

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2017.05.001

基于能量多体作用的原子/连续耦合方法的后验误差估计

何杰, 王皓, 胡兵, 刘少晖
(四川大学数学学院, 成都 610064)

摘要: 本文研究了一维情形下基于能量多体作用的原子/连续耦合方法的后验误差估计. 基于理论结果, 本文设计了一个不依赖于原子节点的自适应网格加密算法. 实验结果显示该算法是有效的.

关键词: 原子/连续耦合方法; 粗粒化; 后验误差估计; 自适应算法

中图分类号: O241.82 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2017)05-0895-10

Posteriori error estimate for energy-based atomistic/continuum method for multi-body interaction systems

HE Jie¹, WANG Hao¹, HU Bing¹, LIU Shao-Hui¹
(College of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: We derive a posterior error estimate for an energy-based atomistic/continuum method for a one-dimensional periodic chain with multi-body interactions. The estimator extends the known results by eliminating the requirement computational nodes in the continuum region coincide with the lattice sites and providing a thorough stability analysis. Based on the estimator, we design an adaptive refinement algorithm which produces the optimal convergence rate. We also numerically show that the error estimator is efficient.

Keywords: Atomistic/continuum coupling method; Coarse-graining; Posteriori error analysis; Adaptive algorithm
(2010 MSC 65M12)

1 引言

晶体的晶界、裂缝、位错等缺点如何影响材料的弹性、塑性、断层等性能是计算材料学家研究的重要问题. 原子核模拟^[1]为研究这些问题提供了有效的途径, 但原子核模拟的计算代价太大, 不具有实用性. 连续模拟能减少计算代价, 但精度又不高.

原子/连续耦合方法^[2]则既能保证计算精度, 又能减少计算代价. 基于文献[2]的一系列研究, 文献[3]得到了原子核模拟边界条件, 文献[4]首次将原子/连续耦合方法应用于实际, 文献[5-7]用有限元方法进行数值求解, 文献[8-11]研究了拟连续逼近方法, 并得到了不同形式的后验误差估计. 此外, Amelang^[12]的博士论文研究了在交界面区域自适

收稿日期: 2017-04-06

基金项目: 国家自然科学基金(11501389)

作者简介: 何杰(1991-), 男, 四川自贡人, 硕士, 主要研究方向计算数学. E-mail: 843662160@qq.com

通讯作者: 王皓. E-mail: Wanhg@scu.edu.cn

应网格的划分格式.

上述文献在应用原子连续耦合方法时,所采用的能量形式是两个原子之间的作用(即对势).这种能量形式并不能精确地刻画原子之间相互作用的真实情况.本文考虑多体作用问题,能量形式采用多个原子之间的相互作用.其优点是更加接近原子相互作用的真实情况.与之前的工作相比,我们的工作拓展了基于两个原子相互作用能量形式所分析的结果,且使得后验误差分析所得到的结果更加完整.借助文献[13,14]的思想,本文得到了本文原子/连续耦合方法的稳定性.

本文的内容安排如下:在第二节中,我们介绍一维情形下多体系统的原子模型和连续模型及原子/连续耦合方法.第三节给出了多体作用下原子连续耦合方法的残量形式,包括外部误差和内部误差两部分,并将内部误差粗粒化.在第四节中,我们研究并证明了原子/连续耦合方法的稳定性.在第五节中,我们基于残量和稳定性分析进一步得到了后验误差估计子.在第六节中我们设计了自适应算法,并利用数值试验结果表明本文得到的算法是有效的.

2 模型及原子/连续耦合方法

2.1 原子模型能量

本小节主要介绍有关原子模型的一些简单定义.首先定义参考状态

$$\epsilon Z = \{\epsilon\xi : \xi \in Z, Z \subset \mathbf{N}\},$$

这里 $\epsilon = 1/2L$ 代表的是每一个参考单元的长度.当考虑一维原子模型时,假设原子链是呈周期变化的,且每一个周期有 $2L$ 个原子中的元素.用 $\bar{L} := \{-L+1, -L+2, \dots, L-1, L\}$ 表示每一个原子节点.令外力 $F \in (0, +\infty)$, 外力和形变 y 的作用关系为 $y_\xi^F = F\epsilon\xi$. 定义位移空间为

$$U = \{u : Z \rightarrow \mathbf{R}^Z, v_{\xi+2L} = v_\xi; \sum_{\xi=-L+1}^L v_\xi = 0\},$$

其中 \mathbf{R} 代表实数.定义形变空间为

$$Y^\epsilon = \{y : Z \rightarrow \mathbf{R}^Z : y_\xi = \epsilon F\xi + v_\xi, v \in U\}.$$

接下来定义差分算子

$$D_1 y_\xi = \frac{y_{\xi+1} - y_\xi}{\epsilon}, D_2 y_\xi = \frac{y_{\xi+2} - y_\xi}{\epsilon},$$

$$D_3 y_\xi = \frac{y_\xi - y_{\xi-1}}{\epsilon}, D_4 y_\xi = \frac{y_\xi - y_{\xi-2}}{\epsilon}.$$

令 $Dy_\xi = (D_j y_\xi)_1$. 假设 U^* 是 U 的对偶空间,定义

U 空间的内积为

$$\langle v, w \rangle = \epsilon \sum_{\xi=1}^L v_\xi w_\xi.$$

在满足 Cauchy-Born 能量形式的前提下,定义原子能量模型为

$$V(Dy_\xi) = V^a(D_1 y_\xi, D_2 y_\xi, D_3 y_\xi, D_4 y_\xi),$$

这里 $V^a \in C^3((0, +\infty)^4 \mathbf{R}^{+4})$. 定义一个周期内原子链所具有的内能为

$$\Psi^a(y) = \epsilon \sum_{\xi=-L+1}^L V(Dy_\xi) \tag{1}$$

并假设一个呈周期变化的净电荷外力 $f \in U$. 外力做功所产生的能量为 $-\langle f, y \rangle_\epsilon$, 这里

$$-\langle f, y \rangle_\epsilon = -\epsilon \sum_{\xi=-L+1}^L f_\xi y_\xi.$$

综上,可以得到一个周期内原子模型的总能量为

$$E^a(y) = \Psi^a - \langle f, y \rangle_\epsilon \tag{2}$$

令方程(2)的局部最优解为 y^a , 满足方程

$$y^a \in \operatorname{argmin}\{E^a(y)\} \tag{3}$$

这里 argmin 表示局部最优算子. 假设 $\delta\Psi^a$ 是 Ψ^a 的一阶变分, $\delta^2\Psi^a$ 是 Ψ^a 的二阶变分. 如果 $\delta^2\Psi^a[u, u] > 0$, 根据文献[20]的结论可知 $y \in Y^\epsilon$ 是问题(3)的强稳定解.

