晶体微观结构的数值计算 [1]

李治平
北京大学数学科学学院

摘要. 晶体微观结构是晶体材料在特定物理条件下其多个能量极小平衡态在空间形成的某种微尺度的规则分布。几何非线性的连续介质力学理论可以用能量极小化原理来解释晶体微观结构的形成，并用 Young 测度来刻划平衡态各变体在空间的概率分布。定性的理解与定量地分析和计算晶体材料的微观结构对于发展和改进高级晶体功能材料，如形状记忆合金、铁电体、磁至伸缩材料等，有重要的意义。本文回顾了近年来晶体微观结构数值计算方面的最新进展。介绍了计算晶体微观结构的几种数值方法及有关的数值分析结果。

1 引言

许多晶体材料，特别是一些被称之为"智能材料"的高级晶体功能材料，如形状记忆合金、铁电体、磁至伸缩材料等，在特定的物理条件下其分子在空间的分布具有高度的规则性，或者说某种对称性，并呈现出一些规则的微观结构，其尺度通常在 10^{-3}-10^{-9}mm 不等。这种规则性常常会随着环境因素，如温度、应力、磁场强度等的变化而变化。分子在空间分布的不同的对称性被称为是不同的相，对称性的改变称之为相变 (phase transition) 。当晶体材料发生由有较高对称性的相（奥氏体， austenite ）到有较低对称性的相（马氏体， martensite ）的相变时，有较低对称性的马氏体相会存在几种具有一定对称性相关的旋转不变的变体 (variant), 这些马氏体的变体会依据不同的环境在空间呈现出不同的规则性的分布。例如，马氏体的层状微观结构 (laminated microstructure) 。最简单的马氏体微观结构称为简单层状微观结构。在简单层状微观结构中，马氏体中的两种变体沿某一特定方向以极薄的平板的形式交替出现。层状微观结构也可以是嵌套的，即一层平板并不一定是一个马氏体的变体而是一个马氏体层状微观结构，如两阶层状微观结构中尺度量级较大的平板中是一个尺度量级较小的简单层状微观结构。由于马氏体各变体在空间的分布有相当大的自由度，因此在很小的外力作用下马氏体的各变体便会重新组合形成新的微观结构，从而产生宏观的大变形，而且这种大变形并不需要外力来维持。当

[1] 本课题为国家重点基础研究发展规划项目《大规模科学计算研究》 (G1999032804) 和教育部高等学校博士点基金资助项目。

环境变化，如温度升高，使晶体材料产生由马氏体到奥氏体的相变时，各变体之间的差异便不复存在，因此原来产生的宏观大形变也随之消失，物体又恢复到最初的形状。这就是所谓的形状记忆效应。

定性的理解与定量地分析和计算晶体材料的微观结构对于发展和改进高级晶体功能材料有重要的意义。由 Ball 和 James [1, 2] 提出的晶体微观结构的几何非线性连续介质力学理论用能量极小化原理来解释晶体微观结构的形成，并用 Young 测度来刻划平衡态各变体在空间的概率分布，为晶体微观结构的定量分析和计算奠定了理论基础。这一理论在数学上引入了以下能量泛函

$$F(u;\ \Omega) = \int_\Omega f(\nabla u(x))\, dx \tag{1.1}$$

在允许形变函数集合

$$\mathbf{U}(u_0;\ \Omega) = \{u \in W^{1,p}(\Omega; R^m) : u = u_0,\ \text{on } \partial\Omega_0\}, \tag{1.2}$$

上的最小值问题，其中 $\Omega \subset R^n$ 是具有 Lipschitz 连续边界 $\partial\Omega$ 的有界开集，$\partial\Omega_0$ 是 $\partial\Omega$ 的具有 $n-1$ 维正测度的子集， $f(\cdot)$ 是非拟凸的能量密度函数，$n \le p < \infty$ 。由于 $f(\cdot)$ 是非拟凸的，能量泛函 $F(u;\ \Omega)$ 关于 u 在 $W^{1,p}(\Omega; R^m)$ 中不具有弱下半连续性，因此以上问题一般没有解 [3]-[8] 。当解不存在时，能量泛函 $F(\cdot;\ \Omega)$ 在 $\mathbf{U}$ 中的极小化序列会呈现越来越细微的强烈振荡，其梯度取值将趋于一个特定的概率分布，即所谓 Young 测度 [1, 9] 。

关于马氏晶体的几何非线性连续介质理论可参见 Ericksen [10, 11, 12] 和 Ball , James [1, 2] 的工作。有关泛函的拟凸性、弱下半连续性等可参考 Morrey [3], Acerbi, Fusco [4], Dacorogna [5], Buttazzo [6], 和李治平 [7, 8] 的工作。关于 Young 测度及其在晶体微观结构中的应用可参见 Ball [9], Ball 和 James [1, 2], Kinderlehrer 和 Pedregal [13], Pedregal [14] 的工作。有关的文献还有很多，我们不准备一一列举。我们在这里只以一个简单的经典例子来说明一下有关解的不存在性、极小化序列和梯度 Young 测度的概念。

考虑积分泛函

$$I(u) = \int_0^1 [(u'(x))^2 - 1)^2 + u^4(x)]\, dx \tag{1.3}$$

在集合

$$\mathbf{A} = \{u \in W^{1,4}(0,\ 1) : u(0) = u(1) = 0\} \tag{1.4}$$

上的极小化问题。令

$$u_i(x) = \begin{cases} x - \frac{j}{i}, & x \in [\frac{j}{i},\ \frac{2j+1}{2i}),\ j = 0, 1, \cdots, i-1; \\ \frac{j}{i} - x, & x \in [\frac{2j-1}{2i},\ \frac{j}{i}),\ j = 1, 2, \cdots, i. \end{cases} \tag{1.5}$$

容易验证，序列 $\{u_i\}_{i=1}^{\infty} \subset \mathbf{A}$ ，且有

$$\lim_{i\to\infty} I(u_i) = 0. \tag{1.6}$$

另一方面，显然 $I(\cdot)$ 是非负的。所以，我们有

$$\inf_{u\in\mathbf{A}} I(u) = 0. \tag{1.7}$$

我们说不存在 $u \in \mathbf{A}$ 使得 $I(u) = 0$, 因为这意味着 u 满足互相矛盾的条件：在区间 $(0,\ 1)$ 上 $u(x) = 0$ 和 $|u'(x)| = 1$ 几乎处处同时成立。另一方面，我们有

$$u_i \rightharpoonup \bar{u} \equiv 0, \quad \text{在 } W^{1,4}(0,\ 1) \text{ 中}, \tag{1.8}$$

$$u_i' \to \nu_x(\lambda) \equiv \nu(\lambda) = \frac{1}{2}\delta_1(\lambda) + \delta_{-1}(\lambda), \quad \text{在测度的意义下}, \tag{1.9}$$

式中 $\rightharpoonup$ 代表弱收敛， $\delta_y(\lambda)$ 为集中在 y 点的 Dirac 测度。式 (1.8) 和 (1.9) 说明，极小化序列的弱极限为 $\bar{u} \equiv 0$, 而其梯度的 Young 测度是均匀的 (与 x 无关), 且以二分之一的概率取值 1 和 -1 。换句话说，极小化序列在取极限的过程中，其函数值在任一点的邻域内的平均值的极限为 $\bar{u}(x) \equiv 0$, 而其梯度在任一点的邻域内取值的极限概率分布为取值为 1 和 -1 的概率各占二分之一。注意到我们有

$$\begin{aligned}\int_0^1 \int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{u}(x), \lambda)\, d\nu_x(\lambda)\, dx &= \int_0^1 \frac{1}{2}(f(0,1) + f(0,-1))\, dx \\ &= \lim_{i\to\infty} I(u_i) = \inf_{\mu\in\mathbf{A}} I(u) = 0,\end{aligned} \tag{1.10}$$

