# 基于等效夹杂法的数值随机均匀化方差缩减策略

S´ebastien Brisard[a,*], Micha¨el Bertin[a,b,c], Fr´ed´eric Legoll[a,c]

[a]*Navier*，巴黎高科路桥学院，古斯塔夫·埃菲尔大学，法国国家科学研究中心，马恩-拉-瓦莱，法国[b]*CERMICS*，巴黎高科路桥学院，马恩-拉-瓦莱，法国[c]
*MATHERIALS* 项目团队，法国国家信息与自动化研究院，巴黎，法国

arXiv:2304.00011v1 [cs.CE] 29 Mar 2023

**摘要**

我们采用等效夹杂法（这一方法与Hashin-Shtrikman变分原理密切相关）作为替代模型，为由嵌入均匀基体中的“夹杂”（或更确切地说，非均匀体）构成的随机复合材料的数值均匀化提出一种方差缩减策略。我们在线性二维电导问题框架下验证了该策略的有效性。即使在对比度较高时，与全场模拟相比，该策略也能显著降低计算成本。我们还表明，该策略可用于研究微观结构参数对宏观响应的影响。该策略可直接扩展至三维问题和线弹性问题。我们还关注替代模型的计算成本。特别是，我们提出了一种低成本近似方法，用于近似所谓的影响张量（用于计算替代模型）。

关键词： 均匀化、全场模拟、电导率、方差缩减、替代模型

## 1. 引言

大多数天然材料和人造材料都是非均质的，因此，对其有效性质的预测必须通过适当的尺度上推策略，考虑这种小尺度非均质性。当经典的平均场/有效场技术（例如Hashin-Shtrikman界、Mori–Tanaka 界、自洽方案）无法提供足够准确的预测时，就必须进行成本高昂的全场数值模拟。这些模拟在特定的局部本构定律下，计算所谓的校正问题 在一个“基本单元”（将在下文定义）中的解。基本单元承受一个基本宏观载荷，以确保 Hill–Mandel 引理成立。

基本单元的范围取决于非均质体的几何结构。对于周期均匀化，基本单元定义明确，并对应于单位单元（Allaire，2002，第1章）、（Bensoussan等人，1978；Milton，2002；Sanchez-Palencia，1980；Sanchez-Hubert和Sanchez-Palencia，1992）。对于随机均匀化（本文的主题），基本单元应是随机材料的无限实现（Jikov等人，1994；Milton，2002），这当然不具备实际可操作性。因此，计算是在随机材料的一个尺寸较大但有限的实现上进行的，本文遵循Ostoja-Starzewski（2006）的做法，将其称为统计体积单元（SVE）。在统计体积单元上求解校正问题可得到表观性质。在统计体积单元（SVEs）的尺寸渐近增大极限下，表观性质收敛于真实的有效（均匀化）性质。

如此定义的表观性质表现为随尺寸变化的随机变量。上述工作流程会引入两类误差：*(i)* 确定性偏差（与统计体积单元的有限尺寸有关：统计体积单元中所有可能微观结构对应的表观性质的平均值不同于精确的有效均匀化性质）以及；随机误差；（与实现本身有关：统计体积单元中的微观结构具有随机性，因此其相应的表观性质也是随机的）。鉴于数值实践中绝大多数情况下都是如此，本文考虑在统计体积单元中求解校正问题，并辅以周期边界条件。作出这一选择，是基于统计体积单元尺寸增大时系统误差（即确定性偏差）会减小这一考量。数值研究已观察到这一现象（例如参见Kanit 等人 (2003年)），某些情况下也已从理论上证明这一点（参见Nolen (2014年)，以及 A. Gloria、F. Otto 和其合作者在Gloria 和 Otto (2011年)开启的研究）：统计误差随统计体积单元尺寸增大而衰减的速度比系统误差慢。因此，对于较大的统计体积单元，统计误差会成为主导误差。下文将重点讨论如何降低统计误差，并介绍一种更高效地计算平均表观性质的方法。

估计平均表观性质自然需要采用蒙特卡罗方法，而众所周知，该方法收敛缓慢。事实上，中心极限定理给出的置信区间估计按 $M^{-1/2}$ 缩放，其中 $M$ 是实现样本的数量（在本例中即全场模拟的数量

*通讯作者。电子邮箱： sebastien.brisard@univ-eiffel.fr（S´ebastien Brisard）、 frederic.legoll@enpc.fr （Fr´ed´eric Legoll）

）。换言之，要将置信区间的幅度缩小 10 倍，就需要将实现样本的数量增加到 100 倍。这会导致模拟成本高昂。

注意到置信区间的幅度也与所考虑随机变量的标准差成正比，方差缩减技术旨在通过控制该标准差，而非样本量，来改进对统计误差的估计。文献中已经提出了许多此类方法（对偶变量、控制变量、重要性抽样、基于分层的方法等），适用于使用蒙特卡罗方法的各种场景（关于这些方法的综述，请参阅 Fishman (1996）。我们在此指出，针对数值随机均匀化的当前背景，对于线性问题以及某些非线性问题，我们已经在 Blanc et al. (2012b); Costaouecet al. (2010); Blanc et al. (2012a);Le Bris et al. (2016); Legolland Minvielle (2015a,b) 中调整了其中一些方法（另请参阅综述文章Blanc et al.(2016);LeBris andLegoll (2017））。

本文聚焦于一类控制变量方法，这类方法基于使用所谓的替代模型。这一新的随机变量应与感兴趣的随机变量高度相关，且其期望值应已知（或者，替代模型的计算成本应足够低，从而能够非常准确地通过蒙特卡罗方法估计其期望值）。随后，对感兴趣的随机变量与替代模型的线性组合运用蒙特卡罗方法，并选择线性组合的系数，使其标准差小于感兴趣的随机变量的标准差。

在电导率线性理论框架下，本文提出一种基于控制变量的方差缩减策略，用于确定嵌入均匀基体中的一组圆形夹杂物的有效电导率。本文不考虑尺寸效应；如前所述，这是一个独立的问题。因此，我们采用固定尺寸 统计体积单元，并着重确定表观电导率的平均值。

我们采用等效夹杂法（EIM），以低廉的计算成本估算表观电导率。EIM 最初由Moschovidis 和 Mura (1975) 在线弹性框架下提出。该方法将校正问题表述为一个积分方程，即 Lippmann–Schwinger 方程（Korringa，1973；Zeller 和 Dederichs，1973；Kr¨oner，1974）。正如 Moschovidis 和 Mura(1975) 所提出的，EIM 寻求 Lippmann–Schwinger 方程的近似解，使其在每个夹杂内部保持常数。自这项开创性工作以来，人们提出了多种推导 EIM 方程的策略（大多采用配点法）。遵循Brisard 等 (2014年) 的做法，我们在此采用周期设置下的 Galerkin方法。

随后，表观电导率的 EIM估计值作为替代模型，与采用有限元法（有限元法）进行的全场模拟结合使用。我们表明，即使在基体与夹杂物之间对比度极大的困难情况下，该替代模型也确实能有效缩小置信区间的幅度。

物。为了使替代模型同时具备成本效益，本文提出了一种对所谓影响张量的低成本近似。该近似为Zecevic 和 Lebensohn（2021）的近期研究提供了新的见解；他们也考虑了类似的近似。

这里我们强调 EIM 丰富的力学内涵。EIM 是一种与我们的应用——均匀介质中夹杂物随机组装体的均匀化——十分契合的替代模型。我们还强调 EIM、Hashin-Shtrikman 变分原理与 Hashin-Shtrikman界之间的紧密联系。第3.2.2节将进一步讨论这种联系。

本文组织如下。第2节简要回顾基于替代模型（又称控制变量技术）的方差缩减技术。第3节概述等效夹杂法，尤其是其变分形式。第4 节介绍我们的方差缩减策略，并强调 EIM 的一些具体特点。第5 节通过二维情形下的数值实验展示所提策略的效率。最后，我们在第5节总结相关结论。6

请注意，复现第5 节及附录F 所呈现结果所需的全部数据，均可在RechercheData Gouv 开放数据存储库中获取（Brisard 等，2023a，b）。

## 2. 基于替代模型的方差缩减

本节简要概述控制变量方差缩减技术。我们的目标是计算标量随机变量 $X(\omega)$ 的系综平均 $\mathbb{E}(X)$ 的数值估计。为此，蒙特卡洛方法通过抽取 $X(\omega)$ 的 $M$ 个独立实现样本，记为 $X_1(\omega), .., X_M(\omega)$，并计算其经验平均值

$$\mu_M(X) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega).$$

大数定律表明，当 $M \to +\infty$ 时，经验平均 $\mu_M(X)$ 会收敛于精确的系综平均$\mathbb{E}(X)$。经验平均 $\mu_M(X)$ 是无偏的，即对于任意 $M$，其期望值等于 $\mathbb{E}(X)$。因此，$\mu_M(X)$ 与 $\mathbb{E}(X)$ 之间的唯一误差是统计误差，其可通过中心极限定理进行估计：

$$\lim_{M\to+\infty} \Pr\left[\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega) - \mathbb{E}(X) \le \alpha\,\frac{\sigma_X}{M^{1/2}}\right] = \Phi(\alpha),$$

其中，$\Phi$ 是标准正态累积分布函数，$\sigma_X^2$ 是$X$ 的方差（$\sigma_X$ 是所谓的$X$的标准差）。因此，统计误差按 $\alpha\,\sigma_X\,M^{-1/2}$ 的比例缩放。例如，对于99% 置信区间，$\alpha = 2.6$：以99%的概率，期望值 $\mathbb{E}(X)$属于区间

$$\left[\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega) - 2.6\frac{\sigma_X}{M^{1/2}}, \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega) + 2.6\frac{\sigma_X}{M^{1/2}}\right].$$

正如预期的那样，增加$M$样本的数量会降低统计误差，尽管其速率较慢，为$M^{-1/2}$。

如上所述，文献中提出了几种方差缩减策略，旨在提供一种比上述蒙特卡罗方法更高效的方案。控制变量法（例如参见Fishman，1996，第277页）便是其中之一。该方法基于这样一个观察：通过对$X$本身的方差进行操作，可以降低统计误差。具体来说，考虑第二个随机变量$Y(\omega)$，下文称其为替代模型。一个关键假设是，$\mathbb{E}(Y)$的系综平均值是已知的。接下来，我们考虑新的随机变量

$$Z(\omega) = X(\omega) - \xi\,[Y(\omega) - \mathbb{E}(Y)],$$

其中$\xi$是一个自由（确定性）参数。由于$Z$和$X$的系综平均值相同，因此我们只需计算$Z$的系综平均值。为此，我们再次计算经验平均值

$$\mu_M(Z) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} Z_m(\omega),$$

其中，实现样本$Z_m(\omega)$由$Z_m(\omega) = X_m(\omega) - \xi\,[Y_m(\omega) - \mathbb{E}(Y)]$给出。利用$\mathbb{E}(Z) = \mathbb{E}(X)$，中心极限定理给出

$$\lim_{M\to+\infty} \Pr\left[\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} Z_m(\omega) - \mathbb{E}(X) \le \alpha\,\frac{\sigma_Z}{M^{1/2}}\right] = \Phi(\alpha).$$

请注意，现在精度由随机变量$\sigma_Z$ $Z$的标准差控制。$Z$的方差为

$$\mathrm{var}(Z) = \mathrm{var}(X) - 2\,\xi\,\mathrm{cov}(X,Y) + \xi^2\,\mathrm{var}(Y),$$

其中，$\mathrm{cov}(X,Y) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}(X))\,(Y - \mathbb{E}(Y))]$表示$X$和$Y$的协方差。因此，任何使$\xi$ $\xi^2\,\mathrm{var}(Y) - 2\,\xi\,\mathrm{cov}(X,Y) \le 0$的选择，都能有效降低对$\mathbb{E}(X)$进行数值估计时的统计误差。$\xi^\star$的最优选择$\xi$是使$\mathrm{var}(Z)$最小的选择：

$$\xi^\star = \frac{\mathrm{cov}(X,Y)}{\mathrm{var}(Y)}. \tag{1}$$

$Z$的最优方差为

$$\mathrm{var}(Z^\star) = [1 - \mathrm{corr}(X,Y)^2]\,\mathrm{var}(X),$$

其中，$\mathrm{corr}(X,Y) = \mathrm{cov}(X,Y)\,[\mathrm{var}(X)\,\mathrm{var}(Y)]^{-1/2}$表示$X$和$Y$的相关性（根据构造，$|\mathrm{corr}(X,Y)| \le 1$）。上式表明，如果$X$和$Y$高度相关，那么$Z^\star$的方差（因此，其系综平均数值估计的统计误差）远小于$X$的方差。

为了计算$X$的系综平均，因此将蒙特卡罗策略应用于$Z$（统计误差较小）。随后根据恒等式$\mathbb{E}(X) = \mathbb{E}(Z)$得到关注量$\mathbb{E}(X)$。

实际上，求取$X$、$Y$的协方差$\mathrm{cov}(Y)$和方差$\mathrm{var}(\xi$的最优值所需的量（见（1））并未知。它们通过数值方法估计如下：

$$\mathrm{cov}(X,Y) \simeq \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega)Y_m(\omega) - \frac{1}{M^2}\Big(\sum_{m=1}^{M} X_m(\omega)\Big)\Big(\sum_{m=1}^{M} Y_m(\omega)\Big),$$

and

$$\mathrm{var}(Y) \simeq \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}(Y_m(\omega))^2 - \frac{1}{M^2}\left(\sum_{m=1}^{M} Y_m(\omega)\right)^2.$$