注 1 (1) 如果形变 $y \in Y^\epsilon$, 则能量 E^a 是每一个原子所储存的能量的叠加, 而不是相邻原子以及次相邻原子的相互作用所产生的能量的叠加, 可以注意到能量泛函 $V : \mathbf{R}^4(0, +\infty) \rightarrow \mathbf{R}$ 是非线性的. (2) 显然, 每个晶格长度 ϵ 是固定的. (3) 注意 $D_j y_\xi$, 其中 $j = 1, 3$ 分别代表向前差分和向后差分, 并且代表的是相邻原子的差分关系. 同样, $D_j y_\xi$, $j = 2, 4$ 分别代表的是次相邻原子之间的差分关系.

2.2 Cauchy-Born 能量逼近

首先将原子模型本地化. 定义满足 Cauchy-Born 能量原则的每一个原子的能量为

$$V^c(Dy_\xi) = V(D_1 y_\xi, 2D_1 y_\xi, D_3 y_\xi, 2D_3 y_\xi).$$

则一个周期内原子链的内能为

$$\Psi^c(y) = \sum_{\xi=-L+1}^L V^c(Dy_\xi).$$

应用 Cauchy-Born 元逼近得到, $\forall y \in W^{1,\infty}(0, +\infty)$, 有

$$V^c(y) = \int_{[0,1]} W(y') dx,$$

这里能量密度函数 $W(F) = V(F, 2F, -F, -2F)$

且满足 $W(F) \in C^3(0, +\infty)$. 则在一个周期内, 基于 Cauchy-Born 能量逼近的连模型的总能为

$$E^c = \Psi^c - \langle f, y \rangle_\varepsilon \quad (4)$$

假设 y^c 是满足方程(4)的局部最优解, 即

$$y^c \in \operatorname{argmin}\{E^c(y)\}.$$

2.3 多体作用的原子/连续耦合方法

基于式(2)的模拟方法称为原子核模拟方法, 该方法计算代价大. 基于式(4)称为连续模拟方法, 该方法计算精度不高. 而文献[2]中提到的原子/连续耦合方法则既能保证计算精度, 又能减少计算代价. 利用该方法的思想, 基于多体作用的原子模型和连续模型直接耦合, 在一个周期内, 我们可得到下文的原子/连续耦合模型.

首先定义一个周期内的耦合模型的内能为

$$\Psi^{ac}(y) = \sum_{\xi \in A} V^a(y_\xi) + \sum_{\xi \in I} V^i(y_\xi) + \sum_{\xi \in C} V^c(y_\xi), \forall y \in Y^\varepsilon,$$

这里 V^i 表示交界面上的内能, V^c 指连续区域的内能, A 表示原子区域原子节点的集合, I 表示交界面区域原子节点的集合, 即

$$I = \{\xi \in \bar{L} \setminus A \mid \xi + i \in A, i = 1, 2, -1, -2\},$$

$C = \bar{L} \setminus (A \cup I)$ 表示连续区域的原子节点. 在交界面处, 原子能量形式定义为:

$$V_\xi^i(Dy_\xi) = \begin{cases} V_{+1}(D_1 y_\xi, 2D_1 y_\xi, D_3 y_\xi, D_4 y_\xi), \\ \xi + j \in A, j = 1, \\ \frac{1}{2}V_{+2}(D_1 y_\xi, D_2 y_\xi, -D_1 y_\xi, -D_2 y_{\xi+1}), \\ \xi + j \in A, j = 2, \\ V_{-1}(D_1 y_\xi, D_2 y_\xi, D_3 y_\xi, 2D_3 y_\xi), \\ \xi + j \in A, j = -1, \\ \frac{1}{2}V_{-2}(D_1 y_\xi, D_2 y_\xi, -D_1 y_\xi, -D_2 y_\xi), \\ \xi + j \in A, j = -2. \end{cases}$$

则 V^i 满足分片检验, 即, $\forall \xi \in I, F \in (0, +\infty)$ 有

$$V_\xi^i(Dy_\xi^F) = V(Dy_\xi^F), \delta\Psi^{ac}(y^F) = \frac{\partial\Psi^{ac}}{\partial y_\xi} = 0.$$

类似地, 可以证明连续区域的能量也满足分片检验. 定义一个周期内原子/连续耦合模型的总能量为

$$E^{ac} = \Psi^{ac} - \langle f, y \rangle_\varepsilon \quad (5)$$

令 y^{ac} 是方程(5)的局部最优解, 即满足方程

$$y^{ac} \in \operatorname{argmin}\{E^{ac}(y)\} \quad (6)$$

的解. 接下来用有限元方法求解方程(6). 我们先定义有限元空间. 令 $\Omega = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ 为计算单元. 将计算单元划分为原子区域、交界面区域、连续区域, 分别用 $\Omega_a \subset \Omega, \Omega_i \subset \Omega, \Omega_c := \Omega \setminus \Omega_a \setminus \Omega_i$ 表示.

接下来将计算单元 Ω 划分为 K 个不同的闭区间, 分别为 $T_k^h := [x_{k-1}^h, x_k^h], 1 \leq k \leq K$, 划分 $N^h = \{T_k\}_{k=1}^K$. 易知, 对于每一个单元节点有 $x_{k-1}^h < x_k^h$.

接下来定义左端点和右端点, 在区间 $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ 定义 $x_1^h = \frac{1}{2}$ 为右端点, $x_k^h = \frac{1}{2}$ 为左端点. 定义每一个单元长度 h_k , 有 $h_k = |T_k^h| = x_k^h - x_{k-1}^h$. 不失一般性, 定义 I_h 是在划分 N^h 下的分片线性插值函数, 假设 $I_h \in P_1(N^h)$.

假设在划分 N^h 下的有限元空间满足以下原则

(T₁) 存在 $K \in \mathbf{N}$, 满足 $x_{k+K}^h = 1 + x_k^h$. 我们称 N^h 是呈周期变化的.

(T₂) N^h 包括原子区域, 可表示为 $\Omega_a : \Omega \cap \varepsilon \mathbf{N} = \Omega_a \cap \{x_k^h\}_{k \in \mathbf{N}}$.

(T₃) 原子连续耦合方法中的交界面区域内的所有原子都是有限元的单元节点, 即满足 $\partial\Omega_a \subset \{x_k^h\}_{k \in \mathbf{N}}$, 也就是说每一个该区域的原子如果不属于原子区域, 则属于连续区域.

(T₄) 若果 $T_k^h \subset \Omega_c$, 则有 $|T_k^h| = h_k \geq 2\varepsilon$.

(T₅) 在连续区域有限元的划分是任意的, 换言之, 有限元的节点不一定在原子节点上.