其中 $f(u,v) = (v^2-1)^2 + u^4$ 是积分泛函 $I(\cdot)$ 的被积函数。正是在 (1.10) 的意义下，我们称极小化序列的弱极限 $\bar{u}(x)$ 和梯度 Young 测度 $\nu_x(\lambda)$ 为极小化问题 $\inf_{u\in\mathbf{A}} I(u)$ 的 Young 测度广义解。

对于这个极小化问题，我们还可以换一个角度来处理。令

$$Qf(u,v) = \begin{cases} (v^2-1)^2 + u^4, & \text{if } |\nu| \geq 1, \\ u^4, & \text{if } |v| < 1. \end{cases} \tag{1.11}$$

易见， $Qf(u,\cdot)$ 是 $f(u,\cdot)$ 的凸包。则 $\bar{u}(x) \equiv 0$ 是极小化问题

$$\inf_{u\in\mathbf{A}} QI(u) = \inf_{u\in\mathbf{A}} \int_0^1 Qf(u(x), u'(x))\, dx \tag{1.12}$$

的解，且有

$$\inf_{u\in\mathbf{A}} QI(u) = \inf_{u\in\mathbf{A}} I(u). \tag{1.13}$$

我们称极小化问题 (1.12) 为原极小化问题的松弛问题。松弛问题的解给出的是材料形变的平均场，或者说宏观的形变。 (1.13) 说明，我们可以通过求解松弛问题而得到原问题的极小值和极小化序列的弱极限。

除了能量泛函 $F(\cdot;\,\Omega)$ 在 $\mathbf{U}$ 中的极小化序列之外，其局部极小也具有十分重要的物理意义。事实上，物理上所观察到的马氏晶体通常是亚稳态的局部极小，并且在动力学行为上表现出滞后现象 [15, 16] 。

晶体微观结构问题在理论分析上的高度复杂性使得数值分析和计算成为了研究问题解的定量、乃至定性分析的重要工具。最初，经典的协调有限元方法和非协调有限元方法被应用于马氏晶体微观结构的几何非线性模型的数值计算（例如， Collins 和 Luskin [17], Collins, Luskin 和 Riordan [18], Collins [19], Klouček 和 M. Luskin [20], Nicolaides, Walkington 和 Wang [21] 等的工作）。同时，相应的数值分析结果也逐步地建立起来（例如， Collins, Kinderlehrer 和 Luskin [22], Chipot [23], Chipot 和 Collins [24], Gremaud [25], Chipot, Collins 和 Kinderlehrer [26], Luskin [27], Li 和 Luskin [28], Collins [29] ， Li 和 Luskin [30], Bělík 和 M. Luskin [31] 等的工作）。更多的相关结果及参考文献可以参阅 Luskin 在 1996 年就这一阶段的有关研究工作所写的一篇综述文章 [32] 。所得到的结果应该说是有喜有忧。喜的是，在理论上有限元解的存在性、收敛性、稳定性都得到了证明，同时得到了相应的误差估计；实际数值实验也取得了有物理意义的有限元解。忧的是，大量的数值实验证据和理论分析结果表明，有限元解强烈地依赖于网格剖分 [18, 32, 33], 网格剖分的 “污染” 会在有限元空间引入一些非物理的局部极小，更为严重的是有例子表明在应用经典的非协调有限元方法时可能会导致 “伪微观结构” [34] ；另外，误差分析的结果表明经典有限元方法，即便对简单的层状微观结构，逼近精度也可能会很差（例如，当网格尺度为 h 时，能量的逼近阶为 $O(h^{1/2})$, 各变体体积比的逼近阶为 $O(h^{1/16})$ ） [27, 28, 33] 。因此，研究更为有效的数值计算方法势在必行。

本文将分别在第二、三、四节中介绍以下三类方法： (i): 基于能量泛函凸化的方法； (ii): 基于网格变换的方法；和 (iii): 基于不连续有限元的方法。关于这些方法的研究对象，即晶体层状微观结构的物理背景和数学理论，Luskin 在其 1996 年的综述文章 [32] 中作了详细的介绍。读者也可以进一步参阅 Ball 和 James 的奠基性的工作 [1, 2] 。 本文将不涉及晶体微观结构的动力学问题 [15, 35, 20, 36, 37] 、带表面能的晶体微观结构问题 [38, 39] ，以及针状微观结构问题 [40, 41, 42] 的数值计算。对这些问题及其数值计算感兴趣的读者可参阅上面所列的参考文献。

2 基于能量泛函凸化的方法

在讨论基于能量泛函凸化的方法之前，我们先引入几种 “凸” 的定义 [5] 。

定义 2.1 函数 $f: R^{nm} \to R \cup \{+\infty\}$ 称为是凸 *(convex)* 的，若对任意 $\lambda \in [0,\ 1]$, $A,\ B \in R^{nm}$ 有

$$f(\lambda A + (1-\lambda)B) \le \lambda f(A) + (1-\lambda) f(B).$$

函数 $f : R^{nm} \to R \cup \{+\infty\}$ 称为是多凸 *(polyconvex)* 的，若存在凸函数 $g: R^{\tau(n,m)} \to R \cup \{+\infty\}$ 使得

$$f(A) = g(T(A)),$$

其中 $T(A) = (A, \operatorname{adj}_2 A, \ldots, \operatorname{adj}_{n\wedge m} A)$, $\operatorname{adj}_s A$ 是 A 的 s 阶子式。

Borel 可测局部可积的函数 $f: R^{nm} \to R \cup \{+\infty\}$ 称为是拟凸 *(quasiconvex)* 的, 若对任意的有界区域 $D \subset R^n$, 任意的 $A \in R^{nm}$ 和 $\varphi \in W_0^{1,\infty}(D;\ R \cup \{+\infty\})$ 有

$$f(A)\operatorname{meas}(D) \le \int_D f(A + \nabla\varphi(x))\, dx.$$

函数 $f: R^{nm} \to R \cup \{\infty\}$ 称为是秩一凸 *(rank-one convex)* 的，若对任意的 $\lambda \in [0,\ 1]$, $A,\ B \in R^{nm}$ 且 $rank(A-B) \le 1$ 有

$$f(\lambda A + (1-\lambda)B) \le \lambda f(A) + (1-\lambda) f(B).$$

我们有以下关系 [5]

凸 $\Rightarrow$ 多凸 $\Rightarrow$ 拟凸 $\Rightarrow$ 秩一凸。

当 $n = m = 1$ 时，以上几种“凸”性是等价的，而在一般情形它们则是不同的 [5, 47] 。

基于能量泛函凸化的方法是建立在以下事实基础上的 [5] ，首先在一定的增长性和强制性条件下我们有 (另见 [6, 43])

$$\begin{aligned} & \inf_{u\in U(u_0;\Omega)} CF(u;\ \Omega) \le \inf_{u\in U(u_0;\Omega)} PF(u;\ \Omega) \\ \le\ & \inf_{u\in U(u_0;\Omega)} QF(u;\ \Omega) = \inf_{u\in U(u_0;\Omega)} RF(u;\ \Omega) \\ =\ & \inf_{u\in U(u_0;\Omega)} F(u;\ \Omega), \end{aligned} \tag{2.1}$$

