

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2019.05.004

# 求解 Frenkel-Kontorova 模型自适应问题的 混合力平衡型原子/连续耦合方法

廖明杰<sup>1</sup>, 王皓<sup>2</sup>

(1. 北京科技大学数理学院, 北京 100083; 2. 四川大学数学学院, 成都 610064)

**摘要:** 本文利用混合力平衡型原子/连续耦合方法求解 Frenkel-Kontorova 模型并考虑模型的自适应问题, 给出了基于残量的后验误差估计子. 基于这个估计子, 本文建立了自适应算法对原子系统进行自适应区域的分解, 确定了原子区域和连续区域的划分. 数值实验验证了后验误差估计子和算法的可行性.

**关键词:** 原子/连续耦合方法; 后验误差估计子; 模型自适应; Frenkel-Kontorova 模型

**中图分类号:** O241.82      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2019)05-0802-11

## Blended force-based atomistic-continuum coupling method for the model adaptivity of a Frenkel-Kontorova model

LIAO Ming-Jie<sup>1</sup>, WANG Hao<sup>2</sup>

(1. School of Mathematics and Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;  
2. School of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

**Abstract:** We use the blended force-based atomistic-continuum coupling (BQCF) method to solve a Frenkel-Kontorova model and consider its model adaptivity problem. We give a posteriori error estimator based on the residual. Then, by using such estimator, we construct the model adaptive algorithm, which adaptively determines the domain decomposition of an atomistic system, characterizes the partition of the atomistic domain and the continuous domain. The numerical experiments illustrate the validity of our estimator and algorithm.

**Keywords:** Atomistic/continuum coupling method; Posteriori error analysis; Model adaptivity; Frenkel-Kontorova model

(2010 MSC 65M60)

## 1 引言

原子/连续耦合方法(atomistic-to-continuum coupling methods)是一类材料多尺度耦合建模与计算方法,其主要思想是将原子/分子力学模型与连续介质力学模型进行耦合,在材料系统产生缺

陷、位错、大形变等相对较小的区域(又称为原子区域)中采用较为精确的原子/分子力学模型进行建模和计算,以得到较为精确的解,而在材料形变较为温和的剩余广大区域(又称为连续区域)中采用连续介质力学模型进行建模和计算以节省计算量<sup>[1-4]</sup>.

收稿日期: 2019-01-06

基金项目: 国家自然科学基金(91430106, 11501389)

作者简介: 廖明杰(1989-), 男, 福建大田人, 博士, 主要研究方向为计算数学. E-mail: mliao@xs.ustb.edu.cn

通讯作者: 王皓. E-mail: wangh@scu.edu.cn

原子/连续耦合方法的有效应用依赖于精确的原子和连续区域的区域分解和连续区域上有限元网格的划分. Ortner<sup>[5]</sup>给出了基于残量的后验误差分析框架. 基于这个框架, Ortner 和 Wang<sup>[6]</sup>对一种一维能量型的原子/连续耦合方法进行了后验误差估计, 给出了应变和能量的后验误差估计子. 何杰等<sup>[7]</sup>进而这种分析方法推广到了能量多体作用的问题中. Wang 等<sup>[8]</sup>将这种分析方法推广到了一维的混合力平衡型原子-连续耦合方法的后验误差估计和自适应.

本文主要是将混合力平衡型原子/连续耦合方法的基于残量的后验误差估计(residual based a posteriori error estimate)和自适应算法应用于一种重要的一维位错模型, 即 Frenkel-Kontorova 模型. 在前面提到的几个工作中, 材料系统的形变是由一个在系统中心奇异并向两端迅速衰减的荷载产生的, 是人为构造的. 而 Frenkel-Kontorova 模型具有比较明确的物理意义, 它实际上描述的是三维情形中位错上方原子的能量情况. 图 1 是一张截面图, 由于一个原子面插入到了原子系统中产生了刃位错, 进而产生了位错能, 使得位错上方的一层原子由原来完美晶格下的等距排列变为不等距排列. 刃位错正上方一个小的区域形变最剧烈, 而随着位错能的减小, 在这个小的区域以外的广大区域中, 原子的位移逐渐减小, 逐渐接近于完美晶格. 容易看到, 原子/连续耦合方法对 Frenkel-Kontorova 模型的计算非常适用.

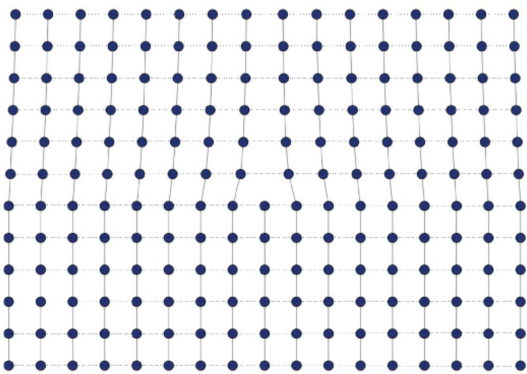


图 1 Frenkel-Kontorova 模型对应的位错  
Fig. 1 Dislocation of Frenkel-Kontorova model

本文主要探讨的是基于残量的后验误差估计和模型自适应在 Frenkel-Kontorova 模型的计算中的应用, 即我们只考虑如何利用后验误差估计子自适应地选取原子区域与连续区域(如何利用后验误差估计子进行连续区域上的自适应网格划分问

题我们将在后续文章中进行讨论). 对于这个问题, Arndt 和 Luskin<sup>[8-9]</sup>进行过讨论, 但是这两个工作中所使用的是基于对象的后验误差估计(goal-oriented a posteriori error estimate), 并且其内能采用的是二次型, 能量极小化问题可以化为求解一个线性方程组, 使得基于对象的后验误差估计中的对偶问题的导出和计算较为简单. 我们考虑的内能是一个一般的多体作用内能, 包含了更多原子相互作用实际情况的 EAM(embedded atom method)内能的情况. 这使得我们最终会得到一个非线性泛函极小化的问题, 从而基于残量的后验误差估计就成了直接和有效的选择.

本文按照以下的方式展开. 第 2 节中我们主要介绍 Frenkel-Kontorova 模型的数学表达式及其混合力平衡型的原子/连续耦合近似方法. 第 3 节中我们导出混合力平衡型的原子/连续耦合近似方法的残量估计. 第 4 节中我们讨论后验稳定性问题. 第 5 节中我们结合第 3 节和第 4 节的结论, 给出后验误差估计子. 我们在第 7 节中给出结论与展望.

## 2 Frenkel-Kontorova 模型及其混合力平衡型的原子/连续耦合方法近似

### 2.1 Frenkel-Kontorova 模型的全原子模拟

我们首先介绍 Frenkel-Kontorova 模型的全原子模拟. 我们将问题定义在一个无限长的原子链  $L_{\#} = \mathbf{Z}$  上, 同时限制原子模型的解存在于一个  $2N$ -周期的位移空间

$$U^{\varepsilon} := \left\{ u: L_{\#} \rightarrow \mathbf{R}^Z: u_{l+2N} = u_l \quad \text{and} \quad \sum_{l=-N+1}^N u_l = 0 \right\} \quad (1)$$

当中. 由于解是  $2N$ -周期的, 所以我们只考虑原子链条中的一个特定的周期

$$L := \{-N+1, -N+2, \dots, N-1, N\}.$$

令  $\varepsilon = 1/N$ , 那么  $\Omega = [-1, 1]$  正好是我们所考虑的计算区域. 相应的关于形变的可行解集就可以定义为

$$y^{\varepsilon} := \{ y: L_{\#} \rightarrow \mathbf{R}^Z: y_l = \varepsilon F l + v_l, v \in U^{\varepsilon} \} \quad (2)$$

注意到  $U^{\varepsilon}$  和  $y^{\varepsilon}$  可以与节点在原子点上的  $P_1$  有限元函数空间相对应, 这时有有限元划分为  $T_{\varepsilon} = \{ T_l^{\varepsilon} \}_{l \in \mathbf{Z}}$ , 其中  $T_l^{\varepsilon} = [(l-1)\varepsilon, l\varepsilon]$ .