定义在划分 N^h 下, 原子链上的节点为

$$\begin{aligned} K^a &= \{K_1 + 1, \dots, K_2 - 1\}, \\ K^i &= \{K_1 - 1, K_1, K_2, K_2 + 1\}, \\ K^c &= \{1, \dots, K_2 - 2, K_2 + 2, \dots, K\}, \\ K^{ac} &= K^a \cup K^i \cup K^c. \end{aligned}$$

又定义 $\#N^h$ 是一个周期内有限元的个数. 现在给出网格划分的结构, 如图 1 所示. 定义粗粒化后的位移空间

$$U^h = \{u_h \in P_1(N^h) : u_h(x+1) = u_h(x), u_h(0) = 0\}$$

及粗粒化后的形变空间

$$Y^h = \{y \in P_1(N^h) : y_h - Fx \in U^h\}.$$

插值算子的定义为

$$(I_h f)(x_k^h) = f(x_k^h), \forall k \in \mathbf{Z}.$$

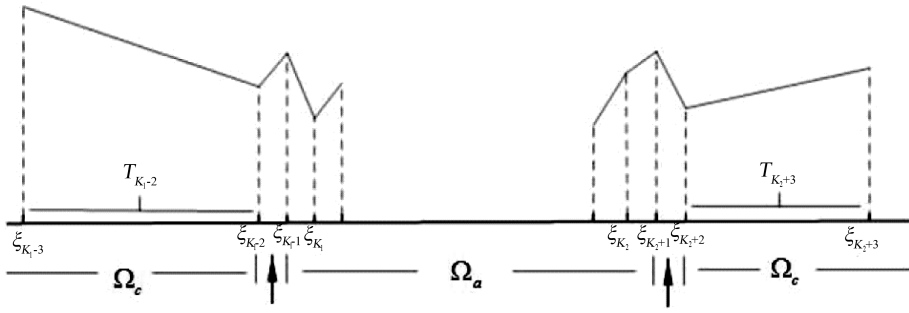


图 1 耦合模型的网格划分
Fig. 1 Grid partitioning of the coupled model

如果 $f \in C^0(\mathbf{R})$, 则 $I_h : C^0(\mathbf{R}) \rightarrow P_1(N^h)$, 并且 $I_h : U \rightarrow U^h$. 在一个周期内, 定义外力做功产生的能量为

$$-\langle f, u_h \rangle_h = - \int_{\Omega} I_h(fu_h) dx.$$

于是, 把连续区域能量由离散型转化为积分型, 有

$$\begin{aligned} \Psi^{ac}(y) &= \epsilon \sum_{\xi \in A} V^a(Dy_{\xi}^h) + \epsilon \sum_{\xi \in I} V^i(Dy_{\xi}^h) + \\ &\int_{\Omega} W(y_h') dx = \epsilon \sum_{\xi \in A} V^a(Dy_{\xi}^h) + \\ &\epsilon \sum_{\xi \in I} V^i(Dy_{\xi}^h) + \sum_{T \in N^h} h_T W(y_h' | T). \end{aligned}$$

对任意一个数值解 $y_h \in T^h$, 由式(6)可知

$$E^{ac}(y_h) = \Psi^{ac}(y_h) - \langle f, y_h - Fx \rangle_h \quad (7)$$

令 y_h^{ac} 是方程(7)的局部最优解, 即

$$y_h^{ac} \in \operatorname{argmin}\{E^{ac}(y_h)\} \quad (8)$$

3 残量分析

3.1 残量

残量分析是为后验误差估计作准备. 为此先定义一些记号. 任给一个定义在晶格上的函数 $v \in \mathbf{R}^Z$, 记 $v(\epsilon\xi) = v_{\xi}$. 令 $\Omega \subset Z$. $\forall V \in \mathbf{R}^Z$, 定义范数

$$\|v\|_{\xi \in \Omega}^q = \begin{cases} (\sum_{\xi \in \Omega} |v(\xi)|^q)^{\frac{1}{q}}, & 1 \leq q < \infty, \\ \max_{\xi \in \Omega} |v(\xi)|, & q = \infty. \end{cases}$$

一般地, 当 $q = \infty$ 时 ξ_{∞} 简记为 ξ^{∞} . 若 $v : Z \rightarrow \mathbf{R}$, 这里 $Z \subset \mathbf{R}$ 是可测的, 对 $\Omega \subset Z$, 定义

$$\|v\|_{L^q(\Omega)} =$$

$$\begin{cases} (\int_{\Omega} |v(x)|^q)^{\frac{1}{q}}, & 1 \leq q < \infty, \\ \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |v(x)|, & q = \infty. \end{cases}$$

可以把 $\|v\|_{L^q(\Omega)}$ 简记为 $\|v\|_{L^q}$. 定义空间 U 上的范数为

$$\|v\|_{U^{1,2}} = \|v\|_{L_c^2}, \quad v \in U,$$

在对偶空间 U^* 上的范数定义为

$$\|v\|_{U^{-1,2}} = \sup_{v \in U, \|v\|_{U^{1,2}}=1} T[v].$$

假设 y^a 是方程(3)的解, 并且满足 $y_a' > 0$, Ψ^a 在 y^a 处的一阶变分为

$$\begin{aligned} \langle \delta \Psi^a(y^a), v \rangle &= \epsilon \sum_{\xi \in L} \sigma_{\xi}^a(y^a) v_{\xi}' = \\ &\langle f, v \rangle, \quad \forall v \in U, \end{aligned}$$

这里 $v_{\xi}' := \frac{v_{\xi+1} - v_{\xi}}{\epsilon}$,

$$\begin{aligned} \sigma_{\xi}^a(y^a) &= \partial_1 V(Dy_{\xi-1}) - \partial_3 V(Dy_{\xi}) + \\ &\partial_2 V(Dy_{\xi-2}) + \partial_2 V(Dy_{\xi-1}) - \partial_4 V(Dy_{\xi}) - \\ &\partial_4 V(Dy_{\xi+1}), \end{aligned}$$

$$\partial_j V(F) = \frac{\partial V(F)}{\partial (f_j)}, \quad j = 1, 2, 3, 4.$$

类似地, 假设 y^{ac} 是方程(8)的解. 如果 $y_{ac}' > 0$, Ψ^{ac} 在 y^{ac} 处的一阶变分为

$$\langle \delta \psi^{ac}(y^{ac}), v_h \rangle = \langle f, v_h \rangle, \quad \forall v_h \in U^h,$$

这里

$$\begin{aligned} \langle \delta \psi^{ac}(y^{ac}), v_h \rangle &= \epsilon \sum_{\xi \in A} V_a'(Dy_{\xi}^h) v_{\xi}' + \\ &\epsilon \sum_{\xi \in I} V_i'(Dy_{\xi}^h) v_{\xi}' + \int_{\Omega^c} W'(y_h' | T) dx = \\ &\sum_{k \in K^{ac}} h_k \sigma_k^{ac}(y_h) v_h |_{T_k} \end{aligned} \quad (9)$$