（相应的极小化问题记为 (CP), (PP), (QP), (RP) 和 (P) ）其中

$$\begin{aligned} CF(u;\ \Omega) &= \textstyle\int_\Omega Cf(\nabla u(x))\, dx, \quad & PF(u;\ \Omega) &= \int_\Omega Pf(\nabla u(x))\, dx, \\ QF(u;\ \Omega) &= \textstyle\int_\Omega Qf(\nabla u(x))\, dx, \quad & RF(u;\ \Omega) &= \int_\Omega Rf(\nabla u(x))\, dx, \end{aligned}$$

式中 Cf, Pf, Qf 和 Rf 分别是 f 的凸包，多凸包，拟凸包和秩一凸包。另外，我们还知道 $F(u;\ \Omega)$ 在 $U(u_0;\Omega)$ 中的每一个极小化序列在 $U(u_0;\Omega)$ 中的弱极限都是 $QF(u;\ \Omega)$ 在 $U(u_0;\Omega)$ 中的极小元，反之亦然。一般地说，问题 (P) 的解不存在，其极小化序列极度振荡；而问题 (QP) 在一定的增长性和强制性条件下有解 [1, 2, 3] 。问题 (QP) 的解不再是高度振荡的，它们反映了物理问题解的宏观性质。由 (2.1) 易知，若 u 是问题 (RP) 的解，则它也一定是问题 (QP) 的解。

虽然对一些有应用背景的特殊情况，可以给出拟凸包 Qf 的显式表达式（例如可参见 [44, 45] ）因而可以直接数值求解 (QP) 问题（例如可参见 [46] ），但是一般地说拟凸包 Qf 通常没有显式表达式，这是解 (QP) 问题的最大困难所在。为了克服这一困难，人们研究发展了若干数值方法。例如：将问题 (P) 和问题 (QP) 耦合，在细网格上计算问题 (P) 的高度振荡的极小化序列，再将其投影到粗网格上计算问题 (QP) 的近似解，通过两个问题在两个网格上的反复优化迭代最终同时得到问题 (P) 和问题 (QP) 的数值解 [48] ；利用问题 (P) 的极小化序列的梯度在测度意义下的弱极限是 Yong 测度这一事实，将允许函数集合扩大到概率测度空间（将 $\nabla u(x)$ 换为 R^{nm} 上的概率测度 ν_x ）并引入适当的约束（存在 $v \in U(u_0;\Omega)$ 使得 $\int_{R^{nm}} d\nu_x = \nabla v(x)$ ），然后对新问题进行离散化求解 [49]; 通过估算问题（ RP ）的上界和求解问题（ PP ）来估计问题（ QP ）的能量的上下界，特别是当问题（ RP ）的解有有限表示时其数值解可同时给出问题（ P ）和问题（ QP ）的近似解 [50, 51, 52, 53] ；等等。由于晶体微观结构，尤其是孪晶，通常是嵌套的层状微观结构，因此可以用有限阶的秩一联络来表示，其宏观性质则可以用相应的有限阶秩一凸包问题的解来刻划。所以有限阶秩一凸包的计算在晶体微观结构的计算中具有特殊的地位 [53] 。

作为基于能量泛函凸化的方法的一个典型例子，本节的以下部分我们就来介绍有限阶秩一凸包及其计算方法 (见 [53]) 。

设 $f: R^{mn} \to R^1 \cup \{+\infty\}$ 连续。

定义 2.2 令

$$R_1 f(A) = \inf\{\lambda f(A_0) + (1-\lambda) f(A_1) : \lambda \geq 0,$$
$$A = \lambda A_0 + (1-\lambda)A_1,\ \mathrm{rank}(A_0 - A_1) \leq 1\}, \qquad (2.2)$$

$$R_k f(A) = R_1(R_{k-1} f)(A), \quad k > 1. \qquad (2.3)$$

我们称 $R_k f$, $k = 1, 2, \ldots$, 为 f 的 k- 阶秩一凸包.

定义 2.3 $(\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2 \cdots i_k}, A_{i_1 i_2 \cdots i_k})$, $i_\nu \in \{0, 1\}$, $0 \leq \nu \leq k$ 称为是满足条件 (R_k) 的，如果 $\lambda_{i_1 \cdots i_\nu} \geq 0$ ， $\forall \nu = 1, \cdots, k$, $\lambda_0 + \lambda_1 = 1$, $\lambda_{i_1 \cdots i_{\nu-1} 0} + \lambda_{i_1 \cdots i_{\nu-1} 1} = 1$, $\forall \nu = 2, \cdots, k$ 且有

(i) $\mathrm{rank}(A_{i_1\cdots i_{k-1}0} - A_{i_1\cdots i_{k-1}1}) \le 1$,

(ii) 令 $A_{i_1\cdots i_\nu} = \lambda_{i_1\cdots i_\nu 0}A_{i_1\cdots i_\nu 0} + \lambda_{i_1\cdots i_\nu 1}A_{i_1\cdots i_\nu 1}$, 则有

$$\mathrm{rank}(A_{i_1\cdots i_{\nu-1}0} - A_{i_1\cdots i_{\nu-1}1}) \le 1,\ \forall \nu = k-1, \cdots, 2.$$

易于验证以下是有限阶秩一凸包的一个等价定义。

定义 2.4 $R_k f : R^{mn} \to R^1 \cup \{+\infty\}$ 称为是 f 的 k- 阶秩一凸包，如果

$$\begin{aligned} R_k f(A) = \inf\{ & \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1 i_2\cdots i_k} f(A_{i_1 i_2\cdots i_k}) : \\ & \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1 i_2\cdots i_k} A_{i_1 i_2\cdots i_k} = A, \\ & (\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2\cdots i_k}, A_{i_1 i_2\cdots i_k}) \text{ 满足条件 } (R_k)\}. \end{aligned} \tag{2.4}$$

在函数 f 及其有限阶秩一凸包 $R_k f$ 和秩一凸包 Rf 之间有以下关系 [53]

$$f \ge R_1 f \ge R_2 f \ge \cdots \ge R_k f \ge \cdots \ge Rf, \tag{2.5}$$

$$\lim_{k\to\infty} R_k f(A) = Rf(A),\ \forall A \in R^{mn}. \tag{2.6}$$

令

$$\begin{aligned} W_k(f) = \{A \in R^{mn} : A = & \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1 i_2\cdots i_k} A_{i_1 i_2\cdots i_k}, \\ & (\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2\cdots i_k}, A_{i_1 i_2\cdots i_k}) \text{ satisfy } (\mathrm{R}_k), \text{ and } f(A_{i_1 i_2\cdots i_k}) = \min_{B\in R^{mn}} f(B)\}. \end{aligned} \tag{2.7}$$

则 $W_k(f)$ 是集合 $\{C \in R^{mn} : f(C) = \min_{B\in R^{mn}} f(B)\}$ 的 k 阶秩一凸包。易证（见 [53] ）

$$R_k f(A) = \min_{B\in R^{mn}} f(B),\ \forall A \in W_k(f), \tag{2.8}$$

而且，若 $\lim_{||B||\to\infty} f(B) > \min_{B\in R^{mn}} f(B)$ 成立，则当 (2.8) 成立时必有 $A \in W_k(f)$.