实际上，与计算$X$相比，随机变量$Y$的计算成本通常很低。因此，计算经验平均值 $^1{}_M\ \sum_{m=1}^{M} X_m(\omega)$的成本与计算 $^1{}_M\ \sum_{m=1}^{M} Z_m(\omega)$的成本相同。后一个估计比前一个更准确地近似了$\mathbb{E}(X)$：进行方差缩减后，在计算成本相同的情况下，$\mathbb{E}(X)$的统计误差确实缩小为原来的

$$\frac{\sigma_X}{\sigma_{Z^\star}} = \sqrt{\frac{1}{1 - \mathrm{corr}(X,Y)^2}},$$

定义为效率指标（越高越好）。

**注 1**。当$Y$的期望值未知时，仍可采用上述控制变量法，只需将$\mathbb{E}(Y)$替换为形如 $\frac{1}{\mathcal{M}}\sum_{m=1}^{\mathcal{M}} Y_m(\omega)$的精确估计，其中$\mathcal{M}$所考虑的实现样本数量足够大，使得该近似引入的额外统计误差远小于$\mu_M(X)$与$\mathbb{E}(X)$之间的统计误差。我们通常取$\mathcal{M} \gg M$。当$Y$的计算成本较低时，额外成本可以忽略不计。

## 3. 基于等效夹杂法的均匀化概述

本节首先介绍本文所关注的电导率问题，以及相关的均匀化结果（见第3.1节）。随后，我们将转向等效夹杂法（见第3.2节）。该方法是一种近似表观电导率的策略；如第4节所述，我们将在此将其用作替代模型。

### *3.1.* 有效电导率和表观电导率

本文所考虑的均匀化问题是在电导率框架下表述的。这里我们回顾这一框架，以及有效电导率和表观电导率的概念。

我们考虑一种随机非均质材料，其局部电导率为$\boldsymbol{\sigma}_\varepsilon(\mathbf{x},\omega)$（二阶、对称、正定张量），其中$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$表示观测点，而$\omega$表示一次实现。下标$\varepsilon$强调电导率变化的特征尺度$\varepsilon$

很小。我们考虑经典的随机遍历均匀化情形，其中对于固定的平稳张量 $\sigma$， $\sigma_\varepsilon(\mathbf{x},\omega) = \sigma(\mathbf{x}/\varepsilon,\omega)$；我们假设该张量关于$\mathbf{x}$ 和$\omega$一致地有上下界。$\sigma(\cdot,\omega)$的每个实现都占据整个空间 $\mathbb{R}^d$。

非均匀电导率问题可表示为

$$\operatorname{div}\mathbf{J}_\varepsilon = f, \quad \mathbf{J}_\varepsilon = -\sigma_\varepsilon\,\mathbf{grad}\,\Phi_\varepsilon,$$

在某个计算域 $\mathcal{D}$中，其中 f 为载荷（假设其与 $\varepsilon$和 $\omega$无关）， $\Phi_\varepsilon$ 为电势，$-\operatorname{grad}\Phi_\varepsilon$为电场，$\mathbf{J}_\varepsilon$为电流。上述问题还需满足某些边界条件（例如，对于任意 $\mathrm{x} \in \partial\mathcal{D}$， $\Phi_\varepsilon(\mathrm{x},\omega) = 0$）。众所周知（参见教科书 Jikov等人（1994年）；Milton（2002）；Blanc和Le Bris（2023），讲义 Brisard 等（2022，第 7 部分），以及综述文章 Anantharaman等人（2011年）及其中所收录的大量参考文献），相应的均匀化问题为

$$\operatorname{div}\mathbf{J}^{\mathrm{eff}} = f, \quad \mathbf{J}^{\mathrm{eff}} = -\sigma^{\mathrm{eff}}\,\mathbf{grad}\,\Phi^{\mathrm{eff}}, \tag{2}$$

其中 $\sigma^{\mathrm{eff}}$为有效（此处为常数且确定性的）电导率。该有效电导率由所谓的校正函数 $\Phi$定义，这些函数是以下问题的解：对于任意给定的常数宏观电场$\mathbf{E} \in \mathbb{R}^d$，求 $\Phi$ 使得

$$\begin{gathered}\operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \quad \mathbf{J} = \sigma\,\mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \overline{\mathbf{E}} - \mathbf{grad}\,\Phi \quad \text{in } \mathbb{R}^d,\\ \mathbf{grad}\,\Phi \text{ is stationary and } \mathbb{E}(\mathbf{grad}\,\Phi) = 0.\end{gathered} \tag{3}$$

实际上，无法求解（3），因为该问题是在整个空间 $\mathbb{R}^d$上提出的。为进行实际计算，我们因此考虑将该问题（以及电导率的实现样本 $\sigma$）限制在有限尺寸区域 $Q = (-L/2, L/2)^d$ 上，其中$L$为某个较大的数。按照Ostoja-Starzewski（2006）的说法，我们将这些限制区域称为统计体积单元。

鉴于此处将采用周期性边界条件，因此定义边界相对两侧的对应点 $\partial Q$ 为两点$\mathbf{x}^\pm \in \partial Q$，使得存在$i \in \{1,\dots,d\}$，满足$x_j^+ = x_j^- + \delta_{ij}L$对所有$1 \le j \le d$ （见图1）。

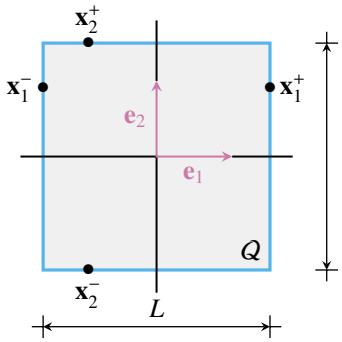


图1：$(\mathbf{x}_1^-, \mathbf{x}_1^+)$和$(\mathbf{x}_2^-, \mathbf{x}_2^+)$是二维区域 $Q$边界上的两对同源点。

统计体积单元的表观电导率 $\sigma^{\mathrm{app}}(\omega,L)$通过在 $Q$ 上求解以下边值问题来定义，该问题在文献中称为校正问题、局部化问题或辅助问题：

**问题1** （校正问题）。 对于任意固定的常宏观电场$\mathbf{E} \in \mathbb{R}^d$，求电势 $\Phi^{\mathrm{per}}$ 的 $Q$-周期涨落，使其满足

$$\operatorname{div}\mathbf{J} = 0 \quad \text{in } Q, \tag{4}$$
$$\mathbf{J} = \sigma\,\mathbf{E} \quad \text{in } Q, \tag{5}$$
$$\mathbf{E} = \overline{\mathbf{E}} - \mathbf{grad}\,\Phi^{\mathrm{per}} \quad \text{in } Q, \tag{6}$$
$$\mathbf{J}^+ \cdot \mathbf{n}^+ = -\mathbf{J}^- \cdot \mathbf{n}^- \quad \text{on } \partial Q. \tag{7}$$

方程（7）表示，通量$\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}$ 在 $Q$边界处必须是反周期的：点$\mathbf{x}^-$ 和点$\mathbf{x}^+$ 是 $\partial Q$的相对两侧面上的两个同源点，$\mathbf{n}^\pm$ 表示 $Q$在点$\mathbf{x}^\pm$处的外单位法向量。

**注2.** 问题 $\Phi^{\mathrm{per}}$ 的解*1* 自然地在 $H^1_{\mathrm{per}}(Q)$中寻求。我们注意到 $\mathbf{J} \in$ 属于 $H$(散度，$Q$)，因此其法向迹$\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}$ （出现在式(7)中）定义良好（见附录 *A*）。

由于其线性，问题1 的解仅线性地依赖于一个参数，即恒定的宏观电场 $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^d$。特别地，表观电导率$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}(\omega, L)$ 定义为宏观电场 $\mathbf{E}$ 与电流体积平均值之间的线性映射 $\langle \mathbf{J}\rangle$：

$$\langle\mathbf{J}\rangle = \sigma^{\mathrm{app}}(\omega,L)\,\overline{\mathbf{E}}, \tag{8}$$

其中，尖括号表示对 $Q$进行体积平均。上述关系也可写为

$$\frac{1}{|Q|}\int_Q \sigma\left(\overline{\mathbf{E}} - \mathbf{grad}\,\Phi^{\mathrm{per}}\right) = \sigma^{\mathrm{app}}(\omega,L)\,\overline{\mathbf{E}}.$$

应注意，式（6）以及 $\Phi^{\mathrm{per}}$ 的周期性$\langle$**导致**$\rangle = \mathbf{E}$ E，因而式（8）也可写为

$$\langle\mathbf{J}\rangle = \sigma^{\mathrm{app}}(\omega,L)\,\langle\mathbf{E}\rangle.$$

我们强调，表观电导率取决于实现 $\omega$ （这会引入相对于$\sigma^{\mathrm{eff}}$的随机误差）以及统计体积单元的尺寸 $L$ （这会引入偏差，因为一般而言， $\mathbb{E}[\sigma^{\mathrm{app}}(\omega, L)] \neq \sigma^{\mathrm{eff}}$；例如参见 Kanit 等人(2003年）。

对于统计均匀的遍历系统，有效电导率在均匀化问题（2）中引入（回顾一下，它是根据校正函数 $\Phi$ 对（3）的解定义的），当L趋于无穷大时，上述表观电导率的极限为（例如参见Sab（1992）以及Bourgeat 和 Piatnitski（2004））：

$$\sigma^{\mathrm{eff}} = \lim_{L\to+\infty}\sigma^{\mathrm{app}}(\omega,L) \quad \text{almost surely in } \omega.$$

我们回顾一下，实现 $\sigma(\cdot,\omega)$ 填充整个空间：因此，表观电导率对所有 $L$ 都有定义，并且

上述极限是有意义的。事实证明（这体现了大数定律），该极限与所考虑的实现 $\omega$ 无关。然而，为了更好地逼近 $\boldsymbol{\sigma}^{\text{eff}}$，上述公式通常应用为

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{eff}} = \lim_{L\to+\infty} \mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}}(\omega, L)].$$

上述期望值通过经验平均来估计。实际中，典型的均匀化工作流程如下：

1. 生成 $M$ 个微观结构实现样本 $\boldsymbol{\sigma}_1(\cdot,\omega),\ldots,\boldsymbol{\sigma}_M(\cdot,\omega)$;
2. 对于固定的 $L$值，求解问题1，针对这 $M$ 个实现样本 $\boldsymbol{\sigma}_m(\cdot,\omega)$; 3. 计算所有 $\boldsymbol{\sigma}_m^{\text{app}}(\omega, L)$ 对应的表观电导率 $1 \le m \le M$;

4. 估计平均表观电导率

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}}(\omega, L)] \simeq \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{\sigma}_m^{\text{app}}(\omega, L);$$

5. 对于较大的 $L$ 值，可能重复上述步骤。

上述工作流程涉及三类数值误差。步骤 2 中，离散化误差通常可通过调整网格的粗细来控制。步骤 4 中，统计误差可通过实现样本的数量 $M$ 来控制（见下文）；而有限尺寸误差则可通过增大统计体积单元的尺寸 $L$ 来减小。本文专注于统计误差，因此假设离散化误差可以忽略不计，且统计体积单元的尺寸 $L$ 是固定的。统计体积单元所占据的固定区域 $Q$称为单胞，下文将不再提及其尺寸 $L$：我们将写作 $\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}}(\omega)$，而不写作 $\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}}(\omega,L)$。

### *3.2.* 等效夹杂法概述

等效夹杂法（EIM）最初由 Moschovidis 和 Mura （1975年）提出，用于计算嵌入均匀基体中的非均匀体集合的有效响应近似值。在本节中，我们简要概述由 Brisard 等 （ 2014 年）提出的该方法的变分形式。

注意，根据 Eshelby （1957）以及 Moschovidis 和 Mura （1975）的定义，我们将 夹杂 定义为一个有界域，其电导率与周围基体相同，但受到非零电极化作用（将在下文定义）；将 非均匀体 定义为一个具有均匀电导率的有界域，且该电导率与周围基体的电导率不同。

#### *3.2.1. Lippmann–Schwinger* 方程

EIM 的出发点是 Lippmann–Schwinger 方程，它是对校正问题（4）–（7）的重新表述（参见Korringa(1973)；Zeller 和 Dederichs (1973)；Kr¨oner(1974)）。该方程需要一种所谓的参考材料，其电导率均匀 $\boldsymbol{\sigma}_0$ （对称正定二阶张量）。选定参考材料后，我们定义以下辅助问题：

**问题 2**。给定电极化$\mathbf{P}$ （作为具有平方可积分量的 $Q$-周期向量场），求 $Q$-周期电势 $\Phi^{\text{per}}$，使得

$$\begin{aligned}
&\operatorname{div}\mathbf{J} = 0 \quad \textit{in } Q,\\
&\mathbf{J} = \boldsymbol{\sigma}_0\,\mathbf{E} + \mathbf{P} \quad \textit{in } Q,\\
&\mathbf{E} = -\operatorname{\mathbf{grad}}\Phi^{\text{per}} \quad \textit{in } Q,\\
&\mathbf{J}^+\cdot\mathbf{n}^+ = -\mathbf{J}^-\cdot\mathbf{n}^- \quad \textit{on } \partial Q.
\end{aligned}$$

对于任意 $\mathbf{P} \in (L^2(Q))^d$，我们注意到，问题 $\mathbf{J}$ 的解属于问题 2 所对应的空间 $H(\operatorname{div}, Q)$，因此其法向迹（出现在上一个方程中）是定义良好的（见附录 A）。注意，我们并不要求 $\mathbf{P}$ 具有定义良好的法向迹。

问题 2 关于参数 $\mathbf{P}$呈线性关系。格林算子 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 定义为将向量场 $\mathbf{P}$ 映射为 $-\mathbf{E}$ 的线性算子，其中 $\mathbf{E}$ 表示问题2的唯一解：

$$\boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{P}) = -\mathbf{E} = \operatorname{\mathbf{grad}}\Phi^{\text{per}}. \tag{9}$$