则 $\sigma_{\xi}^{ac}(y_h)$ 的具体形式为

$$\sigma_{\xi}^{ac}(y_h) \left\{ \begin{aligned} & \sigma_{\xi_k}^a(y_h), \quad k \in K^a \setminus \{K_1 + 1, K_1\}, \\ & W'(\nabla y_h |_{T_k}), \quad k \in K^c - \{K_2 + 2\}, \\ & -\partial_4 V(Dy_{\xi_{K_1+2}}) - \partial_3 V(DDy_{\xi_{K_1+1}}) - \partial_4 V(Dy_{\xi_{K_1+1}}) + \\ & \quad \partial_1 V(Dy_{\xi_{K_1}}) + \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_1}}) + \partial_2 V_{-1}(Dy_{\xi_{K_1}}), \quad k = K_1 + 1, \\ & -\partial_4 V(Dy_{\xi_{K_1+1}}) - \partial_3 V(Dy_{\xi_{K_1}}) - \partial_4 V(Dy_{\xi_{K_1}}) + \\ & \quad \partial_1 V_{-1}(Dy_{\xi_{K_1-1}}) + \partial_2 V_{-1}(Dy_{\xi_{K_1-1}}) + \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_2 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}) + \frac{1}{2} \partial_4 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}), \quad k = K_1, - \\ & \partial_4 V(Dy_{\xi_{K_1}}) - \partial_3 V_{-1}(Dy_{\xi_{K_1-1}}) - 2\partial_4 V_{-1}(Dy_{\xi_{K_1-1}}) + \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_1 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}) + \frac{1}{2} \partial_2 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}) - \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_3 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}) - \frac{1}{2} \partial_4 V_{-2}(Dy_{\xi_{K_1-2}}), \quad k = K_1 - 1, \\ & \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_2-2}}) + \partial_1 V(Dy_{\xi_{K_2-1}}) + \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_2-1}}) - \\ & \quad \partial_3 V(Dy_{\xi_{K_2}}) - \partial_4 V(Dy_{\xi_{K_2}}) - \partial_3 V_{+1}(Dy_{\xi_{K_2+1}}) - \\ & \quad \partial_4 V_{+1}(Dy_{\xi_{K_2+1}}), \quad k = K_2, \\ & \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_2-1}}) + \partial_1 V(Dy_{\xi_{K_2}}) + \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_2}}) - \\ & \quad \partial_4 V_{+1}(Dy_{\xi_{K_2+1}}) + \frac{1}{2} \partial_2 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2+2}}) - \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_4 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2+2}}), \quad k = K_2 + 1, \\ & \partial_2 V(Dy_{\xi_{K_2}}) + \partial_1 V_{+1}(Dy_{\xi_{K_2+1}}) + \partial_2 V_{+1}(Dy_{\xi_{K_2+1}}) + \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_1 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2}}) + \frac{1}{2} \partial_2 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2}}) - \\ & \quad \frac{1}{2} \partial_3 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2+2}}) - \frac{1}{2} \partial_4 V_{+2}(Dy_{\xi_{K_2+2}}), \quad k = K_2 + 2, \end{aligned} \right.$$

这里

$$W'(F) = \partial_1 V(F) - 2\partial_2 V(F) + \partial_3 V(F) - 2\partial_4 V(F).$$

又

$$\nabla v_h |_{T_k} = \frac{\varepsilon}{h} \sum_{\xi \in \xi_k+1}^{\xi_k} Dv_{\xi}^h,$$

则式(9)可化为

$$\langle \delta\psi^{ac}(y^{ac}), v_h \rangle = \sum_{k \in K^{ac}} h_k \sigma_{\xi}^{ac}(y_h) \nabla v_h |_{T_k} = \varepsilon \sum_{\xi \in \bar{L}} \sigma_k^{ac}(y_h) Dv_{\xi}^h, \quad \forall v_h \in U^h.$$

定义 $I_{\varepsilon}: U \rightarrow U$ 是原子区域到原子区域的插值函数. 我们需要这个插值函数网格节点和原子节点不一定一致. 令 $y \in U$ 是方程(3)的解, $y_h \in Y^h$

是方程(5)的数值解. 则残量 $R[v] \in U^*$ 为

$$\begin{aligned} R[v] &= \langle \delta\Psi^a(I_{\varepsilon}y), v \rangle - \langle \delta\Psi^{ac}(y_h), v \rangle + \\ & \quad \langle \delta\Psi^{ac}(y_h), v \rangle - \langle \delta\Psi^{ac}(y_h), v_h \rangle + \\ & \quad \langle f, v_h \rangle - \langle f, v \rangle_{\varepsilon} = \\ & \quad R_{\text{model}}[v] + R_{\text{cg}}[v] + R_{\text{ext}}[v]. \end{aligned}$$

称 $R_{\text{model}}[v]$ 为模型残量, $R_{\text{cg}}[v]$ 为粗粒化残量, $R_{\text{ext}}[v]$ 为外部残量.

3.2 残量分析

关于模型残量, 有如下结论:

定理 3.1 令 $y_h \in Y^h$ 且 $\min_{\xi \in \bar{L}} y'_h > 0$. 则有

$$\|R_{\text{model}}\|_{U^{-1,2}} \leq M,$$

这里

$$M = (\|\sigma_{\xi}^i(y_h) - \sigma^a(y_h)\|_{\xi}^2 +$$

$$\begin{aligned} & \| (1 - \frac{\eta^F_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_i}) + \\ & (1 - \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_{i+1}}) \|_{\xi^2_\epsilon}^{1/2}. \end{aligned}$$

证明 注意到 $v' = \int_{\Omega} \nabla v dx$, 则有

$$\begin{aligned} R_{\text{model}}[v] &= \langle \delta \sum_{\xi \in \bar{L}} \Psi^{ac}(y_h), v \rangle - \\ & \langle \delta \sum_{\xi \in \bar{L}} \Psi^a(y_h), v \rangle = \\ & \epsilon \sum_{\xi \in I} (\sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a_\xi(y_h)) v'_\xi + \\ & \int_{\Omega^c} [W'(y_h |_T) - \sigma^a_\xi(y_h)] dx. \end{aligned}$$

将连续区域 Ω^c 划分为有限元区域, 得到

$$\begin{aligned} R_{\text{model}}[v] &= \epsilon \sum_{\xi \in I} (\sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a_\xi(y_h)) v'_\xi + \\ & \sum_{T \subset N^h} \int_T [W'(y_h |_T) - \sigma^a_\xi(y_h)] dx. \end{aligned}$$

由于有限元剖分不依赖于原子节点, 所以每一个单元节点都可能在相邻原子节点之间, 每一个单元内至少有 2 个原子节点, 不妨假设有 $k \geq 2$ 个. 将每一个单元 $T^k_\xi := [x_{K_1}, x_{K_1+k}]$ 分为三部分: 单元的左端点和单元内第一个原子节点组成的区间为 $[x_{K_1}, \xi_{K_1}]$, 其区间长度为 η^F_k , 单元的右端点和单元内最后一个原子节点组成的区间为 $[\xi_{K_1+k}, x_{K_1+k}]$, 其区间长度为 η^R_k , 其余为 $T_\epsilon := [\xi_{K_1}, \xi_{K_1+k}]$. 又

$$\int_{T_\epsilon} W'(y_h |_T) dx = \int_{T_\epsilon} \sigma^a_\xi(y_h) \nabla v dx,$$

