基于非嵌套网格的扩展子空间方法及其应用

赵刚

摘要

特征值问题和非线性方程是科学研究与工程计算的两个重要的问题，比如电子结构计算的 Kohn-Sham 方程、流体力学的 Navier-Stokes 方程，半导体计算的漂移扩散方程等。由于它们往往具有复杂的非线性而使得难于找到一个稳定、收敛性好、计算复杂度优的算法。本文主要研究建立基于非嵌套网格的扩展子空间算法，该方法源于林群和谢和虎于 2010 年提出的求解特征值问题和非线性问题的多水平校正法，它是基于一族嵌套网格，通过构造一个特殊的低维子空间，巧妙地将细网格上的特征值求解转化为细网格上的线性边值问题求解和低维子空间上特征值问题的求解，如此设计出具有一致收敛速度和最优复杂度的特征值算法。之前的多水平校正算法都是定义在嵌套网格上，这使得该方法不能与移动网格方法相结合来进一步提升求解效率。为了能将多水平校正算法应用于移动网格，本文提出基于非嵌套网格的扩展子空间算法，然后将该算法应用于求解带交界曲面的椭圆特征值问题，Bose-Einstein 凝聚的基态问题以及描述电子结构的 Kohn-Sham 方程。同时分析算法的收敛速度和计算复杂度以及粗网格的规模对它们的影响。

本文关注的非线性特征值问题主要是用于描述 Bose-Einstein 凝聚基态波函数的 Gross-Pitaevskii 方程和描述电子结构的 Kohn-Sham 方程。对于非线性项是多项式类型的 Gross-Pitaevskii 方程，针对其非线性项具有的特殊形式，采用非嵌套网格的扩展子空间方法并结合移动网格自适应进行高效求解。实验表明：与一般的移动网格有限元方法相比，在保证能量精度的前提下，该算法有 $6-9$ 倍的速度提升。对于非线性项形式较复杂的 Kohn-Sham 方程，一般采用自洽场迭代进行求解。由于其具有非线性较强的 Hartree 项和非线性相对较弱的交换关联项，复杂的非线性往往使得自洽场迭代的收敛速度很慢，且每次迭代都要求解一个规模较大的线性特征值问题，这使得求解效率和精度往往比较低。为此，我们将利用三维移动网格自适应来产生非嵌套网格，并将基于此非嵌套网格的扩展子空间方法用于高效求解 Kohn-Sham 方程。实验表明：与一般的移动网格有限元方法相比，该算法在保证能量精度的前提下，计算效率同样也得到了明显提升。此外，我们提出的非嵌套扩展子空间算法亦具有良好的并行可扩展性。本文最重要的研究目的是：将多水平校正算法应用于移动网格上，即提出非嵌套网格的扩展子空间算法及其应用。

关键词：多水平校正，非嵌套扩展子空间，移动网格自适应，带交界曲面的椭圆特征值问题，Gross-Pitaevskii 方程，Kohn-Sham 方程。