对于各向同性均匀参考材料的特殊情况，电导率张量 $\boldsymbol{\sigma}_0$ 与二阶单位张量 $\mathbf{I}$成正比，即 $\boldsymbol{\sigma}_0 = \sigma_0\,\mathbf{I}$，此时格林算子 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 在傅里叶空间中具有闭式表达式（见 Milton(2002)）：

$$\boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{P})(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_\mathbf{n})\,\widetilde{\mathbf{P}}_\mathbf{n}\,\exp(\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}), \tag{10}$$

其中 $\mathbf{k}_\mathbf{n} = 2\pi\mathbf{n}/L$，$\mathbf{P}_\mathbf{n}$ 是 $\mathbf{n}$ 阶傅里叶系数，属于 $\mathbf{P}$（附录 B 中回顾了我们对傅里叶变换的约定），并且二阶张量 $\boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{k})$ 对任意 $\mathbf{k} \in\mathbb{R}^d$ 的定义为

$$\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sigma_0}\dfrac{\mathbf{k}\otimes\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^2} & \text{for } \mathbf{k}\neq\mathbf{0},\\ \mathbf{0} & \text{for } \mathbf{k}=\mathbf{0}. \end{cases} \tag{11}$$

格林算子 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 由（9）定义后，可以证明问题1等价于 Lippmann–Schwinger 方程

$$\mathbf{E} + \boldsymbol{\Gamma}_0[(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_0)\,\mathbf{E}] = \overline{\mathbf{E}}, \tag{12}$$

其中未知量为电场 $\mathbf{E} \in (L^2(Q))^d$。接着引入极化 $\mathbf{P} = (\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_0)\,\mathbf{E}$，上述方程可变换为

$$(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_0)^{-1}\,\mathbf{P} + \boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{P}) = \overline{\mathbf{E}}, \tag{13}$$

以及由式（8）定义的表观电导率可通过平均极化得到

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}}\,\overline{\mathbf{E}} &= \langle\mathbf{J}\rangle = \langle\boldsymbol{\sigma}\,\mathbf{E}\rangle = \langle\boldsymbol{\sigma}_0\,\mathbf{E} + \mathbf{P}\rangle\\
&= \boldsymbol{\sigma}_0\,\langle\mathbf{E}\rangle + \langle\mathbf{P}\rangle = \boldsymbol{\sigma}_0\,\overline{\mathbf{E}} + \langle\mathbf{P}\rangle.
\end{aligned} \tag{14}$$

求解（13）等价于求解问题1。下面我们转而讨论（13）的离散化方法。

*3.2.2.* 等效夹杂法

Moschovidis 和 Mura 的等效夹杂法Moschovidis andMura（1975）为由定义明确的独立相组成的材料提供了 Lippmann–Schwinger 方程（13）的近似解。

我们认为，所研究的非均质材料由 $N+1$ 个相 $\Omega_1,\dots,\Omega_{N+1}\subset\mathbb{R}^d$ 构成，它们将 $\mathbb{R}^d$ 划分为若干部分。这里的“相”应作宽泛理解：每个 $\Omega_\alpha$ 都具有均匀电导率 $\boldsymbol{\sigma}_\alpha$。例如，下面图 3 所示的微观结构包含 $N$ 个非均质体，位于 $Q$中。每个非均质体（连同其在 $\mathbb{R}^d$中的周期图像）均视为一个相。相 $N+1$ 将单独处理，并称为“基体”。

我们引入示性函数 $\chi_\alpha\colon\ \mathbb{R}^d\longrightarrow\{0,1\}\,\Omega_\alpha$ 的示性函数，以及单胞 $Q$中相 $\alpha$ 的体积分数，$f_\alpha=\langle\chi_\alpha\rangle=|\Omega_\alpha\cap Q|/|Q|$。

在 EIM 最简单的形式中，构造方程（13）的分片常数近似解，并令参考材料与基体一致：$\boldsymbol{\sigma}_0=\boldsymbol{\sigma}_{N+1}$。因此，极化 P 在 $\Omega_{N+1}$ 上为零（因为 $\mathrm{P}_{N+1}=(\boldsymbol{\sigma}_{N+1}-\boldsymbol{\sigma}_0)\,\mathrm{E}$）。基于这一近似空间，对 Lippmann–Schwinger 方程的离散化最初采用配置法（Moschovidis 和 Mura，1975）。近期，Brisard 等（2014）提出了该方程变分形式的 Galerkin 离散化。如附录 C 中简要概述的，离散化后，方程（13）化为以下以 $\mathrm{P}_1,\dots,\mathrm{P}_N\in\mathbb{R}^d$ 为未知量的线性方程组（各相中的常值极化；请注意，基体相中 $\mathrm{P}_{N+1}=\mathbf{0}$）：对于任意 $1\le\alpha\le\mathrm{N}$,

$$(\boldsymbol{\sigma}_\alpha-\boldsymbol{\sigma}_0)^{-1}\,\mathbf{P}_\alpha+\sum_{\beta=1}^{N}\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\,\mathbf{P}_\beta=\overline{\mathbf{E}}.\tag{15}$$

因此，我们只需解一个含有 $Nd$ 个标量未知数的线性系统。在（15）中，所谓的二阶影响张量$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 根据其对（常）向量的作用方式定义：对于任意$\mathbf{P}\in\mathbb{R}^d$,

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\,\mathbf{P}=|\Omega_\alpha\cap Q|^{-1}\int_{\Omega_\alpha\cap Q}\boldsymbol{\Gamma}_0(\chi_\beta\,\mathbf{P})(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}.\tag{16}$$

量 $-\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\mathbf{P}$ 是在周期设置下，由相 $\alpha$ 中的恒定极化所诱导的平均电场，该极化在相$\mathbf{P}$ 中恒等于 $\beta$，而在其他所有位置均为零。请注意，从（16）的角度来看，$\Omega_\alpha$ 和$\Omega_\beta$ 应视为嵌入电导率为的均匀基体中的夹杂物 $\boldsymbol{\sigma}_0$（如第3.2节开头所述）。

表观电导率的EIM近似由（15）的解通过以下恒等式推导得出，该恒等式可直接由（14）推出：

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}\,\overline{\mathbf{E}}=\boldsymbol{\sigma}_0\,\overline{\mathbf{E}}+\sum_{\alpha=1}^{N}f_\alpha\,\mathbf{P}_\alpha.\tag{17}$$

按照计算均匀化中的惯例，完整确定电导率张量 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$ 需要求解（15）并对（17）进行评估，其中$d$ 个常数宏观电场$\overline{\mathbf{E}}\in\mathbb{R}^d$彼此线性无关。由于我们考虑的是随机设置和有界统计体元，EIM近似$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$ 显然取决于 $\omega$。

**备注 3**（线性系统组装）。与（$=b$ 对应的线性系统 $Ax$（15）按块组装：

$$A_{(\alpha-1)d+i,(\beta-1)d+j}=\mathbf{e}_i\cdot\left[\delta_{\alpha\beta}\,(\boldsymbol{\sigma}_\alpha-\boldsymbol{\sigma}_0)^{-1}+\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\right]\mathbf{e}_j,$$
$$b_{(\alpha-1)d+i}=\overline{\mathbf{E}}\cdot\mathbf{e}_i,$$

其中 $1\le\alpha,\ \beta\le N$ 和 $1\le i,\ j\le d$。线性系统 $Ax=b$ 的解 $x$ 给出了每个夹杂物中的极化：$\mathbf{P}_\alpha\cdot\mathbf{e}_i=x_{(\alpha-1)d+i}$。

正如引言中所指出的，EIM方法与Hashin-Shtrikman变分原理（见 Hashin 和 Shtrikman（1962a）的介绍）以及Hashin-Shtrikman界（由 Hashin 和 Shtrik- man（1962b）提出）之间存在密切联系。将校正问题 1 重写为 Lippmann–Schwinger 方程（12），再将其改写为关于极化 $\mathbf{P}$ 的方程（13），正是Hashin-Shtrikman变分原理的基础。通过取 $\boldsymbol{\sigma}_0=\boldsymbol{\sigma}_{N+1}$（参考材料与基体重合），并以如下形式搜索方程（13）的近似解：极化 $\mathbf{P}$ 在每个夹杂中均为常数，该常数对所有夹杂和所有实现样本 均相同，即可得到 Hashin-Shtrikman界。在这里，我们同样取 $\boldsymbol{\sigma}_0=\boldsymbol{\sigma}_{N+1}$，但我们以如下形式搜索方程（13）的近似解：极化 $\mathbf{P}$ 在每个夹杂中均为常数，但该常数预先设定为对每个夹杂和每个实现样本均不同。

*3.2.3.* 影响张量的傅里叶展开

为了计算上述近似 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$，我们需要预先计算影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$。本节强调指出，这一计算实际上颇具挑战性。然而，在当前语境下，我们仅将 EIM方法用作替代模型（而不是表观电导率 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}$的近似），正如第4.2节所解释的那样，我们可以规避这一困难并采用一种替代策略。

计算 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 的标准方法如下。影响张量的以下表达式在附录 D中推导得到：

$$f_\alpha\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}=\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d}\widetilde{\chi}^{*}_{\alpha,\mathbf{n}}\,\widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}}\,\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_\mathbf{n}),\tag{18}$$

其中$\widetilde{\chi}^{*}_{\alpha,\ \mathbf{n}}$ 是示性函数 $\chi_\alpha$ 的相 $\alpha$的傅里叶系数$\widetilde{\chi}_{\alpha}$的$\mathbf{n}$ 复共轭，

$$\widetilde{\chi}_{\alpha,\mathbf{n}}=\frac{1}{|Q|}\int_Q\chi_\alpha(\mathbf{x})\,\exp(-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}.\tag{19}$$

在特殊情形下，当 $d=2$ 且当相 $\alpha$占据一个圆盘 $\Omega_\alpha$ 其中心为 $\mathbf{x}_\alpha$、半径为 $a_\alpha$时，如附录 D所示，我们有

$$\widetilde{\chi}_{\alpha,\mathbf{n}}=f_\alpha\,F(k_\mathbf{n}\,a_\alpha)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha}\quad\text{with}\quad F(\xi)=2\,\mathrm{J}_1(\xi)/\xi,\tag{20}$$

其中 $J_1$ 表示第一类贝塞尔函数，且 $k_{\mathbf{n}} = |\mathbf{k}_{\mathbf{n}}|$。将（20）代入（18），并令 $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$，可得

$$\mathbf{\Gamma}_{\alpha\beta} = f_\beta \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^2} F(k_{\mathbf{n}}\, a_\alpha)\, F(k_{\mathbf{n}}\, a_\beta)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{r}_{\alpha\beta}}\, \widehat{\mathbf{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}).$$

在 $d = 2$维空间中，当各相占据规则形状时，级数（18）的通项表现为$n^{-2}$（De- bye 等人，1957）。换言之，收敛速度非常慢，这使得影响张量的数值计算$\mathbf{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 困难。为准确计算这些系数，已有研究提出了几种加速技术（To 等人，2016）。我们在此不作详细介绍，因为如上所述，在我们的具体背景下，可以采用另一种策略，详见第4.2节。

## 4. 基于EIM的方差缩减

我们在第 3 节中展示了 EIM 如何给出表观电导率的近似值。该估计值由（17）给出，通常比全场估计的计算成本低得多，因为它只涉及 $Nd$ 个标量未知量（其中 $N$ 是在忽略基体相时的相数）。鉴于真实表观电导率$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}$（$\omega$）与其 EIM估计值 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$（$\omega$）之间可能具有良好的相关性，我们现在讨论如何将 EIM估计值用作方差缩减的替代模型。

### *4.1.* 策略概述

对于一种多相材料，我们的目标是估计系综平均值 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}(\omega)]$（即对微观结构所有实现取平均）。需要指出的是，本文不考虑有限尺寸效应（因此统计体积单元的尺寸 $L$ 固定）。

如第 3.1 节所述，实际中，系综平均值 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}(\omega)]$通常用对 $M$ 个表观电导率实现 $\boldsymbol{\sigma}_m^{\mathrm{app}}(\omega)$ $1 \le m \le M$取经验平均来近似，而这些表观电导率则通过全场模拟（通常采用有限元法）求得：

$$\mathbb{E}(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}) \simeq \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{\sigma}_m^{\mathrm{FEM}}(\omega),$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}_m^{\mathrm{FEM}}(\omega)$表示第$m$个实现的表观电导率的有限元数值近似值。

为提高该估计值的可靠性，我们采用第 2 节介绍的方差缩减策略，并以表观电导率的 EIM 估计值作为替代模型。具体而言，为降低表观电导率一个分量的全场估计值的方差，我们采用同一分量的 EIM 估计值作为替代模型。

**注 4** (替代模型的系综平均)。注意，对于电导率张量的任意分量 $1 \le i,j \le d$，其系综平均 $\mathbb{E}(\sigma_{ij}^{\mathrm{EIM}})$ 是未知的。依照注 *1*，因此这里采用蒙特卡罗估计，其实现样本数 $\mathcal{M}$ 远大于完整场模拟的数量 $M$。

由于等效夹杂法的计算成本相对较低，这些额外的数值计算不会影响所提策略的整体效率。

**注 5**。理论上，可以使用第*2*节所述方差缩减方法的张量版本，其中 的任意分量 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{FEM}}$ 与 的所有分量 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$交叉相关。我们已实现这一方法，但观察到它带来的改进微乎其微。因此，本文专注于仅使用分量 $\sigma_{ij}^{\mathrm{EIM}}$来改进对 $\mathbb{E}(\sigma_{ij}^{\mathrm{FEM}})$ 的计算。