则有

$$\begin{aligned} R_{\text{model}}[v] &= \epsilon \sum_{\xi \in I} (\sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a_\xi(y_h)) v'_\xi + \\ & \sum_{T \subset N^h} (\sum_{T_\epsilon} \int_T [W'(y_h |_T) - \sigma^a_\xi(y_h)] dx + \\ & \int_{T_\epsilon} (\frac{\eta^F_k}{\epsilon} + \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) W'(y_h) \nabla v dx) - \\ & \sum_{T \subset N^h} \sum_{T_\epsilon} \int_{T_\epsilon} \sigma^a_\xi(y_h) \nabla v dx = \\ & \epsilon \sum_{\xi \in I} (\sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a_\xi(y_h)) v'_\xi + \\ & \sum_{T \subset N^h} \sum_{T_\epsilon} \int_{T_\epsilon} (W'(y_h |_T) - \sigma^a_\xi(y_h)) dx - \\ & \sum_{T \subset N^h} (1 - \frac{\eta^F_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_k}) + \\ & (1 - \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_{k+1}}) \nabla v dx = \\ & \epsilon \sum_{\xi \in I} (\sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a_\xi(y_h)) v'_\xi - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{T \subset N^h} (1 - \frac{\eta^F_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_k}) + \\ & (1 - \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_{k+1}}) \nabla v dx. \end{aligned}$$

由 Cauchy 不等式可得

$$\begin{aligned} |R_{\text{model}}[v]| &\leq (\| \sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a(y_h) \|_{\xi^2_\epsilon} + \\ & \| (1 - \frac{\eta^F_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_i}) + \\ & (1 - \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_{i+1}}) \|_{\xi^2_\epsilon}^{1/2} \| v' \|_{\xi^2_\epsilon} \leq \\ & M \| v' \|_{\xi^2_\epsilon}. \end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned} (\eta^k)^2 &= \| \sigma^i_\xi(y_h) - \sigma^a(y_h) \|_{\xi^2_\epsilon} + \\ & \| (1 - \frac{\eta^F_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_i}) + \\ & (1 - \frac{\eta^R_k}{\epsilon}) \sigma^a(y_h |_{T_{i+1}}) \|_{\xi^2_\epsilon}^2. \end{aligned}$$

我们将分析粗粒化残量的误差估计, 并证明 $R_{\text{cg}}[v] = 0$. 首先

$$R_{\text{cg}}[v] = \langle \delta \Psi^{ac}(y_h), v \rangle - \langle \delta \Psi^{ac}(y_h), v_h \rangle.$$

注意到 $|h_k| v' = \int_{h_k} v dx, v \in Y^h$, 由于 $v \in P_1(y)$, 则有

$$\begin{aligned} R_{\text{cg}}[v] &= \langle \delta \Psi^{ac}(y_h), v \rangle - \\ & \langle \delta \Psi^{ac}(y_h), v_h \rangle = \\ & \delta \Psi^{ac}(y_h) \int_{\Omega} (\nabla v - \nabla v_h) dx = \\ & \delta \Psi^{ac}(y_h) (\int_{\Omega^a} (\nabla v - \nabla v_h) dx + \\ & \int_{\Omega^i} (\nabla v - \nabla v_h) dx + \\ & \int_{\Omega^c} (\nabla v - \nabla v_h) dx) = \\ & R_1[v] + R_2[v] + R_3[v]. \end{aligned}$$

接下来证明 $R_1[v] \equiv R_2[v] \equiv R_3[v] \equiv 0$. 因为 $v_h = I_h v = v, \nabla v = \nabla v_h$, 所以 $R_1[v] \equiv R_2[v] \equiv 0$. 对 $R_3[v]$, 有

$$R_3[v] = \int_{\Omega^c} W'(y'_h) dx (\nabla v - \nabla v_h) dx,$$

这里 $W(F) = W(F, 2F, -F, 2F)$. 因为对任意 $k \in \mathbf{Z}$ 都有 $v(x^h_k) = v_h(x^h_k)$ 以及 $W'(y'_h)$ 涵盖了所有有限元单元, 所以

$$R_{\text{cg}}[v] \equiv 0 \tag{10}$$

外部残量 $R_{\text{ext}}[v]$ 的分析与参考分析粗粒化残量分析方法相似. 将外部能量残量分为三个部分

$R_1[v], R_2[v], R_3[v]$, 即

$$R_{\text{ext}}[v] = \int_{\Omega^c} [I_\epsilon(fv) - I_h(fI_h v)] dx = \int_{\Omega^c} [I_\epsilon(fv) - fv] dx + \int_{\Omega^c} [fv - fI_h v] dx + \int_{\Omega^c} [fI_h v - I_h(fI_h v)] dx.$$

由文献[18]的结果有

$$\|R_{\text{ext}}[v]\|_{U^{-1,2}} \leq \frac{1}{\pi} \|hf\|_{L^2} \|\nabla v\|_{L^2} + \left(\frac{1}{4\pi^2} \|(\epsilon^2 + h^2)f''\|_{L^2}^2 + \|(\epsilon^2 + h^2)f'\|_{L^2}\right)^{1/2} \|\nabla v\|_{L^2} =: M_1 \|\nabla v\|_{L^2}.$$

令

$$(\eta_k^f)^2 := \frac{h_k^2}{\pi^2} \|f\|_{L^2}^2 \tag{11}$$

$$(\eta_k^g)^2 := (\epsilon^2 + h_k^4) \|f'\|_{L^2}^2 + \frac{\epsilon^2 + h_k^4}{4\pi^2} \|f''\|_{L^2}^2 \tag{12}$$

4 原子/连续耦合方法的稳定性

$\forall v \in \mathbf{R}^Z$, 定义一阶, 二阶, 三阶差分格式如下:

$$v'_\xi = \frac{v_\xi - v_{\xi-1}}{\epsilon},$$

$$v''_\xi = \frac{v_{\xi+1} - 2v_\xi + v_{\xi-1}}{\epsilon^2},$$

$$v'''_\xi = \frac{v_{\xi+1} - 3v_\xi + 3v_{\xi-1} - v_{\xi-2}}{\epsilon^3}.$$

对 $E^a(y)$ 求二阶变分有

$$E''_a(y)[u, u] = \langle \delta \sum_{\xi \in \bar{L}} \sigma_\xi^a(y) v'_\xi, v \rangle = \langle \delta \sum_{\xi \in \bar{L}} (\partial_1 V(Dy_{\xi-1}) - \partial_3 V(Dy_\xi) + \partial_2 V(Dy_{\xi-2}) + \partial_2 V(Dy_{\xi-1}) - \partial_4 V(Dy_\xi) - \partial_4 V(Dy_{\xi+1})) v'_\xi, v \rangle.$$

为方便分析, 作以下简写

$$[\delta \sum_{\xi \in \bar{L}} \partial_j V(Dy_\xi) v'_\xi, v] = \sum_{\xi \in \bar{L}} [\partial_{j1} V(Dy_\xi) D_1 v + \partial_{j2} V(Dy_\xi) D_2 v - \partial_{j3} V(Dy_\xi) D_3 v - \partial_{j4} V(Dy_\xi) D_4 v] v'_\xi = \sum_{\xi \in \bar{L}} [\partial_{j1} V(Dy_\xi) v'_{\xi+1} + \partial_{j2} V(Dy_\xi) (v'_{\xi+1} + v'_{\xi+2}) - \partial_{j3} V(Dy_\xi) v'_\xi - \partial_{j4} V(Dy_\xi) (v'_\xi + v'_{\xi-1})] v'_\xi \tag{12}$$

