A.-L. Haji-Ali，F. Nobile，E. Von Schwerin，R. Tempone，延拓多层蒙特卡罗算法，BIT数值数学55（2）（2015）399–432。[55] F. Y. Kuo，D. Nuyens，拟蒙特卡罗方法在具有随机扩散系数的椭圆型偏微分方程中的应用：分析与实现综述，《计算数学基础》16（6）（2016）1631–1696。[56] F. Roters，P. Eisenlohr，T. R. Bieler，D. Raabe，晶体塑性有限元方法：材料科学与工程，John Wiley & Sons，2011年。[57] P. Eisenlohr，M. Diehl，R. A. Lebensohn，F. Roters，有限应变下晶体弹黏塑性的谱方法解，《国际塑性学杂志》46（2013）37–53。[58] P. Shanthraj，P. Eisenlohr，M. Diehl，F. Roters，用于非均质材料晶体塑性模拟的数值稳健谱方法，《国际塑性学杂志》66（2015）31–45。[59] P. Shanthraj，M. Diehl，P. Eisenlohr，F. Roters，D. Raabe，C. Chen，K. Chawla，N. Chawla，W. Chen，Y. Kagawa，晶体塑性与多物理场模拟的谱求解器，《材料力学手册》，Springer，柏林（2019年）978–981。[60] M. B. Giles，多层蒙特卡罗路径模拟，《运筹学》56（3）（2008年）607–617。[61] A.-L. Haji-Ali，F. Nobile，E. von Schwerin，R. Tempone，多层蒙特卡罗采样器中网格层次结构的优化，《随机过程与偏微分方程》4（1）（2016）76–112。[62] J. W. Hutchinson，多晶材料蠕变的界限与自洽估计，《伦敦皇家学会会刊》A辑：数学与物理科学348（1652）（1976）101–127。[63] S. R. Kalidindi，将变形孪生纳入晶体塑性模型，《Journal of the Mechanics and Physics of Solids》46（2）（1998年）267–290。[64] W. Blum，P. Eisenlohr，蠕变的位错力学，《材料科学与工程》：A辑510（2009）7–13。[65] F. Roters，P. Eisenlohr，C. Kords，D. Tjahjanto，M. Diehl，D. Raabe，DAMASK：用于采用基于有限元或谱数值求解器研究晶体塑性的杜塞尔多夫高级材料模拟工具包，IUTAM会议论文集3（2012）3–10。¨M. Diehl，M. Groeber，C. Haase，D. A. Molodov，F. Roters，D. Raabe，通过DREAM.3D代表性体积单元和DAMASK晶体塑性模拟识别结构–性能关系：一种集成计算材料工程方法，《JOM》69（5）（2017）848–855。[66] S. Abhyankar，J. Brown，E. M. Constantinescu，D. Ghosh，B. F. Smith，H. Zhang，PETSc/TS：现代可扩展常微分方程/微分代数方程求解器库，arXiv预印本arXiv:1806.01437（2018年）。[67] S. Balay，S. Abhyankar，M. Adams，J. Brown，P. Brune，K. Buschelman，L. Dalcin，A. Dener，V. Eijkhout，W. Gropp，等，PETSc用户手册（2019年）。

[69] A. Alankar，P. Eisenlohr，D. Raabe，适用于 α钛柱面滑移的基于位错密度的晶体塑性本构模型，《材料学报》59（18）（2011年）7003–7009。[70] C. Zambaldi，Y. Yang，T. R. Bieler，D. Raabe，取向信息纳米压痕：通过柱面滑移变形的六方金属 α钛中的压痕堆积，《材料研究杂志》27（1）（2012）356–367。[71] Y. Su，C. Zambaldi，D. Mercier，P. Eisenlohr，T. R. Bieler，M. A. Crimp，利用纳米压痕和晶体塑性建模量化 α 钛晶界附近的变形过程，《国际塑性学杂志》86（2016）170–186。[72] L. Wang，R. Barabash，T. Bieler，W. Liu，P. Eisenlohr，通过电子背散射衍射和劳厄微衍射研究 {1121} 孪生在 α钛中的行为，《冶金与材料学报A辑》44（8）（2013）3664–3674。[73] M. Wicke，A. Brueckner-Foit，多晶铝合金中的混合模式裂纹尖端场，载于：MATEC会议网络，第300卷，EDP Sciences，2019年，第11004页。[74] F. Han，M. Diehl，F. Roters，D. Raabe，利用基于谱方法的代表性体积单元晶体塑性模拟预测大规模成形模拟过程中的屈服面演化，《材料加工技术杂志》277（2020）116449。[75] Z. Zhao，M. Ramesh，D. Raabe，A. Cuitino，R. Radovitzky，铝低晶粒数多晶体晶粒尺度塑性表面变形三维特征的研究，《国际塑性学杂志》24（12）（2008年）2278–2297。[76] B. L. Boyce，B. C. Salzbrenner，¯J. M. Rodelas，L. P. Swiler，J. D. Madison，B. H. Jared，Y.-L. Shen，极值统计揭示增材制造中罕见的失效关键缺陷，《先进工程材料》19（8）（2017）1700102。[77] R. A. Roach，N. Argibay，K. Allen，D. K. Balch，L. L. Beghini，J. E. Bishop，B. Boyce，J. A. Brown，R. L. Burchard，M. E. Chandross，等，Born合格认证重大挑战实验室指导研发计划最终报告，技术报告，桑迪亚国家实验室（SNL-NM），阿尔伯克基，新墨西哥州（美国）（2018年）。[78] B. H. Jared，M. A. Aguilo，L. L. Beghini，B. L. Boyce，B. W. Clark，A. Cook，B. J. Kaehr，J. Robbins，增材制造：迈向整体设计，《材料学文献》135（2017）141–147。[79] J. Schijve，统计分布函数与结构疲劳，《国际疲劳学杂志》27（9）（2005）1031–1039。[80] A. Pineau，D. L. McDowell，E. P. Busso，S. D. Antolovich，金属失效II：疲劳，《材料学报》107（2016）484–507。[81] E. J. Gumbel，极值统计学，载于：《极值统计学》，哥伦比亚大学出版社，1958年。[82] E. Gumbel，疲劳寿命分布中的参数，《工程力学分部杂志》89（5）（1963）45–64。[83] J. Schijve，疲劳寿命应服从正态分布还是威布尔分布，《工程材料与结构的疲劳和断裂》16（8）（1993）851–859。

