

多尺度计算数值界面条件的设计与分析

唐少强*

* (北京大学力学系, 北京 100871)

多尺度方法在物理问题的应用分析中发挥着日益重要的作用, 交互多尺度计算的核心技术在于数值界面的处理。我们将简要介绍晶格系统计算中两种高精度的数值界面条件: 时间历史积分方法 (用于桥接多尺度方法和拟谱多尺度方法) 和速度界面条件。在此基础上, 我们进一步探讨下述两个问题。

一、双原子系统的速度界面条件与稳定性分析。晶格通常由多种原子组成, 相应地, 其中的原子振荡模式也包括声学支和光学支。通过对反射系数加以控制, 我们设计出相应的速度界面条件, 保证声学支模态和光学支模态的反射系数都小于 1。然而, 数值计算表明, 这样的数值界面条件并不稳定。我们进而对附加了数值界面条件的 (有限) 单原子链进行细致的分析。我们通过完整的特征值问题研究发现, 反射系数法给出不正确的稳定性条件。在反射系数法认定为稳定的参数区域内, 我们得到了指数增长的表面模态。表面模态常常成对出现, 其特征值非常接近, 特征向量分别为空间对称和反对称的, 这些模态完全不是傅立叶模态形式的, 而傅立叶模态不构成解空间里的基导致反射系数法失效。我们还给出了一个简化的判别稳定性的低阶多项式。数值计算验证了我们的理论分析。此外, 在实际计算中 (无界域问题或多尺度计算问题), 准确界面条件的一个小小的扰动通常会带来一个很小然而实部为特征值, 该特征值在长时间计算中会导致不稳定性。我们也对半无限链、连续的波动问题进行了类似的讨论。

二、在应用问题中, 粗网格区域对原子计算区域的作用不只是把原子振荡无反射地传播出去, 波动也会从粗网格区域传入原子计算区域。例如, 热运动 (热浴) 的一种处理方法就是把相应的原子振荡加载到数值界面上。我们设计了一种双向无反射边界条件, 有效处理外传的原子振荡, 同时正确加载内传的振荡。我们注意到, 文献上多数热浴都是直接加载到原子链的所有原子, 这会导致原子链波动和热运动的混淆。我们提出的双向无反射边界条件可以解决这一困难, 进而为非零温度下的准确多尺度计算提供基础。

关键词: 多尺度计算, 界面条件, 稳定性