对于一个定义在原子链上的函数  $v \in \mathbf{R}^Z$ , 定义  $v' = \{ v'_l \}_{l \in \mathbf{Z}}$ ,  $v'' = \{ v''_l \}_{l \in \mathbf{Z}}$

$$v'_l := \frac{v_l - v_{l-1}}{\epsilon}, \quad v''_l := \frac{v'_{l+1} - v'_l}{\epsilon}.$$

我们假设原子模型当中原子间只存在最相邻和次相邻的相互作用,并且这种相互作用是由多体势能所描述的.这样,在形变  $y \in y^\epsilon$  下,原子链一个周期中的内能就可以定义为

$$\epsilon_{\text{int}}^a(y) := \epsilon \sum_{l \in L} V(Dy_l) \quad (3)$$

其中  $V \in C^3((0, +\infty)^4; \mathbf{R})$  是一个一般的多体势能,并且

$$Dy_l := (D_1y_l, D_2y_l, D_{-1}y_l, D_{-2}y_l),$$

$$D_1y_l := \frac{y_{l+1} - y_l}{\epsilon}, D_2y_l := \frac{y_{l+2} - y_l}{\epsilon},$$

$$D_{-1}y_l := \frac{y_{l-1} - y_l}{\epsilon}, D_{-2}y_l := \frac{y_{l-2} - y_l}{\epsilon}.$$

Frenkel-Kontorova 模型是通过位错能(misfit energy)构造出来的.一种经典的位错能的构造方式是令<sup>[9-10]</sup>

$$E_{\text{ext}}^m(y) := \epsilon \sum_{l=-N+1}^0 \frac{1}{2} k_0 (y_l - (l-1))^2 + \epsilon \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} k_0 (y_l - l)^2 \quad (4)$$

这样,原子链一个周期的总能量在  $y \in y^\epsilon$  时就可以定义为

$$E_{\text{tot}}^a(y) = E_{\text{int}}^a(y) + E_{\text{ext}}^m(y).$$

我们寻找的全原子模拟的解为

$$\text{Find } y_a \in y^\epsilon, \text{ s. t. } y_a \in \arg \min E_{\text{tot}}^a(y^\epsilon) \quad (5)$$

如果  $y_a$  是问题(5)的解,那么它满足一阶最优条件

$$(f_{\text{int}}^a(y_a), v)_\epsilon = -(f_{\text{ext}}^m(y_a), v)_\epsilon, \forall v \in U^\epsilon \quad (6)$$

其中

$$(u, v) := \sum_{l=-N+1}^N \epsilon u_l v_l, \forall u, v \in U^\epsilon.$$

对于  $y \in y^\epsilon$ ,  $f_{\text{int}}^a(y)$  和  $f_{\text{ext}}^m(y)$  的定义分别为

$$f_l^{a, \text{int}}(y) := \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial E^a(y)}{\partial y_l} = \frac{1}{\epsilon} [\sigma_{l+1}^a(y) - \sigma_l^a(y)], \quad \forall l = -N+1, \dots, N \quad (7)$$

$$f_l^{m, \text{ext}}(y) := \begin{cases} k_0 (y_l - (l-1)), & l = -N+1, \dots, 0, \\ k_0 (y_l - l), & l = 1, \dots, N, \end{cases}$$

$$f_l^{m, \text{ext}}(y) := \begin{cases} k_0 (y_l - (l-1)), & l = -N+1, \dots, 0, \\ k_0 (y_l - l), & l = 1, \dots, N \end{cases} \quad (8)$$

我们将

$$\sigma_l^a(y) := \partial_1 V(Dy_{l-1}) - \partial_{-1} V(Dy_l) + \partial_2 V(Dy_{l-2}) + \partial_2 V(Dy_{l-1}) - \partial_{-2} V(Dy_l) - \partial_{-2} V(Dy_{l+1}) \quad (9)$$

称为原子应力张量(atomistic stress tensor).利用周期性边界条件,容易证明(参见文献[11])式(6)左边部分实际上就是原子内能的一阶变分,也就是说

$$(f_{\text{int}}^a(y_a), v)_\epsilon = (\delta E^a(y), v)_\epsilon = \epsilon \sum_{l \in L} \sigma_l^a v'_l \quad (10)$$

## 2.2 Cauchy-Born 近似与局部 QC 模型

对于一个给定的  $y \in W^{1,\infty}(\Omega; \mathbf{R})$ ,我们定义它所对应的 Cauchy-Born 能量泛函为

$$E^c(y) = \int_{\Omega} W(\nabla y) dx \quad (11)$$

其中  $W(F) := V(F, 2F, -F, -2F) \in C^3(0, +\infty)$  被称为 Cauchy-Born 能量密度<sup>[12]</sup>.由于我们只考虑模型自适应而不考虑网格划分的问题,我们这里的局部 QC(local quasicontinuum method,简称 QCL 方法)模型就是利用网格  $T_\epsilon$  上的  $P-1$  有限元对  $E^c$  作近似,也就是说,

$$E^c(y) = \int_{\Omega} W(\nabla y_h) dx \approx \sum_{l=-N+1}^N \epsilon W(y'_l) := \epsilon_{\text{tot}}^{ql}(y) \quad (12)$$

其中  $E^{ql}(y)$  被称为局部 QC 内能.

我们仍然采用(4)式中所定义的位错能,那么局部 QC 模型的总能量可以定义为

$$E_{\text{tot}}^{ql}(y) = E_{\text{int}}^{ql}(y) + E_{\text{ext}}^m(y) \quad (13)$$

而我们寻找的局部 QC 模型的解就是

$$\text{Find } y_{ql} \in y^\epsilon, \text{ s. t. } y_{ql} \in \arg \min E_{\text{tot}}^{ql}(y^\epsilon) \quad (14)$$

与原子问题类似,如果  $y_{ql}$  是(14)式的一个解,那么它满足

$$(f^c(y_{ql}), v)_\epsilon = -(f_{\text{ext}}^m(y_{ql}), v)_\epsilon, \forall v \in U^\epsilon \quad (15)$$

其中  $f^c(y)$  的定义为

$$f_l^c(y) := \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial E^{ql}(y)}{\partial y_l} = \frac{1}{\epsilon} [\sigma_{l+1}^c(y) - \sigma_l^c(y)], \quad \forall l = -N+1, \dots, N \quad (16)$$

我们将

$$\sigma_l^c(y) := W'(y'_l) \quad (17)$$

定义为连续应力张量.容易得到(参见文献[11])式(15)左边部分是局部 QC 内能的一阶变分,即

$$(f^c(y_{ql}), v)_\epsilon = \langle \delta E^{ql}(y), v \rangle_\epsilon = \epsilon \sum_{k=-N+1}^N \sigma_k^c v'_k \quad (18)$$

## 2.3 力平衡型的原子/连续耦合方法

这一节中,我们介绍两种力平衡型的原子/连续耦合方法,一种是原始的力平衡型原子/连续耦合方法(force-based quasicontinuum method,简称

QCF 方法), 另一种是混合力平衡型的原子/连续耦合方法 (blended force-based quasicontinuum method, 简称 BQCF 方法). 虽然 QCF 方法可以看 BQCF 方法在过渡区域长度为 1 的时候的特例, 但是我们仍然把它单列出来以便更好地理解力平衡型方法的基本思想.