总结以上讨论，所提出的工作流程概述如下（如前所述，统计体积单元的尺寸 $L$ 是固定的）：

1. 生成 $\mathcal{M} \gg \mathrm{M}$ 个微观结构实现样本。2. 对前 M 个微观结构进行有限元模拟。此步骤得到表观电导率$\boldsymbol{\sigma}_1^{\mathrm{FEM}}($ $\omega$)、……、 $\boldsymbol{\sigma}_M^{\mathrm{FEM}}(\omega)$。3. 对所有 $\mathcal{M}$ 个微观结构进行 EIM 模拟。对于每个实现样本，此步骤都需要组装并求解线性系统 (15)；由 (17) 得到 EIM近似 $\boldsymbol{\sigma}_1^{\mathrm{EIM}}(\omega)$、……、 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathcal{M}}^{\mathrm{EIM}}(\omega)$。4. 利用步骤 3 的所有结果，按照注 1 和注 4 的思路，准确估计 $\mathbb{E}(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}})$。5. 对任意 $1 \le \mathrm{i,j} \le \mathrm{d}$，利用步骤 2、3 和 4 的结果，对 $\mathrm{X} = \sigma_{ij}^{\mathrm{FEM}}$和 $\mathrm{Y} = \sigma_{ij}^{\mathrm{EIM}}$ 应用第 2 节所述的方差缩减技术。

当然，要使这一策略切实可行，至关重要的是步骤 3 能够在极短时间内完成。待求解的线性系统规模较小，但其组装过程较为复杂，这是因为定义影响张量的傅里叶级数（18）收敛缓慢。下一节将解决这一问题。

### *4.2.* 高效计算影响张量

关键在于，我们不需要精确计算影响张量 $\mathbf{\Gamma}_{\alpha\beta}$。事实上，作为一种替代模型， $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$ 无需准确估计真实电导率 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{app}}$。唯一的要求是，两个随机变量 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{FEM}}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{EIM}}$ 具有相关性。换言之，可以对 EIM 线性系统进行调整，只要这些调整不会破坏有限元法模拟与 EIM 模拟之间的相关性。

一个自然的想法是用以下截断和替代无穷级数（18）

$$f_\alpha\, \mathbf{\Gamma}_{\alpha\beta} \simeq \sum_{-P\le n_1,\ldots,n_d\le P} \widetilde{\chi}^*_{\alpha,\mathbf{n}}\, \widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}}\, \widehat{\mathbf{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}),$$

其中 $P$ 足够小，以使这个$d$维求和的计算成本最小（通常为$P \le 3$）。我们的数值实验（此处未列出）表明，这种方法并不能实现令人满意的方差缩减，这可能意味着被忽略的高频项包含重要的相关性内容。

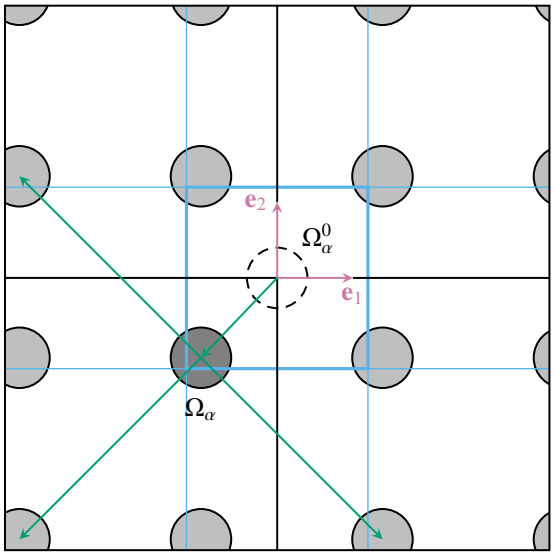


图2：单胞 $Q$（实蓝线）和参考域 $\Omega_\alpha^0$（黑色虚线）。由相 $\alpha$ 占据的域 $\Omega_\alpha$ 是主图像（以 $\mathbf{x}_\alpha$为中心，深灰色；根据定义，$\mathbf{x}_\alpha \in Q$；请注意，在图示情况下，主图像 $\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$ 并不是 $Q$的子集）及其周期图像（浅灰色）的并集。

Zecevic 和 Lebensohn于2021年的近期工作提出了另一种方法。在“基于 FFT 的均匀化方法”框架下（Moulinec 和 Suquet，1994年，1998年），他们考虑了类似于（18）的级数，$\chi_\alpha$ 和$\chi_\beta$ 分别是两个“体素”的示性函数。利用泊松公式，他们首先将傅里叶空间中的级数转换为实空间中的级数，然后对其进行截断。我们提出采用基于泊松公式的相同变换。然而，不同于Zecevic 和 Lebensohn（2021），我们将在截断和中保留最少数量的项。本节旨在阐释Zecevic 和 Lebensohn （2021）所进行变换的物理含义，并对该公式提出一项修正。

由于微观结构具有周期性，对于任意相 $1 \le \alpha \le N$，定义参考域$\Omega_\alpha^0$是很有意义的，使得整个相$\Omega_\alpha$ 都由$\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$的周期副本覆盖，其中$\mathbf{x}_\alpha$ 是单胞中的一个固定位置 $Q$。例如，对于圆形夹杂物，$\Omega_\alpha^0$ 是以原点为中心的圆盘（半径为$a_\alpha$），而$\mathbf{x}_\alpha$ 是唯一一个周期图像的中心，该中心位于单胞内 $Q$（见图2）。根据上述定义，我们有（‘+’表示平移）

$$\Omega_\alpha = \bigcup_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} [(\mathbf{x}_\alpha + \mathbf{n}\,L) + \Omega_\alpha^0].$$

回顾一下（见（16）），除符号相反外，$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 表示由相 $\beta$的恒定极化在相$\Omega_\alpha$ 中诱导的平均电场。由于微观结构具有周期性，对相$\Omega_\alpha$ 取平均等同于对主图像$\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$取平均。此外，$\Omega_\beta$ 由主图像$\mathbf{x}_\beta + \Omega_\beta^0$ 及其所有周期图像组成。因此，张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 表示由$\mathbf{x}_\beta + \Omega_\beta^0$的所有周期图像的恒定极化在基本图像$\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$ 中诱导的平均电场。简而言之，$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 表示

$\mathbf{x}\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$ 与$\mathbf{x}_\beta + \Omega_\beta^0$的所有周期图像之间的相互作用。

由于所考虑的导电问题是线性的，这些相互作用具有可加性，因此我们可以聚焦于$\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$ 与 $\Omega_\beta^1 = \mathbf{x}_\beta + \mathbf{n}_1 L + \Omega_\beta^0$ 的一个周期像之间的相互作用（给定$\mathbf{n}_1 \in \mathbb{Z}^d$时）。利用平移不变性，我们聚焦于 $\Omega_\alpha^0$ 与 $\Omega_\beta^1 = \mathbf{r} + \Omega_\beta^0$之间的相互作用，其中$\mathbf{r} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha + \mathbf{n}_1 L$。

直观上看，我们不再处理周期性边界条件。相反，$\Omega_\alpha^0$ 和 $\Omega_\beta^1$ 嵌入在无限空间 $\mathbb{R}^d$中，并在无穷远处施加边界条件（以确保电场平方可积）。于是，对于常向量$\mathbf{P}_\beta \in \mathbb{R}^d$，我们考虑以下问题：

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^d, \tag{21}$$
$$\mathbf{J} = \boldsymbol{\sigma}_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_\beta \quad \text{in } \Omega_\beta^1, \tag{22}$$
$$\mathbf{J} = \boldsymbol{\sigma}_0 \mathbf{E} \quad \text{in } \mathbb{R}^d \setminus \Omega_\beta^1, \tag{23}$$
$$\mathbf{E} = -\operatorname{\mathbf{grad}} \Phi \quad \text{in } \mathbb{R}^d, \tag{24}$$

其中 $\Phi \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^d)$ 且 $\mathbf{E} \in (L^2(\mathbb{R}^d))^d$，我们关注 $\Omega_\alpha^0$上的平均电场。换言之，在电导率为 $\boldsymbol{\sigma}_0$ 的无限介质中，我们将极化$\mathbf{P}_\beta$ 施加到区域 $\Omega_\beta^1 = \mathbf{r} + \Omega_\beta^0$，并测量 $\Omega_\alpha^0$上的平均感应电场。根据定义，影响张量$\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$将极化$\mathbf{P}_\beta$ 映射为平均电场的相反数：

$$\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{r})\,\mathbf{P}_\beta = -|\Omega_\alpha^0|^{-1} \int_{\Omega_\alpha^0} \mathbf{E}, \tag{25}$$

其中 $\mathbf{E}$ 是方程（21）–（24）的解。影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ 显然取决于参考区域的几何形状 $\Omega_\alpha^0$和 $\Omega_\beta^0$，以及向量 $\mathbf{r} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha + \mathbf{n}_1 L$。

例如，在附录 E中，我们考虑二维情形，针对各向同性均匀参考材料（$\boldsymbol{\sigma}_0 = \sigma_0 \mathbf{I}$），并假设各相由圆形夹杂物构成。记 $a_\beta$ 为相 $\beta$中夹杂物的半径。在此情形下，我们证明（见（E.8））

$$\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{a_\beta^2}{2\sigma_0 |\mathbf{r}|^2} \left( \mathbf{I} - 2\frac{\mathbf{r}\otimes\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^2} \right), \tag{26}$$

其中$\mathbf{r}$ 是从 $\Omega_\alpha^0$ 的中心指向 $\Omega_\beta^1$中心的向量。

请注意，ff与 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 之间唯一的区别 $\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}$ 在于边界条件（问题 2 采用周期边界条件补充，而问题（21）–（24）则采用“边界条件” $\mathbf{E} \in (L^2(\mathbb{R}^d))^d$）。

基于上述讨论，提出如下公式：

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} \stackrel{?}{=} \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{n}\,L), \tag{27}$$

这表明，$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 度量了$\mathbf{x}_\alpha + \Omega_\alpha^0$ 与$\mathbf{x}_\beta + \Omega_\beta^0$ 的所有周期图像之间的（可加）相互作用（由 $\boldsymbol{\Gamma}^\infty_{\alpha\beta}$度量）。

本质上，这是Zecevic 和 Lebensohn (2021) 最初提出的公式（基于泊松求和公式）。值得注意的是，Molinari 和 El Mouden (1996) 也提出了类似公式。然而，Zecevic 和 Lebensohn(2021) 指出，该级数并非绝对收敛。因此，它至多是条件收敛的，必须明确定义求和方案。Zecevic 和 Lebensohn(2021) 采用了以下方案：

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} \overset{?}{=} \lim_{P\to+\infty} \sum_{-P\leq n_1,\dots n_d\leq P} \boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{n}\,L). \tag{28}$$

尽管上述公式因具有合理的物理意义而颇具吸引力，但它并不正确。事实上，考虑各向同性参考材料、维数为 $d = 2$ 且夹杂物为圆形夹杂物的情形。附录 D （见（D.1））证明，对于任意 $\alpha \neq \beta$，

$$\operatorname{tr}\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = -\sigma_0^{-1} f_\beta,$$

而由（26）可推得，对于任意 $\alpha \neq \beta$，

$$\operatorname{tr}\boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{\alpha\beta} = 0.$$

方程（28）与上述两个关系式不一致。因此，我们（凭启发式方法）提出如下修正项（针对圆盘和各向同性参考材料的二维情形）：

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = \lim_{P\to+\infty} \sum_{-P\leq n_1,\dots n_d\leq P} \boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{n}\,L) - \frac{f_\beta}{2\sigma_0}\mathbf{I}, \tag{29}$$

这确保等式两边的迹相等。我们尚无法给出（29）的数学证明。不过，附录 F中给出了数值验证。此外，下文将表明，该修正项使有限元法与 EIM 的结果具有令人满意的相关性。

在实践中，对于下文给出的应用，我们采用（29）的截断形式：

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} \simeq \sum_{-P\leq n_1,\dots n_d\leq P} \boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{n}\,L) - \frac{f_\beta}{2\sigma_0}\mathbf{I},$$

当 $P$ 取较小值时（通常 $P = 1$、2、3）。除非另有说明，我们在第 $P = 2$ 节中设定 5。还需注意的是，我们考虑了近似

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} \simeq \sum_{-P\leq n_1,\dots n_d\leq P} \boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha - \mathbf{n}\,L),$$

就方差降低效率而言，这会导致较差的结果（此处不再列出）。

**注 6。** 式 （29）中引入的附加项显然并不具有普适性。事实上，由于该项是各向同性的，因此它是否适用于夹杂物并非圆形以及/或单胞并非正方形的情形，是值得怀疑的。我们将此类一般情形的研究留待今后的工作。

**注 7。** *Zecevic 和 Lebensohn*（*2021*）表明，式 （27）在他们所考虑的数值应用中能够取得良好结果。在现阶段，其原因对我们而言尚不明确。

第4 节中概述的工作流程将在下一节应用于圆形夹杂物的随机组装体。

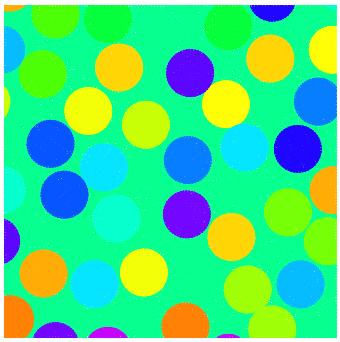

图 3：第 5节中所考虑微观结构的一种实现。

## 5. 数值示例

注：以下数值示例可通过以下数据集复现，该数据集位于 Recherche Data Gouv开放数据存储库中（Brisard 等，2023a）。

本节考虑将基于 EIM 的方差缩减技术应用于由$N = 32$ 个圆形非均质体组成的二维随机组装体。调整正方形模拟盒的尺寸$L$ 和圆盘半径$a$，以确保非均质体的体积分数$f$ 达到指定值。

采用 Allen 和 Tildesley (1994年，第 4 章）所述的标准蒙特卡罗算法，生成下文中的所有微观结构。从居中的正方形正交晶格[1], 出发，模拟运行 100000 个周期（每个周期中，针对每个粒子提出一次试探移动）。每 50 个周期调整一次试探移动的随机幅度，以确保接受率约为 0.3：如果接受率过高（或过低），则将试探移动的幅度乘以 1.05（或 0.95）。随后对生成的微观结构进行网格划分（网格单元尺寸：$h \simeq a/8$），如图3所示。