[84] R. Sakin, I. Ay，使用威布尔分布对玻璃纤维增强聚酯复合材料弯曲疲劳寿命数据进行统计分析，《材料与设计》29 (6) (2008年) 1170–1181。[85] C. P. Przybyla, D. L. McDowell，镍基高温合金 IN100 高周疲劳的微观组织敏感极值概率，《国际塑性学杂志》26 (3) (2010年) 372–394。[86] C. P. Przybyla, D. L. McDowell，双相 Ti–6Al–4V 高周疲劳的微观组织敏感极值概率模拟，《国际塑性学杂志》27 (12) (2011年) 1871–1895。[87] C. Przybyla, D. McDowell，双相 Ti–6Al–4V 表面与亚表面裂纹形成的微观组织敏感高周疲劳极值概率，《材料学报》60 (1) (2012) 293–305。[88] K. S. Stopka, T. Gu, D. L. McDowell，算法模拟参数对双相 Ti-6Al-4V 极值疲劳指标参数预测的影响，《国际疲劳学杂志》141 (2020) 105865。[89] T. Gu, K. S. Stopka, C. Xu, D. L. McDowell，使用极值理论预测双相 Ti–6Al–4V 的最大疲劳指标参数，《材料学报》188 (2020) 504–516。[90] A. Muth, R. John, A. Pilchak, S. R. Kalidindi, D. L. McDowell，使用极值统计分析高周疲劳阶段 Ti-6Al-4V 微观结构的疲劳指标参数，《国际疲劳学杂志》145 (2021) 106096。[91] A. Muth, R. John, A. Pilchak, S. R. Kalidindi, D. L. McDowell，使用极值统计分析疲劳过渡阶段 Ti-6Al-4V 微观结构的疲劳指标参数，《国际疲劳学杂志》153 (2021) 106441。[92] K. S. Stopka, M. Yaghoobi, J. E. Allison, D. L. McDowell，样本量和晶粒邻域对极值疲劳响应建模影响的模拟研究，《材料学报》224 (2022) 117524。[93] R. Arr´oyave, D. L. McDowell，材料设计的系统方法：过去、现在与未来，《材料研究年度评论》49 (1) (2019年) 103–126。[94] W. G. Feather, H. Lim, M. Knezevic，显式晶粒结构晶体塑性有限元建模中单元类型和网格分辨率的数值研究，《计算力学》67 (1) (2021) 33–55。[95] P. Blondeel, P. Robbe, G. Lombaert, S. Vandewalle 等，结构工程不确定性量化的 h-与 p-细化多层蒙特卡洛方法，arXiv 预印本 arXiv:1906.11077 (2019年)。[96] B. Peherstorfer, K. Willcox, M. Gunzburger，多保真度蒙特卡洛估计的最优模型管理，《SIAM科学计算杂志》38 (5) (2016) A3163–A3194。[97] E. Qian, B. Peherstorfer, D. O'Malley, V. V. Vesselinov, K. Willcox，方差和敏感性指数的多保真度蒙特卡洛估计，《SIAM/ASA不确定性量化杂志》6 (2) (2018年) 683–706。[98] B. Peherstorfer，使用自适应低保真度模型进行多保真度蒙特卡洛估计，《SIAM/ASA不确定性量化杂志》7 (2) (2019年) 579–603。[99] A. A. Gorodetsky, G. Geraci, M. S. Eldred, J. D. Jakeman，多保真度不确定性量化的广义近似控制变量框架，《计算物理学杂志》408 (2020) 109257。

[100] P. Robbe, D. Nuyens, S. Vandewalle，在多重网格多层（准）蒙特卡洛方法中重复利用样本，《SIAM科学计算杂志》41 (5) (2019年) S37–S60。[101] P. Robbe, D. Nuyens, S. Vandewalle，通过多重半粗化多重网格增强各向异性扩散问题的多指标蒙特卡洛方法，《数值线性代数及其应用》28 (3) (2021) e2281。[102] A.-L. Haji-Ali, F. Nobile, L. Tamellini, R. Tempone，随机偏微分方程的多指标随机配置，《计算力学与工程方法》306 (2016) 95–122。[103] A.-L. Haji-Ali, F. Nobile, L. Tamellini, R. Tempone，具有参数正则性的随机偏微分方程多指标随机配置收敛率，计算数学基础16 (6) (2016) 1555–1605。[104] J. D. Jakeman, M. S. Eldred, G. Geraci, A. Gorodetsky，用于不确定性量化和敏感性分析的自适应多指标配置，《国际工程数值方法杂志》121 (6) (2020) 1314–1343。[105] A. Tran, J. Tranchida, T. Wildey, A. P. Thompson，面向材料设计的多保真度机器学习：结合不确定性量化与贝叶斯优化——三元随机合金的应用，化学物理学杂志153 (2020) 074705。