2.3.1 QCF 方法 我们首先将原子链  $L$  分解为  $A$  和  $C$ , 其中  $A$  表示原子区域中的原子集合, 而  $C := L \setminus A$  表示的是连续区域中的原子的集合. 一般来说, 原子区域包含了材料中的缺陷、大形变等形变率较大的部分. 我们进而可以根据  $A$  和  $C$  的划分将计算区域  $\Omega$  划分为  $\Omega_a$  和  $\Omega_c$ . 为了简单起见, 我们假设一个周期中只有一个原子区域  $\Omega_a$  存在, 这样我们可以找到  $-N+1 < l_{\underline{K}} < l_{\bar{K}} < N$  使得

$$A = \{l_{\underline{K}}, l_{\underline{K}+1}, \dots, l_{\bar{K}}\} \quad (19)$$

而  $\Omega_a = [\epsilon l_{\underline{K}}, \epsilon l_{\bar{K}}]$ . 我们将  $A$  和  $C$  的周期性延拓记为  $A_{\#}$  和  $C_{\#}$ .

我们定义在  $y \in y^\epsilon$  处 QCF 力  $f_l^{\text{qcf}}(y)$  为

$$f_l^{\text{qcf}}(y) := \begin{cases} f_l^a(y), & l \in A, \\ f_l^c(y), & l \in C, \end{cases}$$

同时通过以下的非线性变分问题定义 QCF 方法:

$$\text{Find } y_{\text{qcf}} \in y^\epsilon, \text{ s. t. } (f^{y_{\text{qcf}}}(y_{\text{qcf}}), v)_\epsilon = -(f_{\text{ext}}^m(y_{\text{qcf}}), v)_\epsilon, \forall v \in U^\epsilon \quad (20)$$

利用分部求和法, QCF 变分问题 (20) 的左边部分可以写为 (参见文献 [13], 第 4 节)

$$(f^{y_{\text{qcf}}}(y_{\text{qcf}}), v)_\epsilon = \epsilon \sum_{l \in L} \sigma_l^a v_l' + \epsilon \sum_{l \in L} \sigma_l^c v_l' - v_{l_{\underline{K}-1}} (\sigma_{l_{\underline{K}}}^c - \sigma_{l_{\underline{K}}}^a) + v_{l_{\bar{K}}} (\sigma_{l_{\bar{K}+1}}^c - \sigma_{l_{\bar{K}+1}}^a) \quad (21)$$

**注 1** 容易证明, QCF 力是非保守力<sup>[14]</sup>, 也就是说, 不存在某种势能关于位移的导数与 QCF 力相等. 这就导致了不存在某种能量泛函的变分形式与 QCF 的变分形式 (21) 一样. 这与原子模型或 QCL 模型的变分形式可以通过原子模型或 QCL 模型的能量变分导出不同.

与基于能量的原子/连续耦合方法相比, QCF 方法关于  $\epsilon$  具有更高的收敛阶<sup>[14-15]</sup>. 但是可以证明<sup>[17-18]</sup> QCF 算子关于原子系统的大小不具有一致的强制性. 为了解决这个问题, 我们介绍以下 BQCF 方法.

2.3.2 BQCF 方法 为了介绍 BQCF 方法<sup>[15-16, 20-22]</sup>, 我们首先在原子区域和连续区域中间引入过渡区域  $\Omega_b$ , 并且将原子链分解为  $L = A \cup B \cup C$ . 准确地说, 我们可以选择  $l_{\underline{L}}$  和  $l_{\bar{L}}$  使得  $-N+1 < l_{\underline{L}} < l_{\underline{K}} < l_{\bar{K}} < l_{\bar{L}} < N$  并且定义

$$B := \{l_{\underline{L}}, l_{\underline{L}+1}, \dots, l_{\bar{K}}, l_{\bar{K}+1}, \dots, l_{\bar{L}}-1, l_{\bar{L}}\},$$

以及  $\Omega_b = [\epsilon l_{\underline{L}}, \epsilon l_{\bar{K}}] \cup [\epsilon l_{\bar{K}}, \epsilon l_{\bar{L}}]$ . 我们用  $B_{\#}$  表示  $B$  的周期性延拓.

我们定义一个光滑的混合函数  $\beta: \mathbf{Z} \rightarrow [0, 1]$ , 满足

$$\beta(l) = \begin{cases} 0, & \forall l \in A_{\#}, \\ 1, & \forall l \in C_{\#}, \end{cases}$$

同时定义 BQCF 力  $f_l^{\text{bqcf}}$  为

$$f_l^{\text{bqcf}}(y) := (1 - \beta(l_{\underline{K}})) f_l^a(y) + \beta(l) f_l^c(y) \quad (22)$$

这样构造 BQCF 力的目的是将式 (21) 的第二行导致的耦合交界面作用分散开来, 使得 BQCF 方法满足一定的稳定性条件<sup>[20, 15, 21, 16, 22]</sup>. 一般来说, 我们利用一个尺度变换来定义混合函数  $\beta$ , 使得对于  $l \in B$ , 我们有

$$\beta(l) = \begin{cases} \tilde{\beta}\left(\frac{l - l_{\underline{K}}}{l_{\bar{K}} - l_{\underline{L}}}\right), & l_{\underline{L}} \leq l \leq l_{\bar{K}}, \\ \tilde{\beta}\left(\frac{l_{\bar{K}} - l}{l_{\bar{L}} - l_{\bar{K}}}\right), & l_{\bar{K}} \leq l \leq l_{\bar{L}}, \end{cases}$$

其中  $\tilde{\beta} \in C^3$  是一个光滑函数, 其定义将会在后面给出.

BQCF 方法可以通过以下的非线性变分问题进行定义:

$$\text{Find } y_{\text{bqcf}} \in y^\epsilon, \text{ s. t. } (f^{y_{\text{bqcf}}}(y_{\text{bqcf}}), v)_\epsilon = -(f_{\text{ext}}^m(y_{\text{bqcf}}), v)_\epsilon, \forall v \in U^\epsilon \quad (23)$$

我们也可以利用下面的性质将 BQCF 方法写成散度形式 (参见文献 [23, 第 6.4 节]).

**命题 2.1** 令  $y \in y^\epsilon$ .  $\forall v \in U^\epsilon$ , 我们有

$$(f^{y_{\text{qcf}}}(y_{\text{qcf}}), v)_\epsilon = \epsilon \sum_{l \in A \cup B} \sigma_l^a(y) (v_a)'_l + \epsilon \sum_{l \in B \cup C} \sigma_l^c(y) (v_c)'_l \quad (24)$$

其中  $v_a = (1 - \beta)v$ ,  $v_c = \beta v$ .

**证明** 利用  $\beta$  在原子区域中等于 0 而在连续区域中等于 1 的性质我们有

$$(f^{y_{\text{bqcf}}}(y), v)_\epsilon = ((1 - \beta)f^a(y) + \beta f^c(y), v)_\epsilon = (f^a(y), (1 - \beta)v)_\epsilon + (f^c(y), \beta v)_\epsilon.$$

利用  $\beta$  的光滑性以及变分形式 (10 和 (18)), 我们有

$$(f^{y_{\text{bqcf}}}(y), v)_\epsilon = \epsilon \sum_{l \in A \cup B} [1 - \beta(l)v]'_l \sigma_l^a(y) + \epsilon \sum_{l \in B \cup C} (\beta(l)v)'_l \sigma_l^c(y) = \epsilon \sum_{l \in A \cup B} \sigma_l^a(y) (v_a)'_l + \epsilon \sum_{l \in B \cup C} \sigma_l^c(y) (v_c)'_l,$$

正好就是我们列出的结论.

**注 2** 我们注意到, 当  $B = \{l_{\bar{K}} - 1, l_{\bar{K}}\} \cup \{l_{\bar{K}}, l_{\bar{K}} + 1\}$  时, 式 (24) 就会化为 (21). 这就是我们

可以将 QCF 方法看成 BQCF 方法的一个特殊情况的原因.

### 2.4 特殊定义的符号

令  $D$  是  $\mathbf{Z}$  的一个子集合. 对于  $v \in \mathbf{R}^Z$ , 我们定义

$$\|v\|_{l^p_\epsilon(D)} := \begin{cases} \left(\sum_{l \in D} |v_l|^p\right)^{1/p}, 1 \leq p < \infty, \\ \max_{l \in D} |v_l|, p = \infty. \end{cases}$$

如果我们省略符号  $D$ , 那么我们认为  $D = \{-N+1, \dots, N\}$ .