这里 $D_j v, j=1, 2, 3, 4$. 由式(12)可知

$$E''(y)[v, v] = \sum_{\xi \in \bar{L}} [\partial_{11} V(Dy_{\xi-1}) v'_\xi + \partial_{12} V(Dy_{\xi-1}) (v'_\xi + v'_{\xi+1}) - \partial_{13} V(Dy_{\xi-1}) v'_{\xi-1} - \partial_{14} V(Dy_{\xi-1}) (v'_{\xi-1} + v'_{\xi-2})] v'_\xi - [\partial_{31} V(Dy_\xi) v'_{\xi+1} + \partial_{32} V(Dy_\xi) (v'_{\xi+1} + v'_{\xi+2}) - \partial_{33} V(Dy_\xi) v'_\xi - \partial_{34} V(Dy_\xi) (v'_\xi + v'_{\xi-1})] v'_\xi + [\partial_{21} V(Dy_{\xi-2}) v'_{\xi-1} + \partial_{22} V(Dy_{\xi-2}) (v'_{\xi-1} + v'_\xi) - \partial_{23} V(Dy_{\xi-2}) v'_{\xi-2} - \partial_{24} V(Dy_{\xi-2}) (v'_{\xi-2} + v'_{\xi-3})] v'_\xi + [\partial_{21} V(Dy_{\xi-1}) v'_\xi + \partial_{22} V(Dy_{\xi-1}) (v'_{\xi+1} + v'_\xi) - \partial_{23} V(Dy_{\xi-1}) v'_{\xi-1} - \partial_{24} V(Dy_\xi) (v'_{\xi-1} + v'_{\xi-2})] v'_\xi - [\partial_{41} V(Dy_\xi) v'_{\xi+1} + \partial_{42} V(Dy_\xi) (v'_{\xi+1} + v'_{\xi+2}) - \partial_{43} V(Dy_\xi) v'_\xi - \partial_{44} V(Dy_\xi) (v'_\xi + v'_{\xi-1})] v'_\xi - [\partial_{41} V(Dy_{\xi+1}) v'_{\xi+2} + \partial_{42} V(Dy_{\xi+1}) (v'_{\xi+3} + v'_{\xi+2}) - \partial_{43} V(Dy_{\xi+1}) v'_{\xi+1} - \partial_{44} V(Dy_\xi) (v'_\xi + v'_{\xi+1})] v'_\xi.$$

注意到这些非本地化 Hessian 式 $|v'_{\xi+3} v'_\xi|, |v'_{\xi+2} v'_\xi|, |v'_{\xi+1} v'_\xi|, |v'_{\xi-3} v'_\xi|, |v'_{\xi-2} v'_\xi|, |v'_{\xi-1} v'_\xi|$ 可以化为本地化的应变梯度形式, 则有

$$|v'_{\xi+1} v'_\xi| = \frac{1}{2} |v'_\xi|^2 + \frac{1}{2} |v'_{\xi+1}|^2 - \frac{\epsilon^2}{2} |v''_\xi|^2 \tag{13}$$

$$|v'_{\xi+2} v'_\xi| = \frac{1}{2} |v'_\xi|^2 + \frac{1}{2} |v'_{\xi+2}|^2 - \epsilon^2 |v''_\xi|^2 - \epsilon^2 |v'''_{\xi+1}|^2 + \frac{\epsilon^4}{2} |v'''_\xi|^2 \tag{14}$$

$$|v'_{\xi+3} v'_\xi| \geq \frac{1}{2} |v'_\xi|^2 + \frac{1}{2} |v'_{\xi+3}|^2 - \frac{3\epsilon^2}{2} |v''_\xi|^2 - \frac{3\epsilon^2}{2} |v'''_{\xi+1}|^2 - \frac{3\epsilon^2}{2} |v'''_{\xi+2}|^2 + 2\epsilon^4 |v'''_\xi|^2 + \epsilon^4 |v'''_{\xi+1}|^2 \tag{15}$$

注意到 v', v'', v''' 关于 ξ 呈周期变化, 所以

$$\sum_{\xi=-L+1}^L v'_{\xi+1} = \sum_{\xi=-L+1}^L v'_\xi.$$

类似地

$$\sum_{\xi=-L+1}^L v''_{\xi+2} = \sum_{\xi=-L+1}^L v''_{\xi+1} = \sum_{\xi=-L+1}^L v''_\xi,$$

$$\sum_{\xi=-L+1}^L v'''_{\xi+1} = \sum_{\xi=-L+1}^L v'''_\xi.$$

综上所述可得

$$E''(y)[v, v] = \epsilon \sum_{\xi \in \bar{L}} A_\xi |v'_\xi|^2 +$$

$$\epsilon^3 \sum_{\xi \in \bar{L}} B_\xi |v''_\xi|^2 + \epsilon^5 \sum_{\xi \in \bar{L}} C_\xi |v'''_\xi|^2,$$