定义 2.5 集合 $(\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2 \cdots i_k}, A_{i_1 i_2 \cdots i_k})$ 称为是 A 在 $W_k(f)$ 中的表示，如果 $(\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2 \cdots i_k}, A_{i_1 i_2 \cdots i_k})$ 满足 (R_k) 且有

(a) $A = \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1 i_2\cdots i_k} A_{i_1 i_2 \cdots i_k}$,

(b) $f(A_{i_1 i_2 \cdots i_k}) = \min_{B \in R^{mn}} f(B)$.

用 $R_k f$ 代替 f, 我们可以考虑原问题

$$\inf_{u \in \mathbf{U}(u_0,\,\Omega)} \int_\Omega f(\nabla u(x))\,dx \tag{2.9}$$

的以下形式的松弛问题

$$\inf_{u \in \mathbf{U}(u_0,\,\Omega)} \int_\Omega R_k f(\nabla u(x))\,dx. \tag{2.10}$$

一般地说，松弛问题 (2.10) 有比原问题 (2.9) 光滑的多的极小化序列。事实上，原问题 (2.9) 的极小化序列中对应于 k 阶及 k 阶以下的层状结构的振荡将会被磨光。例如，若我们取 $u_0(x) = A\,x$, 其中 $A \in W_k(f) \setminus W_{k-1}(f)$, 则原问题 (2.9) 无解，其高度振荡的极小化序列在 Young 测度意义下的极限是一个由 A 在 $W_k(f)$ 中的表示所刻划的 k 阶的层状结构，而 $u(x) = A\,x$ 是松弛问题 (2.10) 的解。在应用问题中许多材料微观结构由不高于 k 阶的局部层状结构构成，这样的微观结构对应于松弛问题 (2.10) 的光滑解，因此更适合于用数值方法求解。

在求解松弛问题 (2.10) 时，关键的一步是计算 $R_k f(\nabla u)$ 。由于 k 阶秩一凸包定义的复杂性，直接按定义计算困难较大。这里，我们介绍一种将 $R_k f(A)$, $A \in R^{mn}$ 的计算化为一个无约束极值问题的方法 [53] 。

设 $A \in R^{mn}$. 设 $(\lambda_{i_1}, \lambda_{i_1 i_2}, \ldots, \lambda_{i_1 i_2 \cdots i_k}, A_{i_1 i_2 \cdots i_k})$ 满足 (R_k) 且有

$$A = \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1 i_2\cdots i_k} A_{i_1 i_2 \cdots i_k}. \tag{2.11}$$

由定义 2.3, 我们有

$$A = \lambda_0 A_0 + \lambda_1 A_1, \ \ \mathrm{rank}(A_0 - A_1) \le 1, \ \ \lambda_0 \ge 0, \lambda_0 + \lambda_1 = 1. \tag{2.12}$$

于是，存在 $\theta_- \in S^{m-1}$, $\phi_- \in S^{n-1}$, $\gamma_- \in R^1$ 及 $\tau_- \in [0,\ \pi/2]$ 使 A_0, A_1 可以表示为

$$A_0 = A^0(A, \theta_-, \phi_-, \tau_-, \gamma_-) \equiv A + \gamma_- \sin^2(\tau_-)\,\phi_- \otimes \theta_-, \tag{2.13}$$

$$A_1 = A^1(A, \theta_-, \phi_-, \tau_-, \gamma_-) \equiv A - \gamma_- \cos^2(\tau_-)\, \phi_- \otimes \theta_-, \tag{2.14}$$

其中 $\tau_- = \arcsin(\sqrt{(\lambda_1)})$， S^{i-1} 是 R^i 中以 0 点为圆心的单位球面。同理，由于

$$A_{i_1\ldots i_\nu} = \lambda_{i_1\ldots i_\nu 0} A_{i_1\ldots i_\nu 0} + \lambda_{i_1\ldots i_\nu 1} A_{i_1\ldots i_\nu 1},$$

$$\text{rank}(A_{i_1\ldots i_{\nu-1}0} - A_{i_1\ldots i_{\nu-1}1}) \le 1,$$

$$\lambda_{i_1\ldots i_\nu} \ge 0,\ \ \lambda_{i_1\ldots i_{\nu-1}0} + \lambda_{i_1\ldots i_{\nu-1}1} = 1,$$

所以存在 $\phi_{i_1\ldots i_\nu} \in S^{m-1}$, $\theta_{i_1\ldots i_\nu} \in S^{n-1}$, $\gamma_{i_1\ldots i_\nu} \in R^1$ 及 $\tau_{i_1\ldots i_\nu} \in [0,\ \pi/2]$ 使得下列表达式成立（对比 (2.13), (2.14) ）

$$\begin{aligned} A_{i_1\ldots i_\nu 0} &= A^0(A_{i_1\ldots i_\nu}, \theta_{i_1\ldots i_\nu}, \phi_{i_1\ldots i_\nu}, \tau_{i_1\ldots i_\nu}, \gamma_{i_1\ldots i_\nu}), \\ A_{i_1\ldots i_\nu 1} &= A^1(A_{i_1\ldots i_\nu}, \theta_{i_1\ldots i_\nu}, \phi_{i_1\ldots i_\nu}, \tau_{i_1\ldots i_\nu}, \gamma_{i_1\ldots i_\nu}). \end{aligned}$$

因此， $A_{i_1\cdots i_k}$ 有以下表达式

$$A_{i_1\cdots i_k} = A + \sum_{j\in I_{i_1\cdots i_k}} \gamma_{j^-}((1-i(j))\sin^2(\tau_{j^-}) - i(j)\cos^2(\tau_{j^-}))\phi_{j^-} \otimes \theta_{j^-}, \tag{2.15}$$

其中 $I_{i_1\cdots i_k} = \{i_1, i_1 i_2, \ldots, i_1 i_2 \cdots i_k\}$ ，

$$i(j) = i_\nu, \quad \text{if } j = i_1 \cdots i_\nu, \tag{2.16}$$

$$j^- = \begin{cases} -, & \text{if } j = i_1, \\ i_1 \cdots i_{\nu-1}, & \text{if } j = i_1 \cdots i_\nu. \end{cases} \tag{2.17}$$

另一方面，设 $A_{i_1\cdots i_k}$ 由 (2.15) 定义，令

$$\lambda_j = (1 - i(j))\cos^2(\tau_{j^-}) - i(j)\sin^2(\tau_{j^-}),\ \ j \in I_{i_1\cdots i_k}, \tag{2.18}$$

则容易验证 $(i_1, i_1 i_2, \ldots, i_1 i_2 \cdots i_k, A_{i_1\cdots i_k})$ 满足 (R_k) 且 (2.11) 成立. 于是我们有以下定理:

定理 2.1 设 $A \in R^{mn}$. 设 $A_{i_1\cdots i_k}$ 和 λ_j, $j \in I_{i_1\cdots i_k}$ 分别由 (2.15) 和 (2.18) 定义. 则下式成立

$$R_k f(A) = \inf \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{1} \lambda_{i_1}\lambda_{i_1 i_2}\cdots\lambda_{i_1\cdots i_k} f(A_{i_1\cdots i_k}), \tag{2.19}$$

式中求下确界时变量的集合为 $\{(\theta_{j^-}, \phi_{j^-}, \tau_{j^-}, \gamma_{j^-}),\ j \in I_{i_1\cdots i_k}\}$ ，其中 $\theta_{j^-} \in S^{n-1}$, $\phi_{j^-} \in S^{m-1}$, $\tau_{j^-} \in [0,\ \pi/2]$ ， $\gamma_{j^-} \in R^1$.