我们赋予  $U^\epsilon$  空间离散的 Sobolev 范数使得对于  $v \in U^\epsilon$ ,

$$\begin{aligned} R[v] &:= \langle \delta \epsilon^a(y_{ac}), v \rangle + (f_{ext}^m(y_{ac}), v)_\epsilon = \\ &\langle \delta \epsilon^a(y_{ac}), v \rangle + (f_{ext}^m(y_{ac}), v)_\epsilon - ((S^{ac}(y_{ac}), v)_\epsilon + (f_{ext}^m(y_{ac}), v)_\epsilon) = \\ &(\langle \delta \epsilon^a(y_{ac}), v \rangle - (S^{ac}(y_{ac}), v)_\epsilon) \end{aligned} \tag{25}$$

其中  $S^{ac} \in \{f^{qcf}, f^{bqcf}\}$ , 而  $y^{ac}$  是相对应的耦合方法的解. 我们将给出 QCF 和 BQCF 的残量上界估计. 由于 QCF 实际上是 BQCF 的一种特殊情况, 我们只需要对 BQCF 的残量进行估计, 之后将 QCF 的残量估计作为一个特殊情形考虑即可.

### 3.2 BQCF 的残量估计

我们现在给出 BQCF 方法的残量估计. 类似的结论在文献[8]出现过, 但这里测试函数空间与文献[7]不同, 从而分析的过程和结论也不同. 我们会发现混合函数会出现在残量估计当中.

**定理 3.1** (BQCF 残量估计) 令  $y^{ac}$  是 BQCF 方法(23)的一个解,  $\min(y^{ac})'_l > 0$  且

$$R^{bqcf} := \langle \delta \epsilon^a(y_{ac}), v \rangle - (f^{bqcf}(y_{ac}), v)_\epsilon.$$

那么 BQCF 方法的残量有以下估计:

$$\begin{aligned} \|R^{bqcf}\|_{U^{-1,2}} &\leq \left\{ \sum_{l \in BU \cup C} (\eta_l^{bqcf})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} = \\ &\left\{ \sum_{l \in BU \cup C} (\tilde{\eta}_l^{bqcf})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} := \tilde{\eta}_{int}^{bqcf} \end{aligned} \tag{26}$$

其中  $\tilde{\eta}_l^{bqcf}$  和  $\eta_l^{bqcf}$  的定义将会在定理的证明中给出.

**证明** 根据原子模型和 BQCF 方法的变分形式(10)和(24), 我们有

$$\begin{aligned} R^{bqcf}[v] &= \epsilon \sum_{l \in L} \sigma_l^a(y_{ac})(v)_l' - \\ &\epsilon \sum_{l \in BU \cup C} \sigma_l^a(y_{ac})(v_c)_l' - \\ &\epsilon \sum_{l \in L} \sigma_l^a(y_{ac})(v_a)_l' = \\ &\epsilon \sum_{l \in C} [\sigma_l^a(y_{ac}) - \sigma_l^a(y_{ac})]v_l' + \end{aligned}$$

$$\|v\|_{U^\epsilon} = \|v\|_{U^{1,2}} := \|v'\|_{l^2_\epsilon} \quad \forall v \in U^\epsilon.$$

我们定义  $U^\epsilon$  的对偶空间  $(U)^*$  的范数为

$$\|T\|_{(U)^*} = \|T\|_{U^{-1,2}} := \sup_{v \in U^\epsilon} T[v],$$

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

$$\forall T \in (U)^*.$$

## 3 残量估计

### 3.1 基本框架

我们首先介绍残量估计的基本框架<sup>[6,7]</sup>. 定义残量算子  $R: y^\epsilon \rightarrow (U)^*$  为

$$\begin{aligned} \epsilon \sum_{l \in B} [\sigma_l^a(y_{ac})v_l' - \sigma_l^a(y_{ac})(v_a)_l' - \\ \sigma_l^c(y_{ac})(v_c)_l'] := R_1^{bqcf}[v] + R_2^{bqcf}[v] \end{aligned} \tag{27}$$

定义

$$R_l := \sigma_l^a(y_{ac}) - \sigma_l^c(y_{ac}) \tag{28}$$

则

$$R_1^{bqcf}[v] = \epsilon \sum_{l \in C} R_l v_l' \leq [\epsilon \sum_{l \in C} R_l^2]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2_\epsilon(C)} \tag{29}$$

现在我们考虑  $R_2^{bqcf}$ . 由  $v_a$  和  $v_c$  的定义容易得到  $v_l' = (v_a)_l' + (v_c)_l'$ . 从而

$$\begin{aligned} R_2^{bqcf}[v] &= \epsilon \sum_{l \in B} [\sigma_l^a(y_{ac}) - \sigma_l^c(y_{ac})](v_c)_l' = \\ &\epsilon \sum_{l \in B} R_l^{int} (\beta v)_l' = \\ &\epsilon \sum_{l \in B} R_l \beta_l' v_{l-1} + \epsilon \sum_{l \in B} R_l \beta_l' v_l' \end{aligned} \tag{30}$$

为简单起见, 我们只给出右过渡区域的分析. 对于式(30)的右端第一项, 我们利用条件  $v_0 = 0$  得到

$$\begin{aligned} |v_l| &= \left| v_l - \frac{1}{2N} \sum_{j=-N+1}^N v_j \right| = \\ &\frac{\epsilon}{2N} \left| \sum_{j=-N+1}^N \frac{v_l - v_j}{\epsilon} \right| \leq \\ &\frac{\epsilon}{2N} \left( \sum_{j=-N+1}^{l-1} \left| \sum_{k=j+1}^l v_k' \right| + \sum_{j=l+1}^N \left| \sum_{k=l+1}^N v_k' \right| \right) \leq \\ &\frac{\epsilon}{2N} \left( \sum_{j=-N+1}^{l-1} |v_k'| (k - (-N+1)) + \right. \end{aligned}$$

$$\sum_{j=l+1}^N |v'_k| (N-k+1) \quad (31)$$

利用 Cauchy-Schwarz 不等式, 对上式右端进行估计得到

$$\begin{aligned} |v_l| &\leq \frac{\epsilon}{2N} \left[ \sum_{j=-N+2}^l (k - (-N+1))^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \sum_{j=l+1}^N (N-k+1)^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2}^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\quad \epsilon \left[ \frac{1}{6} \left( N + \frac{3l^2}{N} - \frac{3l}{N} + \frac{1}{2N} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2}^{\frac{1}{2}} := \\ &\quad \epsilon N(l)^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (32)$$

其中第一个不等式我们利用了平方和公式. 再一次利用 Cauchy-Schwarz 不等式, 我们得到

$$\begin{aligned} \epsilon \sum_{l \in B^r} R_l \beta'_l v_{l-1} &\leq \\ \epsilon \sum_{l \in B^r} |\epsilon R_l \beta'_l| |l-1|^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{j=1}^{l-1} |v'_j|^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \\ \left[ \epsilon \sum_{l \in B^r} |l-1| |\epsilon R_l \beta'_l|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \epsilon \sum_{l \in B^r} \sum_{j=1}^{l-1} |v'_j|^2 \right]^{\frac{1}{2}} &\leq \\ \left[ \epsilon |B^r| \sum_{l \in B^r} |l-1| |\epsilon R_l \beta'_l|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2(B^r)} & \end{aligned} \quad (33)$$

其中  $B^r := \{l_{\bar{K}}, \dots, l_{\bar{L}}\}$ .