基体的（各向同性）电导率为 $\sigma_0$。非均匀体的电导率为 $\chi\sigma_0$，其中 $\chi$ 表示对比度。我们采用第3节和第4节的理论推导，其中 $Q$ 中的每个圆形非均质体（连同其在 $\mathbb{R}^d$中的周期图像）代表一个相。有限元模拟所考虑的实现样本数为$M = 100$。EIM 模拟所考虑的实现样本数为 $\mathcal{M} = 10\,000$。

**注 8** （关于微观结构的周期性）。迄今为止所考虑的微观结构不一定具有周期性。事实上，统计体积单元（*SVE*）是所研究的随机非均质材料的无限实现样本在有限尺寸单胞 $Q$ 上的限制。因此，单胞 $Q$内的体积分数通常是一个随机变量，可能围绕其期望值波动。

先前的研究（*Legoll 和 Minvielle*，*2015a*；*Le Bris 等人*，*2016*）表明，这些波动确实是统计误差的主要来源，可将其用作控制变量（或分层准则），以有效降低方差。效率。

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Orthorhombic_crystal_system#2D_Bravais_lattices 2022 07 27 ，最后检索--。

本文旨在进一步探究与各相空间分布（而非单纯体积分数）相关的统计误差来源。为考察这些其他来源，我们固定所生成微观结构中的体积分数，从而消除由体积分数波动引起的表观电导率波动。最简单的做法是强制$Q$微观结构具有周期性，本文余下部分将一贯采用这一做法。换言之，下文讨论的所有微观结构在几何上都是周期性的。

**注释 9.** 我们再次指出，本研究不关注尺寸效应。此处考虑的集合可能不够大，无法准确估计电导率。不过，只要网格足够精细且实现样本数量足够多，就可以准确估计表观电导率的期望值 $\mathbb{E}[\sigma^{app}]$。我们发现，$N = 32$ 个非均匀体会产生足够复杂的相互作用和足够大的离散度，从而能够评估所提出的方差缩减技术的效率。

*5.1.* 弹性对比度的影响

本节中，我们选取较高的夹杂物体积分数，$f = 50\%$（对应于 $L/(2a) \simeq 7.08$），并研究对比度 $\chi$ 如何影响方差缩减的效率。为此，我们针对$\chi \in \{10^{-6}, 10^{-5}, \ldots, 10^{-1}, 10, \ldots, 10_5, 10^6\}$运行模拟。

图4 展示了在 $M = 100$ 次全场计算中，$\sigma_{11}$ 的 EIM估计值与同一数量的有限元法估计值之间的关系。更准确地说，$M = 100$次相对误差实现（相对于 $\mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{FEM}})$）

$$\varepsilon^{\star}(\omega) = \frac{\sigma_{11}^{\star}(\omega) - \mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{FEM}})}{\mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{FEM}})}, \tag{30}$$

其中 $\star$ 表示“有限元法”或“EIM”，结果见图 4。图中显示，有限元法与 EIM 的数值高度相关，因此预计所提出的方差缩减方法能够有效发挥作用。请注意，图 4 中所示的点云与第一平分线相距较远。换言之，EIM 对电导率的估计不准确。

图 5 展示了约化电导率的有限元法和 EIM估计值 $\sigma_{11}/\sigma_0$ 与对比度 $\chi$ 之间的关系（更准确地说，我们绘制了 $M$ 次——分别为 $\mathcal{M}$ 次——实现的经验均值，以及有限元法估计值和 EIM估计值各自的 99% 置信区间）。正如预期，$\sigma_{11}$

增加时 $\chi$ 增加。还可以观察到，EIM估计值的误差条明显小于有限元法估计值的误差条：这仅仅是因为前者基于数量多得多的实现次数（$\mathcal{M} = 10\,000 \gg M = 100$）计算得出，而后者则不是。如前所述，EIM无法很好地估计电导率（图5中的绿色和紫色曲线存在显著差异）。图 5 还展示了应用

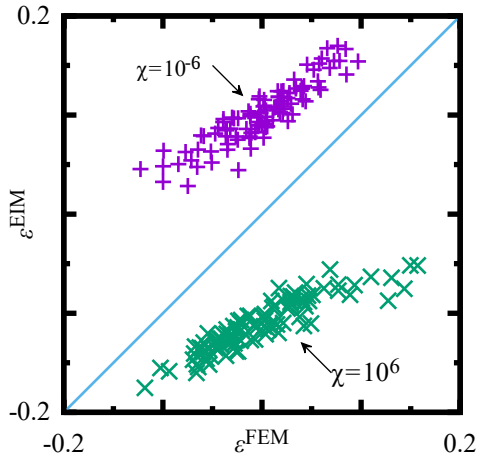


图4：绘制 $\varepsilon^{\mathrm{EIM}}(\omega)$ 随 $\varepsilon^{\mathrm{FEM}}(\omega)$ 的变化（这两个量由式（30）定义），取 $M = 100$ 次实现（考虑两种对比度：$\chi = 10^{-6}$ 和 $\chi = 10^6$）。

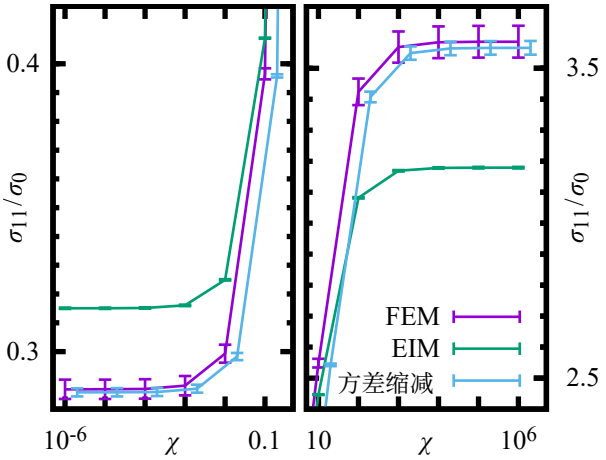


图5：对比度 $\chi$取不同值时，有限元法和 EIM 对约化电导率 $\sigma_{11}/\sigma_0$ 的估计值。对于有限元法曲线（分别为 EIM曲线），我们展示了经过$M$次（分别为 $\mathcal{M}$次）实现得到的经验均值及99% 置信区间（以误差条表示）。图中还展示了方差缩减后的数值（为清晰起见，后一条曲线略微向右偏移）。

所提出的方差缩减策略后得到的约化电导率数值估计值。显然，与原始误差条（紫色曲线）相比，由此得到的误差条（蓝色曲线）显著减小，从而在计算成本不变的情况下，能够更加准确地估计 $\mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{FEM}})$。

更具体地说，图 6展示了方差缩减技术相对于对比度 $\chi$（对于 $P = 1$、2 和 3）的效率指数（定义于第 2节末尾）。即使对于对比度很高的微观结构，标准差也显著降低了约 2.3 至 2.4 倍。这证明了所提出技术的价值。对于此处考虑的情形，效率指数似乎已在 $\chi \le 10^{-4}$（分别为 $\chi \ge 10^4$）的任意取值下达到平台，这一令人鼓舞的证据表明，即使对于比 $10^{-6}$更小的对比度（分别比 $10^6$更大的对比度），效率也可能保持在相同数量级。

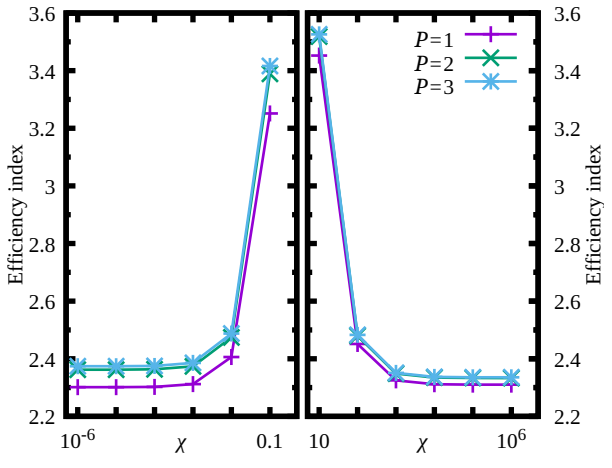


图 6：所提出的方差缩减技术的效率指标，作为对比度 $\chi$ 和截断参数 $P$的函数。

我们观察到，随着截断参数 $P$ 的增大，效率指数也随之增加。然而，当 $P = 3$时，改进几乎难以察觉，因此我们推荐取值 $P = 2$。我们还观察到，对于小于 1 的对比度，当 $\chi$ 趋近于 1（对于 $\chi > 1$同样如此）时，效率会提高。在极限 $\chi \to 1$下，EIM 和有限元法电导率的方差（沿用第 2 节的记号，分别记为 $\sigma_Y^2$ 和 $\sigma_X^2$）趋于 0（当 $\chi = 1$时，材料 simply 为均匀材料），约化变量 $\sigma_Z^2$ 的方差$Z$ 也趋于 0，而数值实验表明，效率指数 $\sigma_X/\sigma_Z$ 实际上会增加。

**注 10**。当 $\chi = 10^6$ 和 $P = 2$时，$\mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{EIM}}/\sigma_0)$ 以及 $\mathbb{E}(\sigma_{11}^{\mathrm{FEM}}/\sigma_0)$ 上的统计误差（对应于 99%置信区间）分别约为 0。0024 和 0。0514。效率指标约为2。333，变量 $\xi$ 的最优值为 $\xi^\star = 1$。8926。进行方差缩减后，$\sigma_{11}^{app}/\sigma_0$ 上的总误差（考虑到对 $\sigma_{11}^{\mathrm{EIM}}$的期望值所存在的不确定性）为

$$\frac{0.0514}{2.333} + 1.8926 \times 0.0024 = 0.0266,$$

从而得到有效的 效率指标0。0514/0。0266 = 1。93，略小于2。33。增大 $\mathcal{M}$ 将提高这一有效率指标。

### *5.2.* 应用于判别统计特性不同的微观结构

在本应用中，我们考虑三类圆盘排列。对于这三类排列，非均匀体总数均为 $N = 32$。它们覆盖了单位胞 $f = 40\%$ 的面积 $Q$。如表 1所示，这三种微观结构的区别在于两个非均匀体之间允许的最小间隙不同，范围从 0（非均匀体可以接触）到其半径的 23.6%（见图 7）。

三类夹杂物与之前一样，使用同一蒙特卡罗代码生成，初始非均匀体体积分数为$f' \geq f$（我们考虑半径稍大的$N = 32$ 个非均匀体$a'$）。平衡化后，

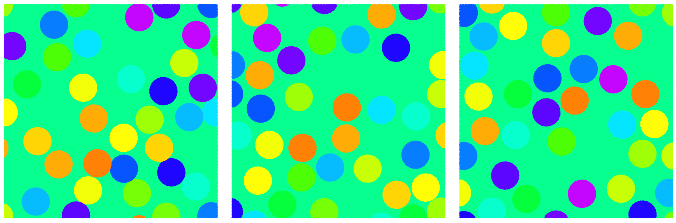

图 7：第 5.2 节中所考虑的微观结构示例。左：$g/a = 0$；中：$g/a = 0$。121；右：$g/a = 0$。236（回顾一下，$a$ 是非均匀体的半径，而 $g$ 是非均匀体之间的最小间隙）。

| $f'$ | $f$ | $a/a'$ | $g/a$ |
|---|---|---|---|
| 0.40 | 0.40 | 1.000 | 0.000 |
| 0.45 | 0.40 | 0.943 | 0.121 |
| 0.50 | 0.40 | 0.894 | 0.236 |

表1：第 5.2 节蒙特卡洛模拟的参数，其中符号含义如下：$f'$ 和 $f$ 分别表示初始和最终非均质体体积分数；$a'$ 和 $a$ 分别表示初始和最终半径；$g$ 表示圆盘之间的最小间隙。

将夹杂物的初始半径$a'$ 缩小至最终值$a$，以达到所需的体积分数$f$。最小允许间隙$g$ 由关系式 $2a' = 2a + g$定义。它对应于两个半径为$a$ 的非均匀体之间的间隙；若它们的半径等于$a'$，两者原本会彼此相切。

对比度设为 $\chi = 10^6$，并使用 $M = 10$有限元模拟估算微观结构的表观电导率（$M$ 在本应用中被特意保持为很低的值）。结果如图 8所示，可以观察到，误差条过大，无法判别三种类型的微观结构。随后应用基于EIM的方差缩减策略（其中 $\mathcal{M} = 10\,000$）。如图 8所示，方差缩减后即可进行判别：表观电导率 确实 取决于间隙，并且随着间隙增大而实际减小。

**注释11**。在本文中，尚未尝试优化用于评估替代模型系综平均值的实现样本数量 $\mathcal{M}$。此处选取的较大数值（$\mathcal{M}$ =10000）使得对 $\mathbb{E}(\sigma^{\mathrm{EIM}})$ 的评估具有非常小的统计误差。我们已经验证，尽管关注量的误差条会变大，但将 $\mathcal{M}$ 降低至 $\mathcal{M} = 100$ 仍然可以区分三个微结构族（见表2）。

| $f'$ | 下界 | 上界 |
|---|---|---|
| 0.40 | 2.563 | 2.701 |
| 0.45 | 2.467 | 2.525 |
| 0.50 | 2.425 | 2.426 |

表2：第,1×1分量表观电导率的99% 置信区间界限，针对第 $\mathcal{M} = 100$节中考虑的三种微观结构，且 $\mathcal{M} = 100$。表中数值计入了替代模型的统计误差。