由定理 2.1, $R_k f(A)$ 的计算可以通过求解 $(m+n)(2^k-1)$ 个变量的非线性无约束优化问题来实现。例如，一阶和二阶秩一凸包可分别由以下两式计算

$$R_1 f(A) = \inf\{\cos^2(\tau) f(A + \gamma\ \sin^2(\tau)\phi\otimes\theta) + \sin^2(\tau) f(A - \gamma\ \cos^2(\tau)\phi\otimes\theta)\}, \tag{2.20}$$

$$\begin{aligned} R_2 f(A) = \inf\{ & \cos^2(\tau_0)\cos^2(\tau) f(A + \gamma\ \sin^2(\tau)\phi\otimes\theta + \gamma_0\ \sin^2(\tau_0)\phi_0\otimes\theta_0) \\ & + \sin^2(\tau_0)\cos^2(\tau) f(A + \gamma\ \sin^2(\tau)\phi\otimes\theta - \gamma_0\ \cos^2(\tau_0)\phi_0\otimes\theta_0) \\ & + \cos^2(\tau_1)\sin^2(\tau) f(A - \gamma\ \cos^2(\tau)\phi\otimes\theta + \gamma_1\ \sin^2(\tau_1)\phi_1\otimes\theta_1) \\ & + \sin^2(\tau_1)\sin^2(\tau) f(A - \gamma\ \cos^2(\tau)\phi\otimes\theta - \gamma_1\ \cos^2(\tau_1)\phi_1\otimes\theta_1)\}. \end{aligned} \tag{2.21}$$

事实上，(2.15)-(2.19) 给出了 k 阶秩一凸包的等价定义。这不仅简化了计算, 而且, 在得到 $R_k f(A)$ 的值的同时, 得到了微观结构的一些重要的物理量。例如，θ 给出的是相应层状结构交界面的单位法向量，$\cos^2(\tau)$ 和 $\sin^2(\tau)$ 给出的是相应层状结构中相应变体所占体积的百分比，等等。用 k 阶秩一凸包算法计算 k 阶及 k 阶以下均匀分布的层状微观结构理论上可以达到任意精度，换句话说实际计算时可以达到机器允许的精度 [53] 。

3 基于网格变换的方法

在引言中我们曾提到，用有限元方法求解微观结构问题（见 (2.9) ）时，计算结果强烈地依赖于网格剖分，只有当层状微观结构的界面恰巧与一些网格剖分面重合时才可能得到较好的数值结果 [18, 32, 33] 。因此，要算好微观结构，网格剖分不应该是固定的，或者说网格剖分也应该是一个计算的对象。在这方面的第一个研究成果是旋转变换法 [54], 在此基础上很快又发展出了更为有效的网格变换法 [56] 和周期松弛法 [55] 。这些方法的基本思想是将网格的分布作为变量引入到能量泛函极小化的求解过程中，使得相应的网格面与微观结构的界面在计算过程中逐渐趋于一致。基于网格变换的方法不仅在计算简单层状微观结构方面取得了很好的效果，并且被有效地应用于计算针状微观结构 [42, 57, 58] 。

在本节以下部分我们就以周期松弛法 [55] 为例来介绍网格变换法。

我们考虑具有线性边界条件的非拟凸泛函的极小化问题

$$\inf_{u\in\mathbf{U}(A\,x,\,\Omega)} \int_\Omega f(\nabla u(x))\,dx, \tag{3.1}$$

其中 $A \in R^{mn}$. 该问题具有以下重要性质 (见 [5]) ：

(i) 极小值区域平均值的区域无关性：对于任何有界开集 Ω 和 Ω'

$$\frac{\inf_{u\in\mathbf{U}(A\,x,\,\Omega)}\int_\Omega f(\nabla u(x))\,dx}{\operatorname{meas}\Omega}=\frac{\inf_{u\in\mathbf{U}(A\,x,\,\Omega')}\int_{\Omega'} f(\nabla u(x))\,dx}{\operatorname{meas}\Omega'}. \tag{3.2}$$

(ii) Young 测度广义解的区域无关性：对于任何有界开集 Ω 和 Ω'，其相应问题的所有极小化序列在 Young 测度意义下的极限的集合是一致的。

(iii) 若 Ω 是周期区域，则问题的每一个 Young 测度广义解都存在一个与之对应的由周期函数构成的极小化序列。

周期松弛法充分利用了这些性质。

取标准的周期区域 $D=(-1,\,1)^n$ 作为计算区域。对任给的 $R\in SO(n)$，即行列式为 1 的 $n\times n$ 正交矩阵，定义

$$\begin{aligned}T(D;\ R)=\{&\text{bijections } L:\ D\to R(D): L(\partial D)=R(\partial D), L\in (W^{1,\infty}(D))^n,\\ &L^{-1}\in (W^{1,\infty}(R(D)))^n,\ \text{and}\ \det\nabla L>0, a.e. \text{ in } D\},\end{aligned}$$

$$T(D)=\{L\in T(D;\ R):\text{存在某个 } R\in SO(n)\}. \tag{3.3}$$

记 $\mathcal{T}_h$ 为 D 的网格尺度为 h 的正则剖分 [59]。令

$$T_h(D)=\{L\in T(D): L|_K \text{ 是仿射映射 } \forall K\in\mathcal{T}_h\}, \tag{3.4}$$

$$\mathbf{U}_h=\{u\in (C(\overline{D}))^m: u|_K \text{ 是仿射映射 } \forall K\in\mathcal{T}_h\}, \tag{3.5}$$

$$\mathbf{U}_h(A;D)=\{u\in\mathbf{U}_h: u|_{\partial D}=A\,x\}, \tag{3.6}$$

及

$$F(u,L;\ D)=\int_D f(A+\nabla u(x)(\nabla L(x))^{-1}))\det\nabla L(x)\,dx. \tag{3.7}$$

在网格变换法中，我们考虑求解如下的离散问题：

$$(MT)\qquad \begin{cases}\text{找 } (u,\,L)\in\mathbf{U}_h(0;\ D)\times T_h(D) \text{ 使其满足}\\ F(u,L;\ D)=\inf_{(u',L')\in\mathbf{U}_h(0;\,D)\times T_h(D)}F(u',L';\ D).\end{cases} \tag{3.8}$$

离散问题 (3.8) 实际上是在所有的可能的区域 $R(D)$, $\forall R\in SO(n)$, 和所有可能的有限元函数空间上寻找使泛函值达到极小的有限元函数。值得注意的是，尽管由性质 (i), (ii) 原问题的解与 R 和 L 的选取无关，但离散问题的解却会有本质的不同。

考虑到性质 (iii), 我们可以对离散问题 (3.8) 作进一步的改进。记 D 的 $n-1$ 维面为

$$S_i^{\pm}(D)=\{x=(x_1,\ldots,x_n)\in\partial D: x_i=\pm 1\},$$

记 D 的顶点集合为

$$V(D)=\{x=(x_1,\ldots,x_n)\in\partial D: x_i=\pm 1,\forall i\}.$$

我们称一个函数 $\phi:\bar{D}\to R^n$ 是周期的，并记其为 $\phi|_{S_i^+}=\phi|_{S_i^-},\forall i,$ 如果对所有的 $x\in S_i^+$ 和 $y\in S_i^-$ ，只要 $-1\le x_j=y_j\le 1,\ \forall j\ne i$ ，就有 $\phi(x)=\phi(y)$ 。