这里

$$\begin{aligned} A_\xi(y) = & \partial_{11}V(Dy_{\xi-1}) + \frac{3}{2}\partial_{12}V(Dy_{\xi-1}) + \\ & \frac{1}{2}\partial_{12}V(Dy_\xi) - \frac{1}{2}\partial_{13}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{13}V(Dy_\xi) - \frac{1}{2}\partial_{14}V(Dy_\xi) - \partial_{14}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{14}V(Dy_{\xi+1}) + \frac{1}{2}\partial_{21}V(Dy_{\xi-2}) + \\ & 2\partial_{21}V(Dy_{\xi-1}) + 2\partial_{22}V(Dy_{\xi-2}) + \\ & \frac{5}{2}\partial_{22}V(Dy_{\xi-1}) - \partial_{23}V(Dy_\xi) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{23}V(Dy_{\xi-2}) - \frac{1}{2}\partial_{23}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \partial_{24}V(Dy_{\xi-2}) - \partial_{24}V(Dy_{\xi-1}) - \partial_{24}V(Dy_\xi) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{31}V(Dy_\xi) - \partial_{31}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \partial_{32}V(Dy_\xi) - \frac{1}{2}\partial_{32}V(Dy_{\xi-2}) + \partial_{33}V(Dy_\xi) + \\ & \frac{3}{2}\partial_{34}V(Dy_\xi) + \frac{1}{2}\partial_{34}V(Dy_{\xi+1}) - \partial_{41}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{41}V(Dy_\xi) - \frac{1}{2}\partial_{41}V(Dy_{\xi+1}) - \\ & \frac{3}{2}\partial_{42}V(Dy_{\xi-2}) - \frac{1}{2}\partial_{42}V(Dy_{\xi-1}) - \\ & \partial_{42}V(Dy_\xi) - \partial_{42}V(Dy_{\xi+1}) \\ & \partial_{43}V(Dy_\xi) + 3\partial_{44}V(Dy_\xi) + 2\partial_{44}V(Dy_{\xi+1}), \\ B_\xi(y) = & -\frac{1}{2}\partial_{12}V(Dy_{\xi-1}) + \\ & \frac{1}{2}\partial_{14}V(Dy_{\xi-1}) + \partial_{14}V(Dy_{\xi+1}) + \partial_{14}V(Dy_\xi) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{21}V(Dy_{\xi-1}) - \partial_{22}V(Dy_{\xi-1}) + \\ & \frac{3}{2}\partial_{23}V(Dy_\xi) + \frac{5}{2}\partial_{23}V(Dy_{\xi-1}) + \\ & 4\partial_{24}V(Dy_\xi) + \partial_{24}V(Dy_{\xi+1}) + \\ & \frac{3}{2}\partial_{24}V(Dy_{\xi+1}) + \frac{1}{2}\partial_{31}V(Dy_{\xi-1}) + \\ & \frac{3}{2}\partial_{32}V(Dy_\xi) + \partial_{32}V(Dy_{\xi-2}) - \frac{1}{2}\partial_{34}V(Dy_\xi) + \\ & \frac{3}{2}\partial_{41}V(Dy_\xi) + \partial_{41}V(Dy_{\xi+1}) + \frac{3}{2}\partial_{42}V(Dy_\xi) + \\ & \frac{5}{2}\partial_{42}V(Dy_{\xi-1}) + \frac{5}{2}\partial_{42}V(Dy_{\xi+1}) - \partial_{44}V(Dy_\xi) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{34}V(Dy_{\xi+1}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_\xi(y) = & -\partial_{14}V(Dy_{\xi+1}) - \frac{1}{2}\partial_{23}V(Dy_\xi) - \\ & 2\partial_{24}V(Dy_\xi) - \partial_{24}V(Dy_{\xi+1}) - \\ & \frac{1}{2}\partial_{32}V(Dy_\xi) - \frac{1}{2}\partial_{41}V(Dy_\xi) - \\ & 2\partial_{42}V(Dy_\xi) - \frac{3}{2}\partial_{23}V(Dy_\xi). \end{aligned}$$

注意到 $\sum_{\xi \in \bar{L}} A_\xi \geq 0, \sum_{\xi \in \bar{L}} B_\xi \geq 0, \sum_{\xi \in \bar{L}} C_\xi \leq 0$, 由参考文献[20]的引理 4.1 有

定理 4.1 假设存在一个 $r^* > 0$, 使得能量泛函 V 满足在区间 $(0, r^*)$ 上凸, 在区间 $(r^*, +\infty)$ 凹. 令 $y \in Y^h$ 满足 $\min_l y'_l > \frac{r^*}{2}$. 则有

$$E''_a(y)[v, v] \geq M_*(y) \|v'\|_{\xi_\epsilon}^2.$$

5 后验误差估计子

由式(10)~(12)可得

定理 5.1 令 y^{ac} 是方程(8)的解, y^{ac} 满足

$$\min_\xi y'_{ac} \geq \frac{r^*}{2}, M_*(y^{ac}) > 0,$$

y^a 是方程(2)的解. 则

$$\|y'_a - y'_{ac}\|_{L^\infty} \leq \omega.$$

如果 ω 充分的小, 则有

$$\|y'_a - y'_{ac}\|_{L^\infty} \leq \eta^k,$$

其中

$$\eta^k = \frac{2}{M_*(y^{ac})} (\eta(y^{ac}) + \eta^f + \eta^g).$$

证明 令 $e := y^a - I_\epsilon y^{ac}$, 并假设 $\omega \leq \min y'_{ac}$.

由微分中值定理可知, 存在 $\theta \in \text{conv}\{y^a, I_\epsilon y^{ac}\}$, 使得

$$\begin{aligned} E''(\theta)[e, e] = & E'_a(y^a)[e] - E'_a(I_\epsilon y^{ac})[e] = \\ & E'_a(y^{ac})[I_h e] - E'_a(I_\epsilon y^{ac})[e] = \\ & \Psi'_{ac}(y^{ac})[I_h e] - \Psi'_a(y^a)[I_h e] - \\ & (\langle f, I_h e \rangle_h - \langle f, e \rangle_\epsilon). \end{aligned}$$

应用文献[18]中定理 3.1 和命题 3.3 有^[9]

$$\Psi''_a(\theta)[e, e] \leq \eta(y^{ac}) + \eta^f + \eta^g \|e'\|_{L^2}.$$

从而由定理 4.1 可知

$$\frac{1}{2} M_*(y^{ac}) \|e'\|_{L^2}^2 \leq \eta(y^{ac}) +$$

$$\eta^f + \eta^g \|e'\|_{L^2}.$$

证毕.

6 数值实验

取 $F = 1, N = 50000, V$ 是 morse 势能函数

$$V(Dy_\xi) = 0.5(\varphi(D_1 y_\xi) + \varphi(D_2 y_\xi) + \varphi(D_3 y_\xi) + \varphi(D_4 y_\xi)) + 5\bar{F}(\psi(D_1 y_\xi) + \psi(D_2 y_\xi) + \psi(D_3 y_\xi) + \psi(D_4 y_\xi)),$$

其中 $\varphi(r) = e^{-8(r-1)} - 2e^{-4(r-1)}$, $\psi(r) = e^{-3r}$, $\bar{F} = 5((\rho - \rho_0)^2 + (\rho - \rho_0)^4)$, $\rho_0 = 2e^{-0.27}$, 外力 f 为

$$f(x) = \begin{cases} -0.4 \frac{x+1/2}{x}, & -1/2 \leq x < 0, \\ 0.4 \frac{1/2-x}{x} & 0 \leq x < 1/2. \end{cases}$$

对于位移梯度相对误差 $\frac{\|I_\epsilon y'_{ac} - y'_a\|_{L^2}}{\|y'_a - F\|_{L^2}}$, 因为 $I_\epsilon y'_{ac} = u'_{ac} + F$, $y'_a = u'_a + F$, 所以该相对误差即为 $\frac{\|u'_{ac} - u'_a\|_{L^2}}{\|u'_a\|_{L^2}}$.

其次, 再计算有效性因子(后验误差估计子与真实误差的比) $\frac{\eta^k}{\|y^a - y^{ac}\|_{L^2}}$ 的变化情况.

6.1 先验网格加密算法

假设精确解满足 $|u''| \leq |f|$. 设原子区域为 $(-M\epsilon, M\epsilon)$. 根据文献[21]最优网格划分的假设, 可知在连续区域的最优网格尺度为

$$h^* = 2\epsilon \left| \frac{f(M\epsilon)}{f(x)} \frac{|x|}{M\epsilon} \right|^{2/3}.$$

由网格划分关于 $\xi = 0$ 对称, 设计如下算法:

算法 6.1

- (i) 将原子节点替换为 $0, \epsilon, \dots, M\epsilon$;
- (ii) 令 x_k^h 为网格最右端点. 如果 $x_k^h + h^*(x_k^h) > L$, 则停止;

(iii) 否则, 将最右端点替换为 $x_k^h + h^*(x_k^h)$, 继续(2). 这个网格将在后面作为本文的自适应方法生成的网格的参照对象.

