拟连续体方法研究

崔珑

摘要

拟连续体方法是材料模拟中一种著名的多尺度方法，被广泛的用于材料缺陷等性质的模拟。本文主要关注拟连续体方法的精确性以及方法的稳定性，对高维中拟连续体模型进行了较为系统的研究。论文第一部分主要研究了三维拟连续体方法中鬼力对方法精度的影响，鬼力是两种耦合模型不相容的体现。我们定量刻画了面心立方(FCC) 晶格中鬼力的影响，并提出了一个易于进行理论分析的简化模型，从理论上分析了鬼力对简化模型位移以及位移梯度的影响。论文的第二部分我们研究了高维基于力场耦合的拟连续体方法的稳定性，对二维三角晶格带有截断势能的基于力场耦合的拟连续体方法的稳定性进行了检验，数值上研究了 FCC 晶格带有截断 glue 势的基于力场耦合的拟连续体方法的 H^2 稳定性。论文的第三部分我们研究了基于力场耦合的拟连续体方法数值求解中的预处理问题。对于一维拟连续体模型非一致网格离散的线性方程组的预处理问题，我们提出了一个有效的预处理矩阵，数值实验与理论分析证明了其有效性。对于二维基于力场耦合的拟连续体方法的预处理，在一致网格的情形中，我们也提出了一种有效并且实用的预处理方法，数值实验验证了方法的有效性。

关键词： 拟连续体方法，鬼力，稳定性，预处理