对任给的 $R\in SO(n)$ ，定义

$$\begin{aligned}P(D;\ R)=\{L\in(W^{1,\infty}(D))^n: L^{-1}\in(W^{1,\infty}(L(D)))^n \text{ and } \det\nabla L>0,\\ a.e. \text{ in } D,\ L(x)=R(x),\forall x\in V(D),(L-R)|_{S_i^+}=(L-R)|_{S_i^-},\forall i\},\end{aligned}$$

定义

$$P(D)=\{L\in P(D;\ R):\text{存在某个 } R\in SO(n)\}. \tag{3.9}$$

$$P_h(D)=\{L\in P(D): L|_K \text{ 是仿射映射 } \forall K\in\mathcal{T}_h\}, \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{U}}(A;D)=\{u\in W^{1,\infty}(D;\ R^m): u(x)=A\,x,\forall x\in V(D),\\ (u(x)-A\,x)|_{S_i^+(D)}=(u(x)-A\,x)|_{S_i^-(D)},\forall i\},\end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\tilde{\mathbf{U}}_h(A;D)=\mathbf{U}_h\cap\tilde{\mathbf{U}}(A;D). \tag{3.12}$$

在周期松弛法中，我们考虑的是如下的离散问题:

$$(PR)\quad\begin{cases}\text{找 } (u,\ L)\in\tilde{\mathbf{U}}_h(0;\ D)\times P_h(D) \text{ 使其满足}\\ F(u,L;\ D)=\inf_{(u',L')\in\tilde{\mathbf{U}}_h(0;\ D)\times P_h(D)}F(u',L';\ D).\end{cases} \tag{3.13}$$

容易看出, 周期松弛法与一般的网格变换法的区别在于映射 $L-R$ 和 $u(x)-A\,x$ 均为周期的。

利用性质 (i) 和 $\tilde{\mathbf{U}}(0;D)$ 中函数的周期性不难证明 [55]

引理 3.1 对任给 $L\in P(D)$, 记

$$\tilde{\mathbf{U}}(A;L,D)=\{\bar{u}\in W^{1,\infty}(L(D);\ R^m):$$

$$\bar{u}(x) = u(L^{-1}(x)) + A\,x,\ u \in \tilde{\mathbf{U}}(0; D)\}.$$

则有

$$\inf_{u \in \tilde{\mathbf{U}}(A;L,D)} \frac{1}{\mathrm{meas}(D)} F(u;\ L(D)) \le \inf_{u \in \mathbf{U}(A;\Omega)} \frac{1}{\mathrm{meas}(\Omega)} F(u;\ \Omega), \tag{3.14}$$

其中 $\mathrm{meas}(\cdot)$ 是 R^n 中的 *Lebesgue* 测度；且下式成立

$$\frac{1}{\mathrm{meas}(D)} \int_{L(D)} \nabla \bar{u}(x)\, dx = A, \quad \forall \bar{u} \in \tilde{\mathbf{U}}(A; L, D). \tag{3.15}$$

等式 (3.15) 说明问题 (3.13) 的解的梯度平均值为 A ，而这正是物理解的一个重要性质。应该指出，直接使用严格的 Dirichlet 边界条件也可以保证 (3.15) 成立，但由于边界层的出现大大影响了计算的精度，而使用惩罚型边界条件则通常不能保证 (3.15) 严格成立。

通过积分变量替换容易证明 [55]

引理 3.2 任给 $L \in P(D)$ 和 $u \in \tilde{\mathbf{U}}(0; D)$, 设 $\bar{u} : L(D) \to R^m$ 定义为

$$\bar{u}(L(x)) = u(x) + A\,L(x),\ \ \forall x \in D. \tag{3.16}$$

则， $\bar{u} \in \tilde{\mathbf{U}}(A; L, D)$ 且

$$F(\bar{u};\ L(D)) = F(u, L;\ D). \tag{3.17}$$

引理 3.2 说明离散问题 (3.13) 求解的实际上是对应于 $\Omega = L(D)$ 的原问题。因此，由性质 (i) 我们有 [55]

定理 3.1 任给 $L \in P(D)$, 我们有

$$\inf_{u \in \tilde{\mathbf{U}}(0;D)} \frac{1}{\mathrm{meas}(D)} F(u, L;\ D) = \inf_{u \in \mathbf{U}(A;\Omega)} \frac{1}{\mathrm{meas}(\Omega)} F(u;\ \Omega). \tag{3.18}$$

有关网格变换法和周期松弛法的收敛性分析证明，以及如何利用所得到的数值解构造原问题的极小化序列等，可参见 [56, 55] 。这里特别指出，用周期松弛法计算简单层状微观结构理论上可以达到任意精度，也就是说实际计算时可以达到机器允许的精度 [55] 。

4 基于不连续有限元的方法

避免有限元解的网格依赖性的另一种途径是采用不连续有限元 [33, 60] 。其基本思想是以下三点:

(1) 采用积分形式惩罚性边界条件以避免强制性边界条件对数值解的污染。

(2) 松弛单元之间的连续性限制，允许小跳跃的存在。

(3) 对层状结构及其层间界面过渡层采用不同量级的尺度控制。

第一和第二点实际上并非新的思想，问题在于如何掌握惩罚和松弛的度。例如，非协调有限元方法由于松弛过度而可能会计算出伪微观结构 [34] 。不连续有限元方法也会出现同样的问题 [60] 。因此，第三点中尺度量级的选取是至关重要的。如果所考虑的问题的边界条件是线性边界条件 $u_0(x) = A\,x$, 上述思想便引出如下的离散问题 [33, 60] :

$$\begin{cases} \text{找} u_h \in \mathcal{U}_h \equiv \prod_{K\in\mathcal{T}_h} \mathbf{P}_1(K) \text{ 使其满足} \\ F_h^\beta(u_h) = \inf_{v_h\in\mathcal{U}_h} F_h^\beta(v_h), \end{cases} \tag{4.1}$$

其中 $\mathcal{T}_h$ 是 $\Omega \subset R^n$ ($n=2$ 或 3) 的拟一致的三角剖分， $\mathcal{U}_h$ 是定义在 $\mathcal{T}_h$ 上的不连续分片线性有限元函数空间，常数 $\beta \in (0,\ 1)$, 能量泛函 $F_h^\beta(u_h)$ 由下式定义

$$\begin{aligned} F_h^\beta(u_h) \;=\; & \sum_{K\in\mathcal{T}_h} \int_K f(\nabla u_h)\,dx + \alpha_{11}\Big(\sum_{K\in\mathcal{T}_h} h^{1-\beta} \int_{\partial K} |[u_h](x)|\,ds\Big)^2 \\ & + \alpha_{12}\Big(\sum_{K\in\mathcal{T}_h} h^{1-\beta} \int_{\partial K} |[u_h](x)|^2\,ds\Big) \\ & + \alpha_2 \sum_{K\in\mathcal{T}_h} h^{2\beta} \int_{\partial K\cap\partial\Omega} |u_h(x) - A\,x|^2\,ds \\ & + \alpha_3 \sum_{K\in\mathcal{T}_h} h^{2\beta} \int_K |u_h(x) - A\,x|^2\,dx, \end{aligned} \tag{4.2}$$