同样的分析可以将对称性用在左过渡区域. 而

$$\eta_l^{bcf} := \begin{cases} \epsilon R_l, l \in C, \\ \{2[\epsilon(R_l \beta_l)^2] + 2\epsilon |B^l| |l-1| |\epsilon R_l \beta'_l|^2\}^{\frac{1}{2}}, l \in B^l, \\ \{2[\epsilon(R_l \beta_l)^2] + 2\epsilon |B^r| |l-1| |\epsilon R_l \beta'_l|^2\}^{\frac{1}{2}}, l \in B^r \end{cases} \quad (37)$$

那么将对  $R_1^{bcf}$  和  $R_2^{bcf}$  的估计(29)和(33)式合并并利用 Cauchy-Schwarz 不等式我们就能得到定理的结论. 证毕.

**注 3** 就像我们之前在注 2 中提到的, 我们可以将 QCF 看做是 BQCF 的一个特例. 特别地, 我们定义  $B := \{l_{\bar{K}} - 1, l_{\bar{K}}\} \cup \{l_{\bar{K}}, l_{\bar{K}} + 1\}$ , 进而就可以得到 QCF 的残量估计.

**注 4** 由于我们在本文中讨论的是模型自适应的问题, 因此需要考虑每个原子上的误差估计. 事实上, 容易发现, 由于我们考虑了次相邻相互作用, 第  $l$  个原子的前后四个原子(从  $l-2$  到  $l+2$ )都对  $R_l$  产生了影响. 因此, 第  $l$  个原子的误差也与  $R_{l-2}$  到  $R_{l+2}$  有关. 这就是我们取  $R_l$  前后共 5 个原子点上的  $\eta_l$  进行平均得到  $\tilde{\eta}_l$  的原因.

根据式(31)左端第二项的分析, 我们有如下估计:

$$\begin{aligned} R_2^{bcf} [v] &\leq \left[ \epsilon \sum_{l \in B^r} (R_l \beta_l)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2(B^r)} + \\ &\quad \left[ \epsilon \sum_{l \in B^l} (R_l \beta_l)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2(B^l)}^{\frac{1}{2}} + \\ &\quad \left[ \epsilon |B^r| \sum_{l \in B^r} N(l-1) |\epsilon R_l \beta'_l|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2(B^r)} + \\ &\quad \left[ \epsilon |B^l| \sum_{l \in B^l} N(l-1) |\epsilon R_l \beta'_l|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2(B^l)} \end{aligned} \quad (34)$$

其中  $B^l := \{L, \dots, K\}$ . 将(29)和(34)式结合起来, 利用加权的 Cauchy-Schwarz 不等式我们得到

$$\begin{aligned} R^{bcf} [v] &= R_1^{bcf} [v] + R_2^{bcf} [v] \leq \\ &\quad \left[ 9 \sum_{l \in C} \epsilon R_l^2 + 9 \sum_{l \in B^r} \epsilon (R_l \beta_l)^2 + \right. \\ &\quad \left. 9 \sum_{l \in B^l} \epsilon (R_l \beta_l)^2 + 3\epsilon |B^r| \sum_{l \in B^r} N(l-1) |\epsilon R_l \beta'_l|^2 + \right. \\ &\quad \left. 3\epsilon |B^l| \sum_{l \in B^l} N(l-1) |\epsilon R_l \beta'_l|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|v'\|_{l^2} \end{aligned} \quad (35)$$

现在令

$$(\tilde{\eta}_l^{bcf})^2 := \frac{1}{5} \sum_{l=2}^{l+2} (\eta_l^{bcf})^2 \quad (36)$$

其中

## 4 稳定性

为了给出耦合方法的误差估计, 我们需要相对应的后验稳定性. 在我们的问题当中, 后验稳定性是通过耦合问题的解  $y_{ac}$  在原子模型的二阶变分的正定性给出来的.

我们首先定义作用范围的集合为

$$R = \{1, -1, 2, -2\} \quad (38)$$

并且定义最相邻和次相邻作用范围的集合分别为

$$R^{NN} = \{1, -1\}, R^{NNN} = \{2, -2\} \quad (39)$$

直接计算可以得到在  $y \in y^e$  处原子模型的二阶变分为

$$\langle \delta^2 E_{tot}^y(y) v, v \rangle = \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\rho \in R} \partial_{\rho, \rho} V(D_y l) (D_\rho v_l)^2 +$$

$$\begin{aligned}
& \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\substack{\rho, \xi \in R^{NN}, \\ \rho \neq \xi}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) (D_{\rho} v_l) (D_{\xi} v_l) + \\
& \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\substack{\rho \in R^{NN}, \xi \in R^{NNN}, \\ \alpha \xi \in R^{NV}, \rho \in R^{NVN}}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) (D_{\rho} v_l) (D_{\xi} v_l) + \\
& \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\substack{\rho, \xi \in R^{NNN}, \\ \rho \neq \xi}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) (D_{\rho} v_l) (D_{\xi} v_l) + \\
& \epsilon \sum_{l=-N+1}^N k_0 v_l^2 := Stab_1 + Stab_2 + Stab_3 + Stab_4 + \\
& \quad Stab_5 \tag{40}
\end{aligned}$$

我们首先估计  $Stab_5$ . 由于  $v \in U^\epsilon$ , 根据  $U^\epsilon$  的周期性边界条件, 我们有以下的逆估计

$$\begin{aligned}
\sum_{l=-N+1}^N (v'_l)^2 &= \sum_{l=-N+1}^N \left( \frac{v_l - v_{l-1}}{\epsilon} \right)^2 \\
&\leq \frac{1}{\epsilon^2} \sum_{l=-N+1}^N 2(v_l^2 + v_{l-1}^2) = \frac{4}{\epsilon^2} \sum_{l=-N+1}^N v_l^2 \tag{41}
\end{aligned}$$

由此我们得到

$$\epsilon \sum_{l=-N+1}^N k_0 v_l^2 \geq \epsilon^3 \sum_{l=-N+1}^N \frac{k_0}{4} (v'_l)^2 \tag{42}$$

之后, 对(40)式中的剩余几项进行估计(参见文献[8]). 根据平均值不等式和每一种情况下组合的个数, 我们可以对  $Stab_2, Stab_3, Stab_4$  分别估计得到

$$\begin{aligned}
Stab_2 &\geq \sum_{l \in L} C_l^{cross, NN} \sum_{\rho \in R^{NN}} (D_{\rho} v_l)^2, \\
Stab_3 &\geq \sum_{l \in L} C_l^{cross, NN-NNN} \sum_{\rho \in R} (D_{\rho} v_l)^2, \\
Stab_4 &\geq \sum_{l \in L} C_l^{cross, NNN} \sum_{\rho \in R^{NNN}} (D_{\rho} v_l)^2,
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
C_l^{cross, NN} &= \min \{ 0, \min_{\substack{\rho, \xi \in R^{NN}, \\ \rho \neq \xi}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) \}, \\
C_l^{cross, NN-NNN} &= \min \{ 0, \min_{\substack{\rho \in R^{NN}, \xi \in R^{NNN}, \\ \alpha \xi \in R^{NN}, \rho \in R^{NNN}}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) \}, \\
C_l^{cross, NNN} &= \min \{ 0, \min_{\substack{\rho, \xi \in R^{NNN}, \\ \rho \neq \xi}} \partial_{\rho, \xi} V(D y_l) \} \tag{43}
\end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned}
C_l^{NN} &= \min_{\rho \in R^{NN}} \partial_{\rho, \rho} V(D y_l), \\
C_l^{NNN} &= \min_{\rho \in R^{NNN}} \partial_{\rho, \rho} V(D y_l) \tag{44}
\end{aligned}$$