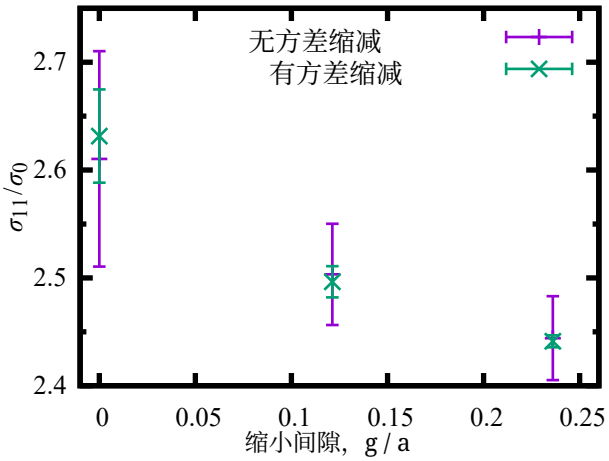


图8：对第 5.2 节所述微观结构的表观电导率 (1,1) 分量的估计值。未采用方差缩减（“w/o”）时，误差条非常大，以至于无法在统计上区分这三种微观结构。采用方差缩减策略（“w”）后，误差条足够小，使得置信区间不再重叠。

## 6. 结论

在线性电导框架下，我们提出了一种基于使用替代模型的方差缩减策略；此处的替代模型为等效夹杂法，用于估计宏观（表观）性质。该策略已在二维情形下针对圆盘集合进行了实施。即使基体-非均质电导率对比度较高（即 $10^6$ 和 $10^{-6}$），所提出的策略仍表现出非常令人满意的效果：其效率指标（用于量化计算成本恒定时的精度增益）始终高于2.2。这一点相当显著，因为众所周知，等效夹杂法对表观性质的估计较差（尤其是在高对比度和/或高体积分数情况下）。尽管如此，EIM方法似乎能够捕捉微观结构的一些显著特征，从而与真实表观电导率产生较高的相关性。

当前工作有若干值得探讨的方向。首先，这里提出的框架可以直接扩展到线性弹性问题：关于该情形下等效夹杂法的介绍，请参阅 Brisard 等 (2014年)。

其次，由于等效夹杂法与自洽聚类方法（Schnei-der, 2019年）之间存在相似性，因此，在微观结构并非由基本几何对象组装而成的情况下，也可以提出类似的方差缩减策略。此时必须采用基于快速傅里叶变换的（Moulinec 和 Suquet，1994 年，1998 年）全场方法。当然，这会增加降阶模型的成本（替代模型的一次评估大致相当于全场模拟的数次迭代），但该策略仍可能具有竞争力。同样，等效夹杂法与近期 To 等人（2016）；Nguyen 等人（2016）；To 等人（2017）的研究之间也存在深层联系，从方差缩减的角度对这些研究重新进行评估将很有意义。

最后，针对 Zecevic 和 Lebensohn（2021）提出的一个最新公式，我们提出了启发式修正。该公式（实际上是其修正公式）用于在考虑周期性边界条件时高效计算影响张量。我们数值研究了这一修正公式在方形单胞中嵌入圆形夹杂物情况下的有效性。将该修正推广到其他情形，并为修正公式给出数学证明，是另一个令人兴奋的研究方向。

### A. $H(\mathrm{div},Q)$ 空间

这里回顾一些关于 $H(\mathrm{div},Q)$ 空间的结果。对于 $\mathbb{R}^d$ 的任意有界域 $Q$，我们有

$$H(\mathrm{div},Q) := \left\{ v \in (L^2(Q))^d,\ \ \mathrm{div}\, v \in L^2(Q) \right\},$$

并且 $H(\mathrm{div},Q)$ 是一个希尔伯特空间。空间 $\left(C^\infty(Q)\right)^d$ 在 $H(\mathrm{div},\, Q)$ 中稠密。考虑法向迹应用

$$\gamma : \left\{ \begin{array}{ccc} \left(C^\infty(\overline{Q})\right)^d & \to & C^0(\partial Q) \\ v & \mapsto & (v\cdot n)|_{\partial Q} \end{array} \right. ,$$

其中，$n$ 表示 $\partial Q$ 的单位外法向量。应用 $\gamma$ 可以唯一地延拓为整个空间 $H(\mathrm{div},Q)$ 上的连续应用，这特别意味着，$v \in H(\mathrm{div},Q)$ 中任意场的法向迹 $v\cdot n$ 都是定义良好的。

### B. 傅里叶级数和傅里叶变换

这里定义周期函数的傅里叶变换约定。考虑一个 $Q$-周期张量场 $\mathbf{T}$，其分量在 $Q$ 上平方可积（回顾一下，$Q=(-L/2,L/2)^d$）。对于任意 $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d$，其傅里叶系数 $\widetilde{\mathbf{T}}_\mathbf{n}$ 定义为

$$\widetilde{\mathbf{T}}_\mathbf{n} = \frac{1}{|Q|}\int_Q \mathbf{T}(\mathbf{x})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}\mathbf{x}, \quad \text{with} \quad \mathbf{k}_\mathbf{n} = \frac{2\pi\,\mathbf{n}}{L}.$$

因此，合成公式为

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \widetilde{\mathbf{T}}_\mathbf{n}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}},$$

其中，上述右端是 $(L^2(Q))^{d\times d}$ 中的收敛级数。

### C. 等效夹杂方法的变分形式

将（13）乘以任意测试函数 $\mathbf{Q}$（一个分量平方可积的向量场），并对单胞取平均，可得到 Lippmann–Schwinger 方程（13）的弱形式，即下文的问题 3：

**问题 3。** 求 $\mathbf{P} \in (L^2(Q))^d$，使得对于任意 $\mathbf{Q} \in (L^2(Q))^d$，

$$\langle \mathbf{Q}\cdot(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}_0)^{-1}\,\mathbf{P}\rangle + \langle \mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{P})\rangle = \overline{\mathbf{E}}\cdot\langle\mathbf{Q}\rangle. \qquad \text{(C.1)}$$

注意，上述变分方程中的双线性型是对称的（格林算子 $\boldsymbol{\Gamma}_0$ 的对称性源于电导率张量的对称性 $\boldsymbol{\sigma}_0$）。可以直接研究（C.1）的适定性（无需利用 Lippmann–Schwinger 方程（13）与问题 1）的等价性）。此类研究（例如已由Bris- ard 和 Dormieux (2012); Schneider(2015)开展）为证明（C.1）的 Galerkin 离散化的适定性铺平了道路。

EIM 的变分形式源于对（C.1）进行 Galerkin 离散化，并采用各相内为常量的试验场和检验场：

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^{N} \chi_\alpha(\mathbf{x})\,\mathbf{P}_\alpha \quad \text{and} \quad \mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^{N} \chi_\alpha(\mathbf{x})\,\mathbf{Q}_\alpha, \quad \text{(C.2)}$$

其中 $\mathbf{P}_\alpha$、$\mathbf{Q}_\alpha \in \mathbb{R}^d$ 为常向量（注意，$\chi_\alpha$ 是相 $\alpha$的示性函数）。将（C.2）代入（C.1），并利用影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 的定义（16），可得到下述离散变分问题4 。

**问题 4**。 求 $\mathbf{P}_1, \ldots\ldots, \mathbf{P}_N \in \mathbb{R}^d$，使得对于任意 $\mathbf{Q}_1, \ldots\ldots, \mathbf{Q}_N \in \mathbb{R}^d$，

$$\sum_{\alpha=1}^{N} f_\alpha\,\mathbf{Q}_\alpha \cdot (\boldsymbol{\sigma}_\alpha - \boldsymbol{\sigma}_0)^{-1}\,\mathbf{P}_\alpha + \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} f_\alpha\,\mathbf{Q}_\alpha \cdot \boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\,\mathbf{P}_\beta = \sum_{\alpha=1}^{N} f_\alpha\,\overline{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{Q}_\alpha.$$

由于向量 $\mathbf{Q}_1, \ldots\ldots, \mathbf{Q}_N$ 是任意的，问题 4 便得到线性系统（15）。

## D. 关于影响张量（周期性边界条件）

这里推导周期性设置下两个非均匀体的影响张量表达式（18）。回顾影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 由（16）定义，首先注意到，由于$\boldsymbol{\Gamma}_0$ 是自伴的，有 $f_\alpha\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = f_\beta\,\boldsymbol{\Gamma}_{\beta\alpha}$，其中注意到$f_\alpha$ 表示非均质体 $\alpha$的体积分数。

当相 $\beta$ 受到恒定极化$\mathbf{P}_\beta$作用时，对于任意点 $\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \chi_\beta(\mathbf{x})\mathbf{P}_\beta$，我们有 $\mathbf{x} \in Q$。根据傅里叶空间中格林算子的表达式（10），可将任意点处的感应电场 $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\Gamma}_0(\chi_\beta\mathbf{P}_\beta)$ 表示为

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}}\,\exp(\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_\mathbf{n})\,\mathbf{P}_\beta,$$

其中，示性函数的傅里叶系数为$\widetilde{\chi}_{\beta,\,\mathbf{n}}$ 其定义见式（19）。

随后对相 $\alpha$进行上述表达式的平均。根据（16），可知，对于任意 $\mathbf{P}_\beta$，

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}\,\mathbf{P}_\beta = -|\Omega_\alpha \cap Q|^{-1} \int_Q \chi_\alpha(\mathbf{x})\,\mathbf{E}(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x},$$

由此可推得，注意到 $|\Omega_\alpha \cap Q| = f_\alpha\,|Q|$，有

$$f_\alpha\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = |Q|^{-1} \int_Q \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \chi_\alpha(\mathbf{x})\,\widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}}\,\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_\mathbf{n})\exp(\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}.$$

注意到式（19）中$\widetilde{\chi}_\alpha$的表达式$_\mathbf{n}$，即可重新得到方程（18）。

接下来，我们推导各向同性参考材料情况下影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta}$ 的迹的闭式表达式。由一般表达式（ 18 ），可推得

$$f_\alpha\ \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \widetilde{\chi}^*_{\alpha,\mathbf{n}}\,\widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}}\ \mathrm{tr}\left[\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k}_\mathbf{n})\right].$$

根据（11），对于任意 $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$，有 $\mathrm{tr}(\mathbf{0})\big] = 0$ 和 $\mathrm{tr}\big[\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}_0(\mathbf{k})\big] = \sigma_0^{-1}$。因此可推出

$$\sigma_0\,f_\alpha\ \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^d} \widetilde{\chi}^*_{\alpha,\mathbf{n}}\,\widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{n}} - \widetilde{\chi}^*_{\alpha,\mathbf{0}}\,\widetilde{\chi}_{\beta,\mathbf{0}}.$$

对第一项应用帕塞瓦尔定理，并注意到第二项中的$\widetilde{\chi}_{\alpha,\,\mathbf{0}} = \langle\chi_\alpha\rangle = f_\alpha$。由此得到

$$\sigma_0\,f_\alpha\ \mathrm{tr}\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = \langle\chi_\alpha\chi_\beta\rangle - f_\alpha\,f_\beta.$$

若 $\alpha \neq \beta$，区域 $\Omega_\alpha$ 和 $\Omega_\beta$ 互不重叠，且 $\langle\chi_\alpha\chi_\beta\rangle$ =0。若 $\alpha = \beta$，$\chi_\alpha\chi_\beta = \chi_\alpha$ 且 $\langle\chi_\alpha\chi_\beta\rangle = f_\alpha$。最终得到

$$\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha\beta} = \begin{cases} -f_\beta/\sigma_0 & \text{when } \alpha \neq \beta, \\ (1-f_\alpha)/\sigma_0 & \text{when } \alpha = \beta. \end{cases} \quad \text{(D.1)}$$

最后，我们考虑一个特殊情形：当$d = 2$，且相 $\alpha$ 占据一个圆盘 $\Omega_\alpha$，其中心为$\mathbf{x}_\alpha$，半径为$a_\alpha$。于是有

$$\begin{aligned}
\widetilde{\chi}_{\alpha,\mathbf{n}} &= |Q|^{-1} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha|\le a_\alpha} \exp(-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} \\
&= |Q|^{-1} \int_{|\mathbf{r}|\le a_\alpha} \exp(-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{x}_\alpha))\,\mathrm{d}\mathbf{r} \\
&= |Q|^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \int_{|\mathbf{r}|\le a_\alpha} \exp(-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r} \\
&= |Q|^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \int_0^{a_\alpha}\int_0^{2\pi} \exp(-\mathrm{i}\,k_\mathbf{n}\,r\cos\theta)\,r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}r \\
&= 2\pi\,|Q|^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \int_0^{a_\alpha} \mathrm{J}_0(k_\mathbf{n}\,r)\,r\,\mathrm{d}r \\
&= 2\pi\,k_\mathbf{n}^{-2}\,|Q|^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha} \int_0^{k_\mathbf{n}\,a_\alpha} \mathrm{J}_0(\xi)\,\xi\,\mathrm{d}\xi \\
&= 2\pi\,a_\alpha\,k_\mathbf{n}^{-1}\,|Q|^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}_\mathbf{n}\cdot\mathbf{x}_\alpha}\,\mathrm{J}_1(k_\mathbf{n}\,a_\alpha),
\end{aligned}$$

其中我们回顾，$k_\mathbf{n} = |\mathbf{k}_\mathbf{n}|$。在上述推导中，$\mathrm{J}_0$ 是第一类贝塞尔函数，定义为

$$\mathrm{J}_0(r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \exp(-\mathrm{i}\,r\sin\theta)\,\mathrm{d}\theta,$$

且 $\mathrm{J}_1$ 是由下式定义的第一类贝塞尔函数

$$\mathrm{J}_1(r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \exp(\mathrm{i}\,(\theta - r\sin\theta))\,\mathrm{d}\theta.$$