其中 $\alpha_{11}, \alpha_{12}, \alpha_2,$ 和 α_3 为 $O(1)$ 量级的正常数。在计算简单层状微观结构时，通过能量泛函 $F_h^\beta(\cdot)$ 的极小化过程，层状结构的尺度将被控制在 $O(h^{1-\beta})$ 的量级，而层间界面过渡层的尺度将被控制在 $O(h)$ 的量级。数值分析的结果表明 $\beta = 1/2$ 时可以得到最优的误差估计。对于简单层状微观结构，我们有以下的逼近结果 [33, 60]

$$F_h^\beta(u_h) \le C\,h^2, \qquad \text{当 } \beta = \frac{1}{2} \text{ 时}, \tag{4.3}$$

其中 u_h 为离散问题 (4.1) 的解，C 是与 h 无关的常数，但一般依赖于参数 α_{11}, α_{12}, α_2, 和 α_3 的选取。而对于一般的协调或非协调有限元方法，设 u_h 为相应离散问题的解，则逼近结果为

$$F(u_h) \leq C\, h^{1/2}. \tag{4.4}$$

对其它有重要意义的物理量，逼近的阶都有相应的提高 [33, 60] 。由此可见，不连续有限元方法的确在相当程度上克服了网格依赖性，并因此提高了逼近精度。

5 讨论

一般地说，非拟凸泛函极小化问题的数值计算方法通常可以归为两大类。一类是基于泛函凸化的方法，包括多凸 (polyconvex) 化，拟凸 (quasiconvex) 化和第二节中介绍的秩一凸 (rank-one convex) 化 [5] ，也包括用梯度 Young 测度代替形变梯度的广义解方法 [14, 61, 62] 。泛函多凸化和秩一凸化后的计算结果一般给出的是原泛函极小值的下界和上界，在一些特殊应用中两者恰恰相同，或其中一个恰与拟凸化的结果相同，则可得到原泛函极小值。例如，对于嵌套的 k 层微观结构，用 k 阶秩一凸包算法即可得到原泛函极小值及其对应的微观结构。用梯度 Young 测度代替形变梯度的广义解方法被认为是理论上很有前景的方法，尽管目前，由于其在理论与算法方面遇到的困难，实际计算上取得的成效十分有限。另一类是直接法，即基于直接对能量泛函求极小的方法，如经典的协调和非协调有限元方法，以及第三、四节中介绍的网格变换法和不连续有限元方法等都属于直接法。从发展的角度来看，两类方法有交叉结合应用的趋势，例如论文 [48] 中的方法就是这样一种尝试，又如论文 [53] 中初步研究了将有限阶秩一凸包算法与周期松弛法结合计算晶体微观结构的方法。

以上所讲的主要是问题的离散化方法。问题离散化之后，往往得到的是一个有限维的非线性优化问题，而且常常希望找到近似的全局极小。因此，离散问题的求解也是一项极具挑战性的研究课题。目前，这方面的研究工作不多，除了模拟退火方法之外应用的一般都是局部极小化的方法。

参考文献

[1] J. M. Ball and R. D. James, *Fine phase mixtures as minimizers of energy*, **Arch. Rat. Mech. Anal., 100**(1987)1, pp. 13-52.

[2] J. M. Ball and R. D. James, *Proposed experimental test of a theory of fine microstructure and the two-well problem*, **Phil. Trans. R. Soc. London 338A**(1992), pp. 389-450.

[3] C. B. Morrey, **Multiple Integrals in the Calculus of Variations**, Springer, New York, 1966.

[4] E. Acerbi and N. Fusco, *Semicontinuity problems in the calculus of variations*, **Arch. Rat. Mech. Anal. 86**(1984), pp. 125-145.

[5] B. Dacorogna, **Direct Methods in the Calculus of Variations**, Applied Mathematical Sciences, 78, Springer-Verlag, Berlin, 1989.

[6] G. Buttazzo, **Semicontinuity, Relaxation and Integral Representation in the Calculus of Variations**, Pitman Research Notes in Mathematics Series 207. Longman, 1989.

[7] Z. -P. Li, *A theorem on lower semicontinuity of integral functionals*, **Proc. R. Soc. Edinburgh, 126A**, pp.363-374.

[8] Z. -P. Li, *Lower semicontinuity of multiple integrals and convergent integrands*, **ESAIM: Control, Optimi. Calculus Variat., 1** (1996), pp.169-189.

[9] J.M. Ball, *A version of the fundamental theorem for Young measures.* In **Partial Differential Equations and Continuum models of Phase Transitions**, Lecture Notes in Physics, No. 344, M. Rascle, D. Serre and M. Slemrod, eds., Springer-Verlag, New York (1989), pp. 207-215.

[10] J. Ericksen, *Constitutive theory for some constrained elastic crystals*, **J. Solids and Structures, 22**(1986), pp. 951-964.

[11] J. Ericksen, *Some constrained elastic crstals*, in **Material Instabilities in Continuum Mechanics and Related Problems** (J.M. Ball, ed.), Oxford Univesity Press, Oxford, pp. 119-137.

[12] J. Ericksen, *Twinning of crystals I*, in **Metastability and Incompletely Posed Problems** (S. Antman, J. Ericksen, D. Kinderlehrer and I. Müller, eds), Springer-Verlag, New York, pp. 77-96. IMA Volumes in Mathematics and Its Applications, vol. 3.

[13] D. Kinderlehrer and P. Pedregal, *Characterizations of gradient Young measures*, **Arch. Rat. Mech. Anal., 115**(1991), pp. 329-365.

[14] P. Pedregal, **Parameterized Measures and Variational Principles**, Birkhäuser, 1997.

[15] J.M. Ball, P. Holmes, R. James, R. Pego and P. Swart, *On the Dynamics of fine structures*, **J. Nonlinear Sci., 1**(1991), pp. 17-70.

[16] J.M. Ball, C. Chu and R. James, *Hysteresis during stress-induced variant rearrangement*, in **Proceedings of the International Conference on Martensitic Transformations**, 1995.

[17] C. Collins and M Luskin, *The computation of the austenitic-martensitic phase transition*, in **Partial Differential Equations and Continuum Models of Phase Transitions** Lecture Nodes in Physics, Vol. 344, M. Rascle, D. Serre and M. Slemrod, eds, Springer-Verlag, New York, (1989), pp. 34-50.

[18] C. Collins, M. Luskin and J. Riordan, *Computational results for a two-dimensional model of crystalline microstructure*, in **Microstructure and Phase Transitions**, IMA Volumes in Mathematics and Its Applications, Vol.54, J. Ericksen, R. James, D. Kinderlehrer and M. Luskin, eds, Springer-Verlag, New York, (1993), pp. 51-56.

[19] C. Collins, *Computation of twinning*, in **Microstructure and Phase Transitions**, IMA Volumes in Mathematics and Its Applications, Vol.54, J. Ericksen, R. James, D. Kinderlehrer and M. Luskin, eds, Springer-Verlag, New York, (1993), pp. 39-50.

[20] P. Klouček and M. Luskin, *The computation of the dynamics of martensitic microstructure*, **Continuum Mech. Thermodyn., 6**(1994), pp. 209-240.