我们可以将最相邻作用和次相邻作用的项分开并且对式(40)中的前四项得到以下估计:

$$\begin{aligned}
& Stab_1 + Stab_2 + Stab_3 + Stab_4 \geq \\
& \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\rho \in R^{NV}} [C_l^{NN} + C_l^{cross, NN} + C_l^{cross, NN-NNN}] (D_{\rho} v_l)^2 +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \epsilon \sum_{l \in L} \sum_{\rho \in R^{NN}} [C_l^{NNN} + C_l^{cross, NNN} + C_l^{cross, NN-NNN}] (D_{\rho} v_l)^2 := \\
& \epsilon \sum_{l \in L} C_l^1 [ |v'_l|^2 + |v'_{l+1}|^2 ] + \\
& \epsilon \sum_{l \in L} C_l^2 [ |v'_l + v'_{l-1}|^2 + |v'_{l+1} + v'_{l+2}|^2 ] \tag{45}
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
C_l^1 &= C_l^{NN} + C_l^{cross, NN} + C_l^{cross, NN-NNN}, \\
C_l^2 &= C_l^{NNN} + C_l^{cross, NNN} + C_l^{cross, NN-NNN}.
\end{aligned}$$

对式(51)的估计可以利用以下等价关系

$$|v'_l + v'_{l+1}|^2 = 2 |v'_l|^2 + 2 |v'_{l+1}|^2 - \epsilon^2 |v_l''|^2,$$

从而得到以下估计

$$\begin{aligned}
\langle \delta^2 E_{tot}^a(y) v, v \rangle &\geq \epsilon \sum_{l \in L} A_l(y) |v'_l|^2 + \\
& \epsilon^3 \sum_{l \in L} B_l(y) |v_l''|^2 \tag{46}
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
A_l &= C_l^1 + C_{l-1}^1 + 2 C_{l-2}^2 + 2 C_{l-1}^2 + \\
& 2 C_l^2 + 2 C_{l+1}^2 + \frac{k_0 \epsilon^2}{4}, \\
B_l &= -C_{l-1}^2 - C_{l+1}^2 \tag{47}
\end{aligned}$$

我们假设  $B_l > 0$  (该条件我们会在数值实验 6.2 节中进行数值上的验证). 可以得到以下关于原子模型二阶变分在  $y_{ac}$  具有稳定性的充分条件的引理

**引理 4.1** 令  $y_{ac} \in y^\epsilon, ac \in \{qcf, bqcf\}$  是基于力的耦合问题(20)与(23)的一个解. 假设  $B_l(y_{ac}) > 0, \forall l \in L$ , 其中  $B_l(y_{ac})$  的定义由式(47)给出. 那么

$$\langle \delta^2 \epsilon^a(y_{ac}) v, v \rangle \geq A_*(y_{ac}) \|v'\|_{l_\epsilon}^2, A_*(y_{ac}) := \min_{l \in L} A_l(y_{ac}) \quad \forall v \in U^\epsilon \tag{48}$$

$A_l(y_{ac})$  由式(47)给出.

**注 5** 在一般的短程相互作用中, 最相邻相互作用都是占主导的. 这也是为什么我们在稳定性分析中将最相邻相互作用项单独列出来的原因. 在我们数值实验中也会展示这个特点.

在我们给出后验误差估计之前, 我们列出一个有用的结论, 这就是  $\delta^2 \epsilon^a$  的 Lipschitz 界. 这个界的证明可以参见文献[8]中的附录 A.

**引理 4.2** 令  $y, z \in y^\epsilon$  且  $y_l, z_l \in E: [\mu, \nu]$ , 其中  $\mu < \nu$  为两个常数. 那么

$$\begin{aligned}
| \langle \delta^2 E_{tot}^a(y) - \delta^2 E_{tot}^a(z) \rangle v, w \rangle | &\leq \\
C_{Lip} \|y' - z'\|_{l_\epsilon}^2 \|v'\|_{l_\epsilon}^2 \|w'\|_{l_\epsilon}^2, \quad \forall v, w \in U
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
C_{Lip} &= 2 \bar{M}_2(E) + 22 \underline{M}_2(E) + \\
& 72 \bar{m}_2(E) + 120 \underline{m}_2(E),
\end{aligned}$$

这里  $m_2(E)$ ,  $\bar{m}_2(E)$ ,  $\underline{M}_2(E)$  和  $\bar{M}_2(E)$  在文献[8] 的附录 A 中有相应的定义.

## 5 后验误差估计

我们现在利用之前的残量估计和稳定性估计给出后验误差估计, 结论由下面的定理给出.

**定理 5.1** 令  $y_{ac} \in y^f$ ,  $ac \in \{qcf, bqc\}$  是基于力的耦合问题(20)与(23)的一个解, 且  $B_l(y_{ac}) > 0$ ,  $\forall l \in L$ ,  $A_*(y_{ac})$  其中  $B_l$  和  $A_*$  分别由式(47)和(48)定义. 设  $y_a$  是原子问题(5)的解, 且满足  $\exists \tau > 0$ ,

$$\|y'_a - y'_{ac}\|_{l_\epsilon^c} \leq \tau \quad (49)$$

如果  $\tau$  足够小, 我们就有如下的后验误差估计

$$\|y'_a - y'_{ac}\|_{l_\epsilon^2} \leq \frac{2}{A_*(y_{ac})} \eta_{mt}^{ac} \quad (50)$$

其中  $\eta_{mt}^{ac}$  在式(26)中给出.

**证明** 令  $e = y_a - y_{ac} \in U^\epsilon$ . 由微分中值定理, 我们知道存在  $\theta \in \text{con } v\{y_a, y_{ac}\}$  使得

$$\begin{aligned} |\langle \delta^2 E_{tot}^a(\theta)e, e \rangle| &= |\langle \delta \epsilon_{tot}^a(y_{ac}), e \rangle - \langle \delta \epsilon_{tot}^a(y_a), e \rangle| = \\ &= |\langle \delta \epsilon_{tot}^a(y_{ac}), e \rangle - \langle \delta \epsilon_{tot}^{ac}(y_{ac}), e \rangle| = \\ &= |\langle \delta \epsilon^a(y_{ac}), e \rangle - \langle S^{ac}(y_{ac}), v \rangle_\epsilon| \quad (51) \end{aligned}$$

以上等式的右端刚好就是式(25)中定义的  $R[v]$ .

因此, 我们根据式(26)的估计有

$$|\langle \delta^2 E_{tot}^a(\theta)e, e \rangle| = |R_{mt}[v]| \leq \eta_{mt}^{ac} \|e'\|_{l_\epsilon^2} \quad (51)$$

接下来我们计算  $|\langle \delta^2 E_{tot}^a(\theta)e, e \rangle|$ . 利用引理 4.2 中的 Lipschitz 条件的估计和引理 4.1 的稳定性估计, 由我们对  $B_l(y_{ac})$  和  $A_*(y_{ac})$  的假设以及假设(49)我们得到

$$\begin{aligned} |\langle \delta^2 E_{tot}^a(\theta)e, e \rangle| &\geq |\langle \delta^2 E_{tot}^a(y_{ac})e, e \rangle| - \\ &C_{Lip} \|\theta - y_{ac}\| \|e'\|_{l_\epsilon^2} \geq \\ &|\langle \delta^2 E_{tot}^a(y_{ac})e, e \rangle| - C_{Lip} \|y_a - y_{ac}\| \|e'\|_{l_\epsilon^2} \geq \\ &(A_*(y_{ac}) - C_{Lip}\tau) \|e'\|_{l_\epsilon^2}. \end{aligned}$$

如果我们要求  $\tau \leq A_*(y_{ac})/(2C_{Lip})$ , 我们最终可以得到后验误差估计

$$\frac{1}{2} A_*(y_{ac}) \|e'\|_{l_\epsilon^2} \leq \eta_{mt}^{ac} \|e'\|_{l_\epsilon^2}.$$

上式两边同时除以  $\|e'\|_{l_\epsilon^2}$ , 我们就得到了定理中所给出的误差估计. 证毕.