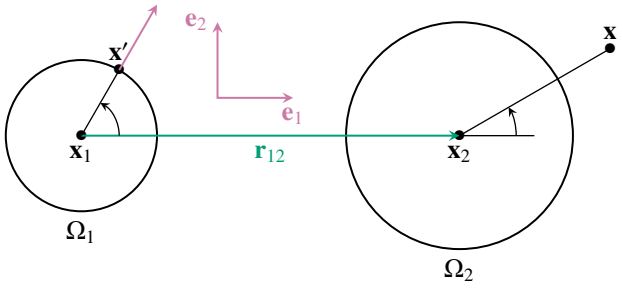


图 E.9：$\mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty}$推导的几何构型。

请注意，在上述推导中，我们使用了《数学函数数字图书馆》（Olver 等人，2022）中的公式 10.9.1 和 10.6.6。因此，我们得到了表达式（20）。

## E. 关于影响张量（无穷远处的边界条件）

在本附录中，我们将范围限定在二维构型，并推导两个圆形夹杂物 $\Omega_1$ 和 $\Omega_2$ 的影响张量 $\mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty}$ 的闭式表达式（定义见第 4.2 节，尤其参见式 (25)）。这两个圆形夹杂物的半径分别为 $a_1$ 和 $a_2$，，中心位于 $x_1$ 和 $x_2 = x_1 + r_{12}$（见图 E.9）。我们还推导自影响张量 $\mathbf{\Gamma}_{11}^{\infty}$ 的表达式。两个夹杂物 $\Omega_1$ 和 $\Omega_2$ 嵌入在电导率为 $\sigma_0 = \sigma_0 \mathbf{I}$ 的均匀、各向同性无限基体中。我们还假设两个夹杂物不发生重叠：$|r_{12}| \geq a_1 + a_2$。

### *E.1.* 解析解

夹杂 $\Omega_2$ 受到恒定极化 $\mathbf{P}$的作用。我们寻求在 $\Omega_1$ 中感生电场的（平均）值。因此，当前问题为（见式（21）–（24））

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^2, \tag{E.1}$$

$$\mathbf{J} = \sigma_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad \text{in } \Omega_2, \tag{E.2}$$

$$\mathbf{J} = \sigma_0 \mathbf{E} \quad \text{in } \mathbb{R}^2 \setminus \Omega_2, \tag{E.3}$$

$$\mathbf{E} = -\operatorname{\mathbf{grad}} \Phi \quad \text{in } \mathbb{R}^2. \tag{E.4}$$

边界条件体现在以下事实中：标量场 $\Phi$ （属于 $L^2\,\mathrm{loc}(\mathbb{R}^2)$）使得 E（因而 J）在 $\mathbb{R}^2$ 上的分量平方可积：$E \in (L^2(\mathbb{R}^2))^2$。引入中心间距 $r_{12} = |\mathbf{r}_{12}|$以及单位向量 $\mathbf{e}_1 = \mathbf{r}_{12}/r_{12}$ 和 $\mathbf{e}_2$，满足 $\angle(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = \pi/2$（见图 E.9），则问题 (E.1)–(E.4) 的解可在柱坐标 $(r, \theta)$ 中经典地求得，其中极点为 $x_2$，极轴为 $\mathbf{e}_1$:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_2 + r\cos\theta\,\mathbf{e}_1 + r\sin\theta\,\mathbf{e}_2.$$

所求的（除相差一个常数外唯一的）电势形式为

$$\Phi(\mathbf{x}) = f(r)\,\cos\theta + g(r)\,\sin\theta,$$

并且可以证明，$f$ 和 $g$ 都满足相同的微分方程，

$$r^2 f'' + r f' - f = 0 \quad \text{and} \quad r^2 g'' + r g' - g = 0,$$

当 $r \in (0, a_2)$ 以及当 $r \in (a_2, +\infty)$ 时。这意味着，在两个区间 $(0, a_2)$ 和 $(a_2, +\infty)$ 上，$f$ 和 $g$ 均为 $r$ 和 $1/r$ 的线性组合。由于 $\Phi$ 应当在原点邻域内平方可积，并且由于 $\nabla\Phi$ 应属于 $(L^2(\mathbb{R}^2 \setminus \Omega_2))^2$,，我们得到

$$f(r) = C_{f,\mathrm{int}}\,\frac{r}{a_2} \quad \text{on } (0, a_2), \qquad f(r) = C_{f,\mathrm{ext}}\,\frac{a_2}{r} \quad \text{on } (a_2, +\infty),$$

对于 $g$ 也是如此。积分常数 $C_{f,\mathrm{int}}$、$C_{f,\mathrm{ext}}$、$C_{g,\mathrm{int}}$ 以及 $C_{g,\mathrm{ext}}$ 和 $C_{g,\mathrm{ext}}$ 可由电势的连续性（这意味着 $C_{f,\mathrm{int}}$ 、$C_{f,\mathrm{ext}}$ 以及 $C_{g,\mathrm{int}}$ 、$C_{g,\mathrm{ext}}$）和径向通量的连续性确定，从而得到

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\sigma_0}\,\mathbf{P}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_2) & \text{if } |\mathbf{x}-\mathbf{x}_2| \leq a_2, \\ \dfrac{a_2^2}{2\sigma_0}\,\dfrac{\mathbf{P}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_2)}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_2|^2} & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{E.5}$$

接下来利用该表达式计算两个夹杂物上的平均电场。

### *E.2.* 影响张量 $\mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty}$的计算

根据定义，$\mathbf{P}$ 是夹杂物上电场 $\mathbf{E} = -\operatorname{\mathbf{grad}}\Phi$ 的平均值，其中夹杂物为 $\Omega_1$。由于夹杂物彼此不重叠，夹杂物 $\Omega_1$ 中的电势为（见（E.5））

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{a_2^2}{2\sigma_0}\,\frac{\mathbf{P}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_2)}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_2|^2}. \tag{E.6}$$

我们利用格林公式将 $\Omega_1$ 上的平均值转换为夹杂物边界上的积分：

$$\pi a_1^2\,\mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty}\,\mathbf{P} = \int_{\Omega_1} \operatorname{\mathbf{grad}}\Phi = \int_{\partial\Omega_1} \Phi(\mathbf{x}')\,\mathbf{n}_1(\mathbf{x}')\,\mathrm{d}s, \tag{E.7}$$

其中 $\mathbf{n}_1$ 表示 $\partial\Omega_1$ 的外单位法向量，且 $s$ 是沿边界 $\partial\Omega_1$测量的弧长。将 (E.6) 代入 (E.7)，可得

$$\mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty} = \frac{1}{2\pi\sigma_0}\,\frac{a_2^2}{a_1^2}\int_{\mathbf{x}'\in\partial\Omega_1} \mathbf{n}_1(\mathbf{x}') \otimes \frac{\mathbf{x}'-\mathbf{x}_2}{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}_2|^2}\,\mathrm{d}s.$$

上述积分在以$\mathbf{x}_1$ 为极点、以$\mathbf{e}_1$为极轴的极坐标中计算：

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}_1 + a_1(\cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2),$$

其中 $s = a_1\varphi$，且 $\mathbf{n}_1(\mathbf{x}') = \cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2$。于是

$$\mathbf{x}' - \mathbf{x}_2 = a_1(\cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2) - r_{12}\,\mathbf{e}_1$$

积分后可得

$$\begin{aligned} \mathbf{\Gamma}_{12}^{\infty} &= \frac{1}{2\pi\sigma_0}\,\frac{a_2^2}{a_1}\int_0^{2\pi} [\cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2] \\ &\qquad \otimes \frac{a_1(\cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2) - r_{12}\,\mathbf{e}_1}{\left|a_1(\cos\varphi\,\mathbf{e}_1 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_2) - r_{12}\,\mathbf{e}_1\right|^2}\,\mathrm{d}\varphi \\ &= \frac{1}{2\sigma_0}\,\frac{a_2^2}{r_{12}^2}\,(\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1), \end{aligned} \tag{E.8}$$

从而得到内禀表达式（26）。

| 符号 | 值 | 注释 |
|---|---|---|
| $L$ | 1.0 | 方形晶胞的尺寸 |
| $\sigma_0$ | 1.0 | 均匀电导率 |
| $\mathbf{x}_1$ | $(0.5L,\ 0.5L)$ | 圆盘1的中心 |
| $a_1$ | $0.35L$ | 圆盘1的半径 |
| $\mathbf{x}_2$ | $(0.1L,\ 0.06L)$ | 圆盘 2 的中心 |
| $a_2$ | $0.2L$ | 圆盘 2 的半径 |

表 F.3：用于对（29）进行数值验证的参数（见附录F）。

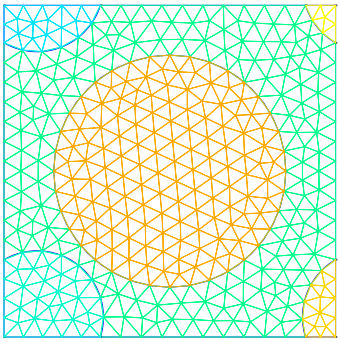

图 F.10：用于数值验证（29）的构型（见附录 F）。图示情况下的网格尺寸为$h = L/16$。

### *E.3.* 自影响张量的评估 $\boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{22}$

在夹杂$\Omega_2$, 内部，由（E.5）可知，电场为常数，其表达式为 $\mathbf{E} = -\mathbf{P}\,2\sigma_0$，这意味着——

$$\boldsymbol{\Gamma}^{\infty}_{22} = \frac{\mathbf{I}}{2\sigma_0}.$$

## F. 公式(29)的数值验证

注意：以下数值验证可根据 `Recherche Data Gouv`开放数据存储库（Brisard 等，2023b）中的数据集复现。

在关系式（29）中，我们对 27）的表达式提出了一个修正项。该表达式最初由 Zecevic 和 Lebensohn（2021）提出。该修正项的有效性尚未得到数学证明。不过，在本附录中，我们针对表 F.3所列的一组参数，对该公式进行了数值验证。所得构型如图 F.10所示。

通过有限元模拟评估（29）的左侧（“真实”周期影响张量），并逐步提高单元精细度（见图 F.10），从$L/4$ 到 $L/512$）。

待求解的变分问题为：求 $\Phi_i$，$i = 1,2$，使得对于所有 $\Psi$，

$$\int_Q \mathbf{grad}\,\Phi_i \cdot \mathbf{grad}\,\Psi = \int_{\Omega_2 \cap Q} \partial_i \Psi,$$

其中 $\Phi_1$、$\Phi_2$ 和 $\Psi$ 是 $Q$-周期的。然后计算 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的系数，结果如下：

$$\Gamma_{12,ji} = \mathbf{e}_j \cdot \boldsymbol{\Gamma}_{12}\,\mathbf{e}_i = \frac{1}{\sigma_0\,|\Omega_1|}\int_{\Omega_1} \partial_j \Phi_i.$$

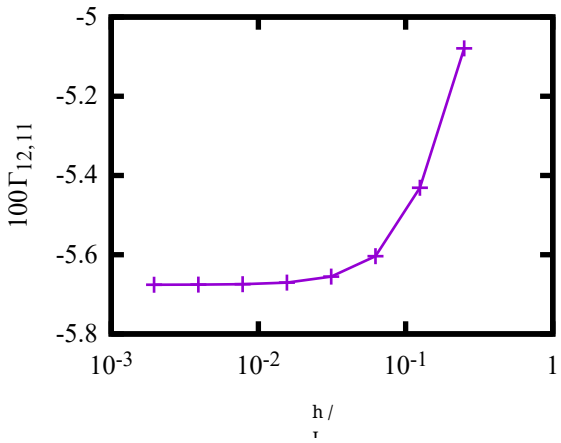


图 F.11：影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的 (1, 1) 系数的有限元近似与网格尺寸 $h$ 的关系。为便于观察，我们绘制 $100\,\Gamma_{12,}11$，而非 $\Gamma_{12,}11$。

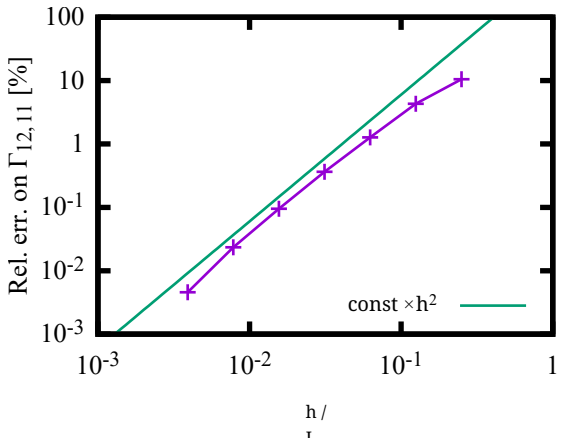


图 F.12：影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的 (1, 1) 系数的相对误差（通过有限元法计算）与网格尺寸 $h$ 的关系。直线表示收敛速率 $h^2$。

$\Gamma_{12,\ 11}$ 的取值绘于图 F.11 中，并以单元尺寸 $h$ 为横坐标。随着 $h \to 0$，似乎观察到了收敛性。图F.12进一步证实了这一点，该图表示$\Gamma_{12,\ 11}$的相对误差，定义为

$$\left|\frac{\Gamma_{12,11}(h) - \Gamma_{12,11}(h_{\min})}{\Gamma_{12,11}(h_{\min})}\right|,$$

其中，参考值取为此处所考虑的最细网格尺寸下的有限元结果，即 $h_{\min} = L/512$。该图清晰地显示了预期的 $h^2$ 收敛速率。

现转而考察式（29）右端（泊松求和）。利用式（$P$）对该右端在不同的 26 取值（范围为 2 至 4096）下进行估计。所得影响张量的 (1，1) 分量系数绘于图 F.13 中。同样地，当 $P \to +\infty$时，似乎观察到了收敛。这一点由图F.14得到证实，该图表示.....的相对误差