6.2 自适应算法

在开始算法之前, 先定义出错指示符. 因为某一节点的误差与相邻单元的误差相关, 原子区域与连续区域的误差与邻近的单元相关联, 所以出错指示符有如下定义:

$$\theta_k := \begin{cases} 3M_{k-1}^2 + \frac{3}{2}M_k^2, & x_{k-1}^h = R^a, \\ \frac{3}{2}M_{k-1}^2 + 3M_k^2, & x_{k-1}^h = L^a, \\ \frac{3}{2}M_{k-1}^2 + \frac{3}{2}M_k^2, & x_{k-1}^h \neq L^a, R^a. \end{cases}$$

基于文献[20]中自适应算法的思想, 给出本文的自适应网格加密算法如下:

算法 6.2

- (i) 将原子节点替换为 $0, \epsilon, \dots, M\epsilon$, 同时将左右端点替换为 $\{x_0^h = -\frac{1}{2}, x_K^h = \frac{1}{2}\}$;
- (ii) 在当前网格计算耦合模型的解并计算出 θ_k ;
- (iii) 选择一个最小的集合 $\bar{M} \subset \{1, \dots, K\}$, 其元素表示原子节点, 有 $\sum_{k \in \bar{M}} \theta_k \geq \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \theta_k$;
- (iv) 二等分所有单元 N^h ;
- (v) 如果生成网格中计算节点达到规定的最大节点个数, 则停止算法, 否则继续(2).

6.3 数值结果

图 2 示出了位移梯度相对误差随着网格加密的变化趋势. 结果显示: 本文的结果与已有先验误差估计得到的结果相近, 说明本文得到后验误差估计是有效的.

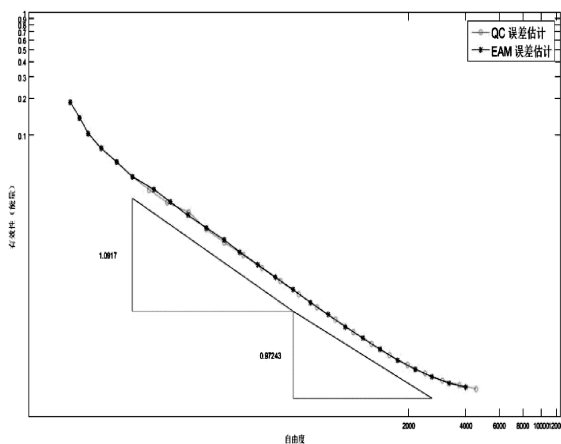


图 2 位移梯度相对误差的比较
Fig. 2 Comparison of the relative error of displacement gradient

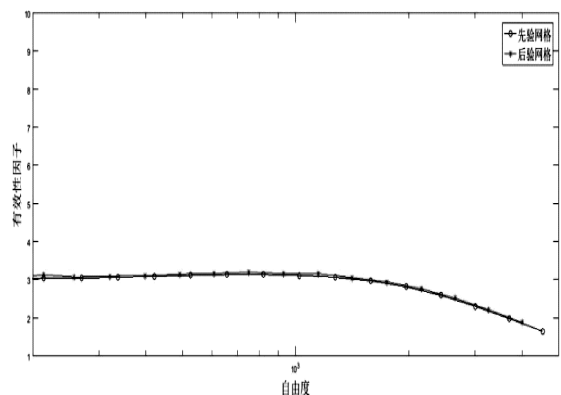


图 3 有效性因子的比较
Fig. 3 Comparison of the effectiveness factor

图 3 示出了有效性因子随着网格加密的变化趋势. 结果显示: 本文的结果与已有的先验误差估计得到的结果相近, 说明本文得到的后验误差估计子是有效的.

参考文献:

- [1] Cauchy A L, Publique L M. Oeuvres completes d' Augustin Cauchy [M]. Whitefish: Kessinger Publishing, 1882.
- [2] Born M, Huang K. Dynamical theory of crystal lattice [M]. Oxford: Oxford University Press, 1954.
- [3] Kanzaki H. Point defects in face-centred cubic lattice I: Distortion around defects [J]. J Phys Chem Solid, 1954, 59: 1506.
- [4] Sinclair J E. Improved atomistic model of a binary dislocation core [J]. J Appl Phys, 1971, 42: 5231.
- [5] Bernstien I M, Thompson A W. Hydrogen effects in metals [M]. New York: TMS-AIME, 1981.
- [6] Fischmeister H, Exner H, Poehch M H, *et al.* Modelling fracture processes in metals and composite materials [J]. Z Metallkde, 1989, 80: 839.
- [7] Mullins M, Dokainish M. Simulation of the(001) plane crack in α -iron employing a new boundry scheme [J]. Phil Mag, 1982, 46: 771.
- [8] Dobson M, Luskin M. Iterative solution of the quasicontinuum equilibrium equations with continuation [J]. J Sci Comput, 2008b, 37: 19.
- [9] Helen X, Luskin M. A generalized quasinonlocal atomistic-to-continuum coupling method with finited-range interaction [J]. Ima J Numer Anal, 2012, 32: 373.
- [10] Lin P. Theoretical and numerical analysis for the quasi-comtinuum approximation of a material without defects [J]. Math Comput, 2003, 72: 657.
- [11] Lin P. Convergence analysis of a quasi-continuum approximation for a two-dimensional material particle model [J]. SIAM J Numer Anal, 2007, 45: 313.
- [12] Amelang J. A fully-nonlocal energy-based formulation and high-performance realization of the quasicontinuum method [D]. California: California Institute of Technology, 2016, 67.
- [13] 郑茂波, 胡兵. 耗散 SRLW 方程的拟紧致非线性有限差分逼近[J]. 四川大学学报:自然科学版, 2015, 52:715.
- [14] 赵红伟, 胡兵, 郑茂波. General Improved KdV 方程的三层加权平均线性差分格式[J]. 四川大学学报:自然科学版, 2017, 54:12.
- [15] Dobson M Luskin M. An analysis of the effect of ghost force oscillation on the quasicontinuum error [J]. ESIAM: Math Model Numer Anal, 2009, 43: 591.
- [16] Shapeev A V. Consistent energy-based atomisitc/continuum coupling for two-body potentials in one and two dimensions [J]. SIAM J Sci Comput, 2011, 9: 905.
- [17] Shapeev A V. Consistent energy-based atomisitc/continuum coupling for two-body potentials in three dimensions [J]. SIAM J Sci Comput, 2012, 34: B335.
- [18] Ortner C, Hao W. A posteriori error control for a quasi-continuum approximation of a periodic chain [J]. Ima J Numer Anal, 2014, 34: 977.
- [19] Ortner C, Shapeev A V. Analysis of an energy-based atomistic/continuum couling approximation of a vacancy in the 2D triangular lattice [J]. Math Comput, 2013, 82: 2191.
- [20] Dorfler W. A convergent adaptive algorithm for possion's equation[J]. SIAM J Numer Anal, 1996, 33: 1106.