arXiv:2602.05686v1 [cs.CE] 5 Feb 2026

研究论文

适用于非均匀各向异性材料问题的平滑聚合代数多重网格

Max Firmbach[1] | Malachi Phillips[2] | ChristianGlusa[2] | Alexander Popp[1] | Christopher M. Siefert[2] | Matthias Mayr[1,3]

[1]数学与计算机模拟研究所，慕尼黑联邦国防军大学，巴伐利亚，德国[2]计算机科学研究所，桑迪亚国家实验室，新墨西哥州，美国

s

[3]数据科学与计算实验室，慕尼黑联邦国防军大学，巴伐利亚，德国

通信作者
通讯作者：Max Firmbach 电子邮箱：max.firmbach@unibw.de

现地址
数学与计算机模拟研究所（IMCS），慕尼黑联邦国防军大学，
Werner-Heisenberg-Weg 39，85577 Neubiberg，德国巴伐利亚

摘要

本文为平滑聚合代数多重网格方法提出了一种材料感知的连接强度度量，旨在提高其求解具有异质和各向异性材料属性的标量偏微分方程时的稳健性。传统的连接强度度量通常仅依赖矩阵元素或几何距离，因此往往无法捕捉材料界面处的弱耦合，也无法与各向异性方向对齐，最终导致收敛性不佳。所提出的方法将材料张量信息直接纳入粗化过程，从而能够可靠地检测弱连接，并确保粗层保留底层问题的真实结构。因此，光滑误差分量能够得到恰当表示，尖锐的系数跳跃或方向性各向异性也能得到一致处理。广泛的学术测试和实际应用（包括热激活电池和太阳能电池）表明，所提出的方法在材料对比、各向异性和网格变化的情况下均能保持稳健性。代数多重网格方法的可扩展性和并行性能，凸显了其适用于大规模高性能计算环境。

关键词
代数多重网格，平滑聚合，非均质材料，各向异性材料，连接强度

1 引言

多材料椭圆边值问题出现在各种不同的场景中，例如计算电磁学[1–3]、稳态热扩散[4,5]，、流体流动的压力投影格式[6–8]，或热激活电池[9]。特别是，热激活电池的模拟需要求解复杂的多物理场系统。其中一个关键子问题是计算电压场，该问题由欧姆定律支配；由于涉及的材料属性高度非均质，因此构成了一个颇具挑战性的标量多材料椭圆边值问题。例如，正极、隔膜和负极各层之间的电导率差异可达十个数量级。这些尖锐的材料界面在整个电池堆中反复出现，因此需要进行精细解析，也就需要在堆叠方向上使用大量单元。这往往会导致网格呈现高度各向异性。因此，要高效求解这类问题，就需要采用能够稳健处理网格各向异性和非均质材料界面的求解方法。

在本　本文具体考虑定义在域 $\Omega \subset \mathbb{R}$上的材料加权拉普拉斯问题 ^{d}，

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\sigma(x)\nabla u) &= f \qquad \text{in } \Omega, \\ u &= g \qquad \text{on } \Gamma_{\mathrm{D}}, \\ -(\sigma(x)\nabla u) \cdot n &= h \qquad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}}, \end{aligned} \tag{1}$$

缩写： AMG，代数多重网格；SA，平滑聚合；CG，共轭梯度。

其中， Γ_D 和 Γ_N 分别表示边界 $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$的狄利克雷部分和诺伊曼部分。材料张量$\sigma(x) \in \mathbb{R}^{d\times d}$可随空间显著变化，也可能具有各向异性，假设其为对称正定矩阵。为进行有限元离散，我们将（1）转化为相应的变分形式：求 $u \in H^1_D(\Omega) := \{v \in H^1(\Omega) \mid \mathrm{trace}_{\Gamma_D} v = g\}$，使得

$$a(u, v) = b(v) \qquad \forall v \in H^1_0(\Omega) := \{v \in H^1(\Omega) \mid \mathrm{trace}_{\Gamma_D} v = 0\}, \tag{2}$$

双线性形式 $a(u,v)$ 和线性泛函 $b(v)$ 的定义如下

$$a(u, v) = \int_\Omega (\sigma(x)\nabla u) \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x \quad \text{and} \quad b(v) = \int_\Omega fv \, \mathrm{d}x. \tag{3}$$