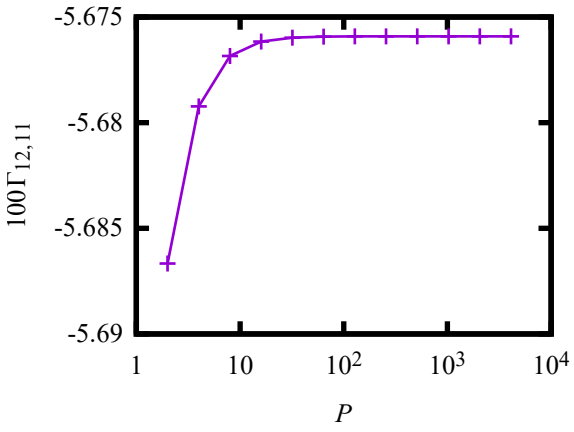


图 F.13：基于泊松求和公式计算的影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的 $(1,1)$ 系数估计值随截断参数 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的变化关系 $P$。与图 F.11 相同，为提高可见度，我们绘制 $100\,\Gamma_{12,}11$，而非 $\Gamma_{12,}11$。

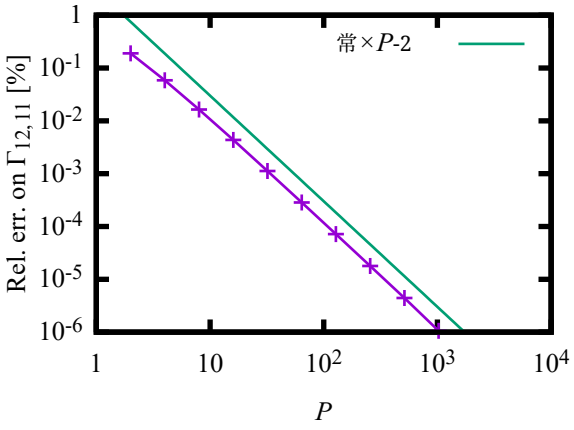


图 F.14：影响张量 $\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的 $(1,1)$ 系数的相对误差（通过泊松求和公式计算时）随截断参数 $P$ 的变化关系。直线表示收敛速率 $P^{-2}$。

$\Gamma_{12,\ 11}$，现定义为

$$\left|\frac{\Gamma_{12,11}(P)-\Gamma_{12,11}(P_{\max})}{\Gamma_{12,11}(P_{\max})}\right|,$$

其中，参考值取为此处考虑的最大 $P$ 值对应的截断和，即 $P_{\max}=4096$。截断和似乎按 $P^{-2}$ 收敛。

最小网格尺寸$h$ 下完整 $2\times2$ 基体$\boldsymbol{\Gamma}_{12}$ 的有限元法（分别为泊松）值（分别对应最大截断参数$P$）为

$$\boldsymbol{\Gamma}_{12}=\begin{bmatrix}-0.0567582 & -0.0113464\\ -0.0113464 & -0.0689035\end{bmatrix}\qquad\text{(FEM)},$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_{12}=\begin{bmatrix}-0.0567591 & -0.0113466\\ -0.0113466 & -0.0689045\end{bmatrix}\qquad\text{(Poisson)}.$$

两个结果高度吻合，这初步验证了所提出的修正公式（29）。


## 致谢

本研究得益于法国政府资助的 ANR-11-LABX-022-01 项目（Labex MMCD，即面向可持续建筑的材料多尺度建模与实验），该项目由 ANR 在“未来投资”国家计划框架内管理。


## 软件

全场模拟所需的网格由以下软件生成：`Gmsh` 软件（Geuzaine 和 Remacle，2009），使用 `Open-Cascade` 几何内核提供的构造几何基元[2]。所有有限元模拟均使用 `FreeFem++` 软件（Hecht，2012）。其他所有计算均使用 Julia 编程语言完成（Bezanson 等人，2017）。

## 参考文献


Allaire, G., 2002年。《基于均匀化方法的形状优化》。施普林格出版社。doi: 10.1007/978-1-4684-9286-6。Allen, M.P., Tildesley, D.J., 1994年。《液体的计算机模拟》。克拉伦登出版社，牛津。Anantharaman, A., Costaouec, R., Le Bris, C., Legoll, F., Thomines, F., 2011年。《数值随机均匀化导论及相关计算挑战：近期的一些进展》，载于：Bao, W., Du, Q.（编），《材料模拟的多尺度建模与分析》。World Sci. Publ.，哈肯萨克，新泽西州。数学科学研究所、新加坡国立大学《讲义系列》第22卷，*Lect. Notes Series, Institute for Mathematical Sciences, National University of Singapore*，第197–272页。doi: 10.1142/9789814360906_0004。Bensoussan, A., Lions, J.L., Papanicolaou, G., 1978年。《周期结构的渐近分析》。美国数学会。Bezanson, J., Edelman, A., Karpinski, S., Shah, V., 2017年。《Julia：数值计算的新方法》。SIAM评论 59, 65 98 10.1137/ –。doi: 。141000671

Blanc, X., Costaouec, R., Le Bris, C., Legoll, F., 2012a。《随机均匀化中的方差缩减：对偶变量技术》，载于：Engquist, B., Runborg, O., Tsai, R.（编），《多尺度计算的数值分析》。施普林格。*Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*第82卷，第47–70页。Blanc, X., Costaouec, R., Le Bris, C., Legoll, F., 2012b。《使用对偶变量进行随机均匀化中的方差缩减》。《Markov Process. Relat. Fields》18, 31–66页。（初步版本见 http://cermics.enpc.fr/~legoll/blanc_costaouec_lebris_legoll_MPRF_2012.pdf）。

Blanc, X., Le Bris, C., 2023年。《多尺度问题的均匀化理论》。《建模、仿真与应用》第21卷，施普林格。Blanc, X., Le Bris, C., Legoll, F., 2016。《数值随机均匀化中的若干方差缩减方法》。《Phil. Trans. R. Soc. A》374，20150168。doi:10.1098/rsta.2015.0168。Bourgeat, A., Piatnitski, A., 2004。《随机均匀化中有效系数的近似》。《Ann. I. H. Poincar´ 40, 153 165 10. e》– PR –。doi: 。1016/j.anihpb.2003.07.003 Brisard, S., Dormieux, L., 2012。《将Galerkin近似技术与Hashin和Shtrikman原理相结合，推导一种新的基于FFT的复合材料均匀化数值方法》。《Com- puter Methods in Applied Mechanics and Engineering》217–220, 197–212页。doi:10.1016/j.cma.2012.01.003。Brisard, S., Dormieux, L., Sab, K., 2014。《等效夹杂法用于数值均匀化的变分形式》。《国际固体与结构杂志》 51, 716 728 10.1016/j.ijsolstr.2013.10. –。doi: 。037


[2] https://dev.opencascade.org/，最后检索于2022年7月27日。

Brisard, S., Legoll, F., Bertin, M., 2023a。《基于等效夹杂法的数值随机均匀化方差缩减策略——补充数据》。doi:10.57745/QRTYI6。Brisard, S., Legoll, F., Bertin, M., 2023b。《通过泊松求和公式求取周期设置下两个圆盘的影响张量》。doi:10.57745/EKZGIL。Brisard, S., Schneider, M., Willot, F., 2022。《基于FFT的随机材料均匀化数值方法导论》。HAL预印本，见 https://hal.science/hal-03631887。Costaouec, R., Le Bris, C., Legoll, F., 2010。《随机均匀化中的方差缩减：使用对偶变量的概念验证》。《西班牙应用数学会公报》50，9–27页。doi:10.1007/BF03322539。Debye, P., Anderson, H.R., Brumberger, H., 1957。《非均匀固体的散射。II. 相关函数及其应用》。《应用物理学杂志》28，679–683页。doi:10.1063/1.1722830。Eshelby, J.D., 1957。《椭球夹杂弹性场的确定及相关问题》。《伦敦皇家学会会刊。A辑：数学与物理科学》241，376–396页。doi:10.1098/rspa.1957.0133。Fishman, G.S., 1996。《蒙特卡罗：概念、算法与应用》。施普林格。Geuzaine, C., Remacle, J.F., 2009。《Gmsh：具有内置前处理和后处理功能的三维有限元网格生成器》。《International Journal for Numerical Methods in Engineering》79，1309–1331页。doi:10.1002/nme.2579。Gloria, A., Otto, F., 2011。《离散椭圆方程随机均匀化中的最优方差估计》。《Ann. Prob.》39，779–856页。doi:10.1214/10-AOP571。Hashin, Z., Shtrikman, S., 1962a。《各向异性和非均匀弹性中的若干变分原理》。《固体力学与物理学杂志》10，335–342页。doi:10.1016/0022-5096(62)90004-2。Hashin, Z., Shtrikman, S., 1962b。《多晶体弹性行为理论的变分方法》。《固体力学与物理学杂志》10，343–352页。doi:10.1016/0022-5096(62)90005-4。Hecht, F., 2012。《FreeFem++的新发展》。《Journal of Numerical Math- ematics》20，251–265页。doi:10.1515/jnum-2012-0013。Jikov, V.V., Kozlov, S.M., Oleinik, O.A., 1994年。《微分算子与积分泛函的均匀化》。施普林格出版社，柏林—海德堡。doi:10.1007/978-3-642-84659-5。Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003年。《随机复合材料代表性体积单元尺寸的确定：统计与数值方法》。《国际固体与结构杂志》40，3647–3679页。doi:10.1016/S0020-7683(03)00143-4。Korringa, J., 1973。《非均匀介质弹性常数理论》。《数学物理学杂志》14，509–513页。doi:doi:10.1063/1.1666346。Kr¨oner, E., 1974。《关于自应力的物理学与数学》，载于：Zeman, J.L., Ziegler, F.（编），《应用连续介质力学专题》，施普林格出版社，维也纳，第22–38页。Le Bris, C., Legoll, F., 2017。《具有随机输入的椭圆型（可能为多尺度）PDE的计算方法示例》。《J. Comput. Phys.》328，455 473–。doi:10.1016/j.jcp.2016.10.027。Le Bris, C., Legoll, F., Minvielle, W., 2016。《特殊准随机结构：随机均匀化的筛选方法》。《蒙特卡罗方法与应用》22，25–54页。doi:10.1515/mcma-2016-0101。Legoll, F., Minvielle, W., 2015a。《基于缺陷型理论的控制变量法：随机均匀化中的方差缩减》。《多尺度建模与仿真》

13，519 550 10.1137/ –。140980120 doi:。Legoll, F., Minvielle, W., 2015b。《非线性凸随机均匀化问题中使用对偶变量的方差缩减》。《离散与连续动力系统：S辑》

8，1 27 10.3934/dcdss. –。2015.8.1 doi:。Milton, G.W., 2002。《复合材料理论》。《剑桥应用与计算数学专著》第6卷，剑桥大学出版社，剑桥；纽约。doi:10.1017/CBO9780511613357。Molinari, A., El Mouden, M., 1996。《有限浓度下弹性夹杂的问题》。《国际固体与结构杂志》33，3131–3150页。doi:10.1016/0020-7683(95)00275-8。Moschovidis, Z.A., Mura, T., 1975。《通过等效夹杂法研究双椭球非均匀体》。《应用力学杂志》42，847–852页。doi:10.1115/1.3423718。Moulinec, H., Suquet, P., 1994。《计算线

耳部及复合材料的非线性力学性质。《科学院学报》. S´erie II, M´ecanique, physique, chimie, astronomie 318，1417–1423。Moulinec, H., Suquet, P., 1998年。具有复杂微观结构的非线性复合材料整体响应计算数值方法。《计算力学与工程中的计算方法》

157，69 94 10.1016/ –。S0045-7825(97)00218-1 doi:。Nguyen, M.T., Monchiet, V., Bonnet, G., To, Q.D., 2016年。基于三体结构因子的球形颗粒悬浮液电导率估计。《物理评论E》93，022105。doi:10.1103/PhysRevE.93.022105。Nolen, J., 2014年。随机椭圆方程的正态逼近。《概率论及相关领域》159，661–700。doi:10.1007/s00440-013-0517-9。Olver, F.W.J., Daalhuis, A.B.O., Lozier, D.W., Schneider, B.I., Boisvert, R.F., Clark, C.W., Miller, B.R., Saunders, B.V., Cohl, H.S., McClain, M.A., 2022。NIST数学函数数字图书馆—1.1.5版。http://dlmf.nist.gov/。Ostoja-Starzewski, M., 2006年。材料空间随机性：从统计学到代表性体积单元。《概率工程力学》21，112 132–。doi:10.1016/j.probengmech.2005.07.007。Sab, K., 1992年。随机材料的均匀化与模拟。《欧洲力学杂志—A辑：固体》11，585–607。Sanchez-Hubert, J., Sanchez-Palencia, E., 1992年。渐近方法与均匀化导论。连续介质力学中的应用。Masson。Sanchez-Palencia, E., 1980年。《非均匀介质与振动理论》。《物理学讲义》第127卷，施普林格出版社，柏林、海德堡。doi:10.1007/3-540-10000-8。Schneider, M., 2015年。强非均匀介质中基于快速傅里叶变换的均匀化的收敛性。《数学方法与应用科学》

38，2761 2778 10. –。1002/mma.3259 doi:。Schneider, M., 2019年。小应变非线性材料自洽聚类分析的数学基础。《计算力学与工程中的计算方法》

354，783 801 10.1016/ –。j.cma.2019.06.003 doi:。To, Q.D., Bonnet, G., Hoang, D.H., 2016年。具有球形或椭球形夹杂的两相周期性复合材料的显式有效弹性张量。《国际固体与结构杂志》94–95，100–111。doi:10.1016/j.ijsolstr.2016.05.005。To, Q.D., Nguyen, M.T., Bonnet, G., Monchiet, V., To, V.T., 2017年。基于最优强对比展开的复合材料整体弹性性质。《国际固体与结构杂志》120，245–256。doi:10.1016/j.ijsolstr.2017.05.006。Zecevic, M., Lebensohn, R.A., 2021。使用数值积分在实空间中逼近周期性格林算子及其在基于快速傅里叶变换的微观力学模型中的应用。《国际工程数值方法杂志》122，7536–7552。doi:10.1002/nme.6841。Zeller, R., Dederichs, P.H., 1973年。多晶体的弹性常数。《固体物理学报（B辑）》55，831–842。doi:10.1002/pssb.2220550241。