**注 6** 我们在定理 5.1 中利用了一个重要的假设式(49), 这表示  $y_{ac}$  与  $y_a$  足够的接近. 这个假设事实上可以通过反函数定理去掉<sup>[5, 24]</sup>, 但是这样会使得我们的定理的证明和表述变得复杂. 由于我们主要考虑的是后验误差估计子的导出和模型自适应的问题, 我们不再在这里赘述反函数定理及其在这个问题上的应用.

## 6 数值实验

在这个部分中, 我们利用数值实验来验证我们分析的结果. 我们将计算区域限定在  $[-1, 1]$  上, 并且令  $F = (2N + 1)/2N$ . 这样的  $F$  会使得我们的系统在边界上接近于平衡态, 从而避免边界条件对计算结果的干扰, 而这样的设定本身也符合材料的真实形变情况. 我们假设原子系统具有 EAM(Embedded Atom Method) 势能. EAM 势能是一种经典的并且常用的多体作用势能<sup>[25]</sup>, 有一个二体作用部分和一个多体作用部分相加合成. 这里我们令

$$\begin{aligned} V(D_j y_l) &= \frac{1}{2} \sum_{\rho \in R} (\varphi(D_i y_l) + \varphi(-D_j y_l)) + \\ &\tilde{F}(\sum_{\rho \in R} (\psi(D_i y_l) + \psi(-D_j y_l))), \end{aligned}$$

其中  $\phi(r) = e^{-2a(r-1)} - 23^{-a(r-1)}$  是一个经典的 Morse 二体势能,  $\psi(r) = e^{-br}$ ,  $\tilde{F}(\rho) = c[(\rho - \rho_0)^2 + (\rho - \rho_0)^4]$  是一个多体势能. 同时, 参数满足  $a = 4.4$ ,  $b = 3$ ,  $c = 5$ ,  $\rho_0 = 2e^{-b}$ . 对于位错能, 我们这里设  $k_0 = 0.4$ . 这样的设定可以使得我们得到一个非线性的且中间有位错的形变, 但又不致于使系统本身产生断裂.

我们考虑一个  $N = 500$  的原子系统, 并且令 BCF 过渡区域的混合函数由如下三种插值函数来定义:

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0, \\ x, & 0 \leq x \leq 1, \\ 1, & x > 1, \end{cases} \\ \tilde{\beta}(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -2x^3 + 3x^2, & 0 \leq x \leq 1, \\ 1, & x > 1, \end{cases} \\ \tilde{\beta}(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 6x^5 - 15x^4 + 10x^3, & 0 \leq x \leq 1, \\ 1, & x > 1 \end{cases} \end{aligned}$$

这三种插值函数分别对应着一次、三次和五次样条插值<sup>[16]</sup>. 在稳定的情况下, 这三种混合函数没有本质的区别, 但在接近拉伸极限的情况下, 三次和五次样条插值在保证 BQCF 算子的正定性方面具有优势, 相关分析和数值实验见文献[16, 20, 22-23].

我们采用两种策略来决定 BQCF 方法中过渡区域的长度. 第一种策略是固定过渡区域的长度, 也就是说令  $l_L - l_R$  为 5, 10 和 20. 第二种策略是将原子区域的半径与单边的混合区域的长度设为相等, 这样可以保证计算结果有拟最优的  $H^1$  误差(详



见文献[16,22]).

## 6.1 自适应算法

在我们的计算中,我们假设系统中每个原子都是一个自由度或者说网格节点.我们考虑自适应的选择原子区域和混合区域的问题,我们注意到类似的问题在文献[9,18]中也考虑过,但是其中所用的后验误差估计子是不同的.我们利用式(34)中定义的误差估计子,依据 Dörfler 准则构造如下算法:

### 算法 6.1 模型自适应算法

(1) 生成区域划分. 将参考晶格中位置在  $0, \pm\epsilon, \pm 2\epsilon, \dots, (\bar{K}-1)\epsilon$  以及  $(\underline{K}-1)\epsilon$  上的原子标注为具有原子属性的原子. 根据过渡区域的长度生成过渡区域,并将过渡区域之外的原子标注为具有连续属性的原子.

(2) 求解 BQCF 问题. 根据现在对晶格的划分计算 BQCF 解,并计算误差估计子  $\eta_l^{ac}$ , 其中  $l \in BUC$ .

(3) 标记新的原子区域. 选择最小的指标集合  $D \subset \{1, \dots, N\}$  使得

$$\sum_{l \in L} (\eta_l^{ac})^2 \geq \frac{1}{2} \sum_{l \in D} (\eta_l^{ac})^2.$$

(4) 改进区域划分. 将  $D$  中的原子标记为具有原子属性的原子,与之前具有原子属性的原子共同生成原子区域,并据此相应的生成过渡区域和连续区域.

(5) 当  $[\sum_{l \in L} (\eta_l^{ac})^2]^{1/2} < 10^{-7}$  时停止;否则回到第 2 步.

## 6.2 数值结果

我们对数值实验的结果作如下总结:

(1) 在图 2 中,我们展示了应变的误差与原子和过渡区域原子个数(长度)的关系.我们发现,导出的后验误差估计子和自适应算法对模型自适应问题有很好的效果,尤其可以观察到当混合区域长度设定为 20 时初始的区域分解并不是非常好.显然,这种情况下应该有更多的原子在原子区域当中.这时自适应方法会自动调整不同区域的分配,使得误差与原子和混合区域长度的关系达到拟最优.我们还可以观察到对于 Frenkel-Kontorova 的模型自适应来说,误差与原子区域和混合区域原子个数的呈  $N^{-3}$  关系.

(2) 我们同时计算了后验误差估计子的效率因子,也就是估计误差与真实误差之间的比值,并且在图 3 中示出.我们的效率因子比较大,而且不论是 QCF 还是 BQCF 方法效率函数都有一个明

显的上升再下降的过程.回忆我们后验误差估计子的形式可以发现,后验误差估计子中的一个系数会随着与原点的距离变大而变大.这是因为我们需要使用庞加莱不等式来对测试函数的混合区域中(在 QCF 方法中就是耦合交界面上)的项进行估计,这种估计的方法可能引起后验误差估计子偏大.因此,我们后续研究中可以考虑如何提高后验误差估计子的效率.

(3) 我们也计算了式(47)中定义的  $B_l$  常数,并将  $B_l$  取最小画在图 4 中.我们发现我们的假设,即  $B_l > 0$  是成立的,并且  $B_l$  的值稳定在 0.315 左右,我们的假设是满足的.

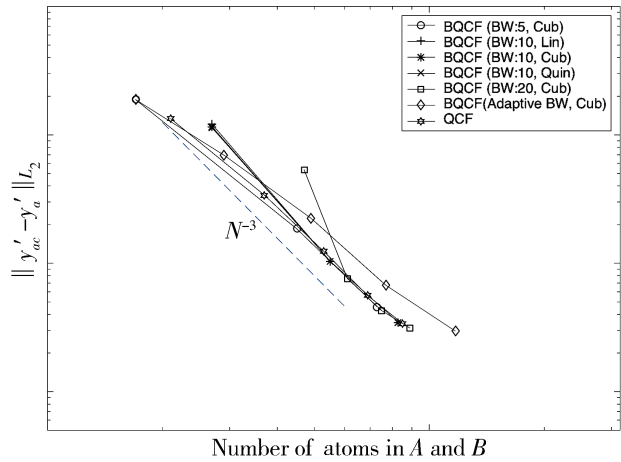


图 2 应变误差与原子和过渡区域原子个数的关系  
Fig. 2 Relationship between displacement error and number of atoms in the atomistic region and the blending region