Di用有限元离散化该问题，可得到待求解的线性方程组

$$Au = b, \tag{4}$$

其中，刚度矩阵为 A，右端载荷向量为 b，离散解向量为有限元空间 $V_h(\Omega)$ 中的u。为简化记号，我们不对离散量作特别标注。尽管所介绍的方法适用于任意网格，我们仅关注基于二维四边形网格和三维六面体网格的离散化。

代数多重网格（AMG）方法[10,11] 已成功应用于我们的模型问题，但在材料张量 $\sigma(x)$高度非均质或高度各向异性的情况下可能会遇到困难。在这些情况下，AMG 方法往往无法正确解析底层问题的材料属性，从而生成较差的粗网格，导致方法收敛不佳。虽然针对高度非均质材料，也存在 AMG 之外的求解方法，例如用于区域分解方法[12,13] 或块预条件[14],的特殊粗空间，但在实际应用中，调整 AMG 生成的粗网格以更好地适应材料，无疑是更常见且更方便用户的方法。这些方法通常使用所谓的连接强度度量来识别并舍弃矩阵 A中的“次要”元素，从而提高粗网格质量。尽管连接强度度量是 AMG 粗化过程的基本组成部分，但并不存在适用于所有情况的理想度量。“经典”的连接强度方法直接基于矩阵模板本身[10,11] 来确定相邻节点间的强耦合。对于平滑聚合（SA）代数多重网格，强耦合邻域的定义方式类似[15],，同样利用矩阵元素来确定弱连接。由于这些度量通常是为主对角占优的M-矩阵而设计的，随着材料对比度增大，A 逐渐偏离M-矩阵，针对我们模型问题的 AMG 收敛性通常会迅速下降。为克服这些问题，人们提出了基于能量的方法[16],，试图度量A逆矩阵中各元素的“大小”。其中一种扩展方法是考虑某个 δ-函数的演化，以构造连接强度度量[17]。这些度量能更好地捕捉各向异性，但会增加整个多重网格算法的计算复杂度。针对拉伸网格，人们提出了基于几何距离的方法，以模拟几何多重网格方法的粗化过程[18,19],；还有一些方法则依赖代数距离计算来妥善处理各向异性[20]。

本文提出一种基于材料的粗化方法，作为现有连接强度度量的替代方案。该方法并不将连接强度的计算局限于矩阵元素，而是借鉴了距离拉普拉斯连接强度度量等方法[18,19],；这类方法利用辅助信息（对于距离拉普拉斯算子而言，即节点坐标）来提高粗网格质量。通过将底层问题的材料张量用作距离拉普拉斯算子的距离度量，我们得以构造一种“材料感知”的连接强度度量。所提出的方法能够检测材料突变和各向异性方向，同时计算开销较低。

本文结构如下。第 2 节将简要介绍代数多重网格，并概述最新研究进展以及常用的连接强度度量。此外，我们还将讨论延拓算子平滑和矩阵滤波与平滑聚合之间的相互作用。第 3 节介绍一种材料感知的连接强度度量，该度量基于距离拉普拉斯算子，并采用基于材料张量的距离度量。第 4 节展示针对多种学术测试问题以及代表热激活电池和太阳能电池的实际应用所进行的计算实验。我们将所提方法与经典的平滑聚合代数多重网格进行比较，考察其参数鲁棒性，并展示该多重网格方法的弱可扩展性和强可扩展性。第 5 节将总结我们的研究结果，并展望未来的研究方向。

2 平滑聚合代数多重网格方法

如算法 1 所示，多重网格 V 循环用于求解式 (4) 中给出的线性方程组。这需要构造矩阵层次结构 $A^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{n^{(\ell)} \times n^{(\ell)}}$，其中 ℓ 表示 V 循环的层级，$n^{(\ell)}$ 表示第 ℓ 层上的未知量数量。我们定义一种基于松弛的平滑方法 $\mathcal{S}^{(\ell)}$，在层级 $\ell = 1$、...、L 上进行前迭代和后迭代，并直接求解最粗层 $\ell = L$。此外，将大小为 $n^{(\ell)} \times n^{(\ell+1)}$ 的矩形传递算子指定为 $P^{(\ell)}: \mathbb{R}^{n^{(\ell+1)}} \to \mathbb{R}^{n^{(\ell)}}$，用于在 $\ell = 1$、...、$L-1$ 层上将解更新量从第 $\ell+1$ 层插值到第 ℓ 层；而 $P^{(\ell)\mathrm{T}}: \mathbb{R}^{n^{(\ell)}} \to \mathbb{R}^{n^{(\ell+1)}}$ 则将残差从第 ℓ 层限制到第 $\ell+1$ 层。对于本文所研究的代数多重网格，粗层算子$A^{(\ell+1)}$ 通过 Galerkin 乘积构造