[21] R. A. Nicolaides, N. Walkington and H. Wang, *Numerical methods for a non-convex optimization problem modeling martensitic microstructure*, **SIAM J. Sci. Comput., 18**(1997), pp. 1122-1141.

[22] C. Collins, D. Kinderlhrer and M. Luskin, *Numerical approximation of the solution of a variational problem with a double well potential*, **SIAM J. Numer. Anal., 28**(1991), pp. 321-332.

[23] M. Chipot, *Numerical analysis of oscillations in nonconvex problems*, **Numer. Math., 59**(1991), pp. 747-767.

[24] M. Chipot and C. Collins, *Numerical approximations in variational problems with potential wells*, **SIAM J. Numer. Anal., 29**(1992), pp. 1002-1019.

[25] P. Gremaud, *Numerical optimization and quasiconvexity*, **Euro. J. Appl. Math., 6**(1995), pp. 69-82.

[26] M. Chipot, C. Collins and D. Kinderlehrer, *Numerical analysis of oscillations in multiple well problems*, **Numer. Math., 70**(1995), pp. 259-282.

[27] M. Luskin, *Approximation of a laminated microstructure for a rotationally invariant double well energy density*, **Numer. Math., 75**(1996), pp. 205-221.

[28] B. Li and M. Luskin, *Finite element analysis of microstructure for the cubic to tetragonal transformation*, **SIAM J. Numer. Anal., 35**(1998), pp. 376-392.

[29] C. R. Collins, *Convergence of a reduced integration method for computing microstructures*, **SIAM J. Numer. Anal., 35**(1998), pp. 1271-1298.

[30] B. Li and M. Luskin, *Nonconforming finite element approximation of crystalline microstructure*, **Math. Comp., 67**(1998), pp. 917-946.

[31] P. Bělík and M. Luskin, *Stability of microstructure for tetragonal to monoclinic martensitic transformations.* **ESAIM: Math. Model Numer. Anal.,** (2000), pp. 663-685.

[32] M. Luskin, *On the computation of crystalline microstructure*, **Acta Numerica, 5**(1996), pp. 191-257.

[33] M.K. Gobbert and A. Prohl, *A comparison of classical and new finite element methods for the computation of laminated microstructure*, **Appl. Numer. Math. 36**(2001), pp.155-178.

[34] Z.-P. Li, *Laminated microstructure in a variational problem with a non-rank-one connected double well potential*, **J. Math. Anal. Appl., 217**(1998), pp. 490-500.

[35] P.J. Swart and P.J. Holmes, *Energy minimization and the formation of microstructure in dynamics anti-plane shear*, **Arch. Rat. Mech. Anal., 121**(1992), pp. 37-85.

[36] G. Friesecke and J.B. McLeod, *Dynamics as a mechanism preventing the formation of finer and finer microstructure*, **Arch. Rat. Mech. Anal., 131**(1996), pp. 199-247.

[37] R. Abeyaratne, C. Chu and R. D. James, *Kinetics of materials with wiggly energies: the evolution of twinning microstructure in a Cu-Al-Ni shape memory alloy.* **Phil. Mag. 73A** (1996), 457-497.

[38] P. Klouček and M. Luskin, *Computational modeling of the martensitic transformation with surface energy*, **Math. Comp. Modelling, 20**(1994), pp. 101-121.

[39] R.V. Kohn and Stefan Müller, *Surface energy and microstructure in coherent phase transitions.* **Comm. Pure Appl. Math., 47**(1994), 405-435.

[40] R.V. Kohn and Stefan Müller, *Branching of twins near an austenite-twinned-martensite interface.* **Phil. Mag., A 66**(1992), 697-715.

[41] B. Li and M. Luskin, *Theory and computation for the microstructure near the interface between twinned layers and a pure variant of martensite*, **Materials Sci. Eng., A-Struct, 275**(1999), pp. 237-240.

[42] Z.-P. Li, *Computations of needle-like microstructures.* To appear in **Appl. Numer. Math.**.

[43] Z.-P. Li, *An integral representation theorem for lower semicontinuous envelopes of integral functionals.* **Nonliear Analysis, 32**(4)(1998), pp.541-548.

[44] R. Kohn (1991), *The relaxation of a double-well energy.* **Contin. Mech. Thermodyn., 3**(1991), pp. 193-236.

[45] R. Kohn and G. Strang, *Optimal design and relaxation of variational problems, I and II.* **Comm. Pure Appl. Math., XXXIX**(1986), pp. 113-137 and 139-182.

[46] C. Carstensen and P. Plecháč, *Numerical analysis of compatible phase transitions in elastic solids.* **SIAM J. Numer. Anal., 37**(2000), pp. 2061-2081.

[47] V. Šverák, *Rank-one convexity does not imply quasiconvexity.* **Proc. Roy. Soc. Edinburgh, 120**(1992), pp. 185-189.

[48] Z.-P. Li, *Simultaneous numerical approximation of microstructures and relaxed minimizers.* **Numer. Math., 78**(1) (1997), pp.21-38.

[49] R. A. Nicolaides and N. Walkington, *Computation of microstructure utilizing Young measure representations.* **Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 4**(1993),pp. 457-462.

[50] G. Dolzmann and N. J. Walkington, *Bounds on the effective energy by rank-one convexification*, in **Enumath 97**, H. -G. Bock, F. Brezzi, R. Glowinski, G. Kanschat, Y. A. Kuznetsov, J. Périaux, R. Rannacher, eds., (1998), 270-277.

[51] G. Dolzmann, *Numerical computation of rank-one convex envelopes.* **SIAM J. Numer. Anal., 36**(1999), 1621-1635.

[52] G. Dolzmann and N. J. Walkington, *Estimates for numerical approximations of rank-one convex envelopes.* **Numer. Math., 85** (2000), pp. 647-663.

[53] Z.-P. Li, *Finite order rank-one convex envelopes and computation of microstructures with laminates in laminates.* **BIT, 40**(4)(2000), pp.745-761.

[54] Z.-P. Li, *Rotational transformation method and some numerical techniques for computing microstructures.* Math. Models Meth. Appl. Sci., 8(1998), pp. 985-1002.

[55] Z.-P. Li, *A periodic relaxation method for computing microstructures.* Appl. Numer. Math., 32(2000), pp. 291-303.

[56] Z.-P. Li, *A mesh transformation method for computing microstructures.* **Numer. Math.,** (2001), DOI: 10.1007/s002110100261.

[57] Z.-P. Li, *Mesh transformation and regularization in numerical simulation of austenitic-martensitic phase transition.* **Computational Materials Science 21** (2001), pp. 418-428.

[58] Z.-P. Li, *A numerical study on the scale of laminated microstructure with surface energy.* Research report No. 6, School of Mathematical Sciences and Institute of Mathematics, Peking University, 2001.

[59] P.G. Ciarlet, **The Finite Element Method for Elliptic Problems**. North-Holland, Amsterdam, 1978.

[60] M. K. Gobbert and A. Prohl, *A discontinuous finite element method for solving a multi-well problem.* **SIAM J Numer. Anal. 37**(1999), pp. 246-268.

[61] C. Carstensen and T. Roubíček, *Numerical approximation of young measures in non-convex variational problems.* **Numer. Math., 84**(2000), pp. 395-415.

[62] T. Roubíček, **Relaxation in Optimization Theory and Variational Calculus**. Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1997.