基于多重网格方法的若干多尺度算法研究

陈景润

摘要

多重网格方法是科学计算中一类重要的快速求解方法。本文可分成三个部分。首先，基于多重网格方法，我们提出了一种新的方法来求解分子静力学问题。该方法采用柯西－波恩弹性模型作为粗网格算子，柯西－波恩弹性态作为求解分子静力学问题的迭代初始点。通过对一维原子链的拉伸，三维铝原子系统的拉伸和剪切过程研究，我们发现新方法可以给出物理上有意义的局部极小态，具有最优的计算复杂度，且对初始点和迭代参数的选取不敏感。同时，我们还利用该方法研究了空位，位错对的剪切和纳米打压过程。此时最优的计算复杂度失去了，但是该方法给出的物理结果是令人满意的。其次，我们数值实现了求解带振荡系数非线性椭圆问题的异质多尺度有限元方法，并证明了单调情形下该方法的稳定性。同时我们还提出了基于多重网格方法的异质多尺度有限元方法来节约计算量。最后，我们研究了二维情形的拟连续方法。对于方形晶格平面型界面，三角形晶格平面型界面和带角型界面问题，我们分别给出了原始的拟连续方法，拟非局部的拟连续方法和基于力的拟连续方法能量和平衡方程的显式表达式。当势能函数取二次函数时，我们给出以上方法数值上的收敛阶。

关键词：多重网格方法，柯西－波恩法则，分子静力学，线性标度算法，异质多尺度方法，拟连续方法