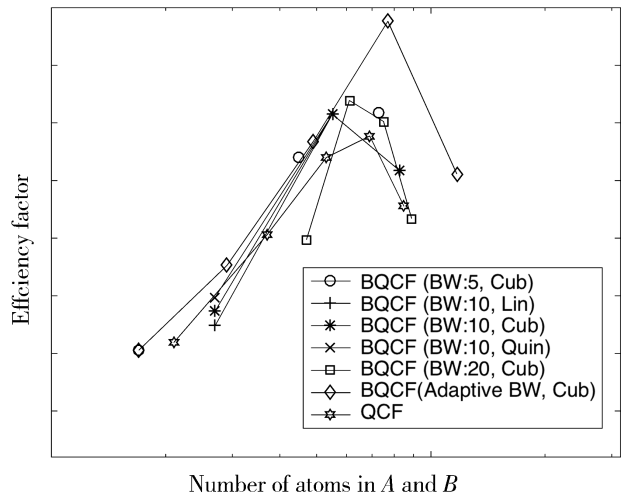


图 3 效率因子与原子和过渡区域原子个数的关系  
Fig. 3 Relationship between efficiency factor and number of atoms in the atomistic region and the blending region

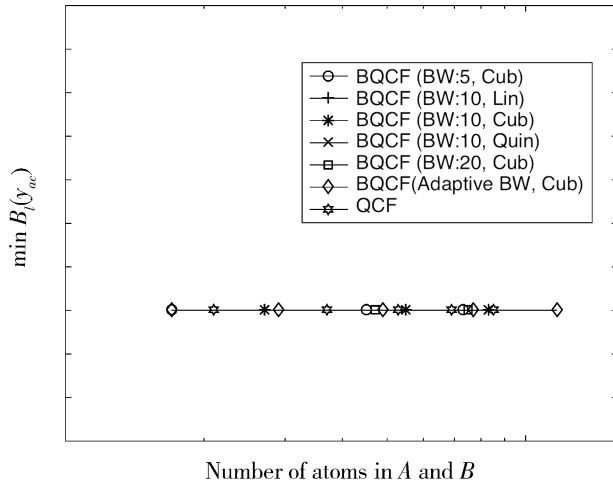


图 4 常数  $B_i$  与原子和过渡区域原子个数的关系

Fig. 4 Relationship between  $B_i$  and number of atoms in the atomistic region and the blending region

## 7 结论与展望

在这篇文章中,我们针对 Frenkel-Kontorova 模型的 BQCF 方法导出了基于残量后验误差估计子. 根据估计子,我们给出了模型自适应,即自适应选取原子区域、过渡区域和连续区域的算法. 数值实验证明了我们后验误差估计子和算法的可行性.

未来我们可以再以下几个方向上进行进一步的研究.

第一,正如我们刚才提到的,我们可以尝试改进后验误差估计子,使之不依赖于与原点之间的距离,从而一致的提高后验误差估计子的效率因子.

第二,我们可以针对 Frenkel-Kontorova 模型在模型自适应基础上考虑网格自适应的问题,导出有关网格划分的后验误差估计子.

第三,我们可以尝试将 BQCF 方法基于残量的后验误差估计子推广到二维和三维.

第四,我们可以考虑自适应选取混合区域长度和混合函数的方法. 事实上,在数值例子中我们观察到,混合区域的长度和混合函数对计算精度没有主要影响,这是力平衡型方法本身的精度所决定的. 但是在接近不稳定的情况下,不同的力平衡型方法对于临界值的估计是不同的<sup>[20,16]</sup>. 所以,我们可以以接近不稳定的情况为突破口,寻找自适应选取混合区域长度和混合函数的方法.

## 参考文献:

[1] Ortiz M, Phillips R, Tadmor E B. Quasicontinuum analysis of defects in solids[J]. Phil Mag, 1996,

73: 1529.

[2] Shenoy V B, Miller R, Tadmor E B, *et al.* Quasi-continuum models of interfacial structure and deformation [J]. Phys Rev Lett, 1998, 80: 742.

[3] Miller R E, Tadmor E B. The Quasicontinuum method: overview, applications and current directions [J]. J Comput Aid Mat Des, 2003, 9: 203.

[4] Miller R E, Tadmor E B. A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods [J]. Model Simul Mater Sc, 2009, 17: 053001.

[5] Ortner C. A priori and a posteriori analysis of the quasinonlocal quasicontinuum method in 1D [J]. Math Comp, 2011, 80: 1265.

[6] Ortner C, Wang H. A posteriori error control for a quasi-continuum approximation of a periodic chain [J]. IMA J Numer Anal, 2014, 34: 977.

[7] 何杰,王皓,胡兵,等. 基于能量多体作用的原子/连续耦合方法的后验误差估计[J]. 四川大学学报:自然科学版, 2017, 54: 895.

[8] Wang H, Liu S, Yang F. A posteriori error control for three typical force-based atomistic-to-continuum coupling methods for an atomistic chain [J]. Numer Math Theory-Me, 2019, 12: 233.

[9] Arndt M, Luskin M. Goal-oriented atomistic-continuum adaptivity for the quasicontinuum approximation [J]. Int J Multiscale Com, 2007, 5: 407.

[10] Arndt M, Luskin M. Error estimation and atomistic-continuum adaptivity for the quasicontinuum approximation of a Frenkel-Kontorova model [J]. Multiscale Model Sim, 2008, 7: 147.

[11] Makridakis C, Ortner C, Süli E. Stress-based atomistic/continuum coupling: a new variant of the quasicontinuum approximation [J]. Int J Multiscale Comput Engrg, 2012, 10: 51.

[12] Ortner C, Zhang L. Construction and sharp consistency estimates for atomistic/continuum coupling methods with general interfaces: a 2D model problem [J]. SIAM J Numer Anal, 2012, 50: 2940.

[13] Makridakis C, Ortner C, Süli E. A priori error analysis of two force-based atomistic/continuum models of a periodic chain [J]. Numer Math, 2011, 119: 83.

[14] Dobson M, Luskin M. Analysis of a force-based quasicontinuum approximation [J]. M2AN Math Model Numer Anal, 2008, 42: 113.

[15] Ming P, Lu J. Convergence of a force-based hybrid method in three dimensions[J]. Comm Pure Appl

- Math, 2013, 66: 83.
- [16] Li X, Luskin M, Ortner C, *et al.* Theory-based benchmarking of the blended force-based quasicontinuum method [J]. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2014, 268: 763.
- [17] Dobson M, Luskin M, Ortner C. Stability, instability, and error of the force-based quasicontinuum approximation [J]. *Arch Ration Mech Anal*, 2010, 197: 179.
- [18] Dobson M, Luskin M, Ortner C. Sharp stability estimates for the force-based quasicontinuum approximation of homogeneous tensile deformation [J]. *Multiscale Model Sim*, 2010, 8: 782.
- [19] Dobson M, Ortner C, Shapeev A V. The spectrum of the force-based quasicontinuum operator for a homogeneous periodic chain [J]. *Multiscale Model Sim*, 2012, 10: 744.
- [20] Li X, Luskin M, Ortner C. Positive-definiteness of the blended force-based quasicontinuum method [J]. *Multiscale Model Sim*, 2012, 10: 1023.
- [21] Lu J, Ming P. Convergence of a force-based hybrid method with planar sharp interface [J]. *IAM J Numer Anal*, 2014, 52: 2005.
- [22] Li X, Ortner C, Shapeev A V, *et al.* Analysis of blended atomistic/continuum hybrid methods [J]. *Numer Math*, 2016, 134: 275.
- [23] Ortner C, Luskin M. Atomistic-to-continuum coupling [J]. *Acta Numer*, 2013, 22: 398.
- [24] Wang H, Liao M, Lin P, *et al.* A posteriori estimation and adaptive algorithm for the atomistic/continuum coupling in two dimensions [J]. *SIAM J Sci Comput*, 2018, 40: A2087.
- [25] Tadmor E, Miller R. *Modeling materials* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

#### 引用本文格式:

中文: 廖明杰, 王皓. 求解 Frenkel-Kontorova 模型自适应问题的混合力平衡型原子/连续耦合方法[J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2019, 56: 802.

英文: Liao M J, Wang H. Blended force-based atomistic-continuum coupling method for the model adaptivity of a Frenkel-Kontorova model [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2019, 56: 802.