$$A^{(\ell+1)} = P^{(\ell)\mathrm{T}} A^{(\ell)} P^{(\ell)} \quad \text{for} \quad 1 \le \ell < L, \tag{5}$$

其中，$A^{(1)} := A$ 表示原始线性系统 (4) 的矩阵。

算法 1 具有 L 层、用于求解 $A^{(1)}u = b$ 的多重网格 V 循环。

procedure VCYCLE($A^{(\ell)}, u^{(\ell)}, b^{(\ell)}, \ell$)
  if $\ell \neq L$ **then**
    $u^{(\ell)} = \mathcal{S}_{\mathrm{pre}}{}^{(\ell)}(A^{(\ell)}, u^{(\ell)}, b^{(\ell)})$ ▷ pre-smoothing
    Vcycle($A^{(\ell+1)}, P^{(\ell)\mathrm{T}}(b^{(\ell)} - A^{(\ell)}u^{(\ell)}), 0, \ell+1$)
    $u^{(\ell)} = u^{(\ell)} + P^{(\ell)}u^{(\ell+1)}$ ▷ prolongation
    $u^{(\ell)} = \mathcal{S}_{\mathrm{post}}{}^{(\ell)}(A^{(\ell)}, u^{(\ell)}, b^{(\ell)})$ ▷ post-smoothing
  else
    $u^{(\ell)} = A^{(\ell)-1} b^{(\ell)}$ ▷ coarse solve
  end if
end procedure

从 $P^{(\ell)}$ 构造延拓算子，并根据 $A^{(\ell)}$ 提供辅助量，是代数多重网格的核心任务。对于平滑聚合代数多重网格，我们首先定义一组聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}$，它们构成当前层所有节点指标集的不相交覆盖 ℓ following[15,21]

$$\bigcup_{i=1}^{n^{(\ell+1)}} \mathcal{A}_i^{(\ell)} = \{1, ..., n^{(\ell)}\}. \tag{6}$$

首先，根据该层的矩阵 $A^{(\ell)}$，构造连接强度矩阵 $S(A^{(\ell)})$，以此选取聚合。随后，将丢弃准则 C 应用于 $S(A^{(\ell)})$，从而在该层生成过滤后的图 $\mathcal{G}_C$。文献中常将这两个组成部分混为一谈（并统称为连接强度方法），但在本文中，我们将二者区分开来。第 2.1 节将讨论连接强度度量和丢弃准则。得到过滤后的图 $\mathcal{G}_C$后，我们对其应用聚合算法。最简单的聚合算法可以表述为：“找到一个不与任何现有聚合中的节点相邻的节点，并将该节点及其所有邻居归为一个聚合。”这里还有一些细节（例如如何处理剩余节点），本文不作讨论，但其他文献中对此有详细论述[15]。

确定聚合后，构造暂定延拓算子 $\widehat{P}^{(\ell)}$，使其能够准确地对算子 $A^{(\ell)}$ 的近零空间 $B^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{n^{(\ell)} \times 1}$ 进行插值。因此，在每一层上都有 $A^{(\ell)}B^{(\ell)} \approx 0$ 成立。暂定延拓算子 $\widehat{P}^{(\ell)} = \widehat{P}^{(\ell)}{}_{ij}$的元素由将近零空间划分到各个聚合上来确定。对于所考虑的标量椭圆模型问题，近零空间是一个仅包含 1 的向量，因此暂定延拓算子的元素取 1 或 0，从而得到分片常数插值，

$$\widehat{P}_{ij}^{(\ell)} = \begin{cases} 1 & \text{if } i \in \mathcal{A}_j^{(\ell)}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{7}$$

最后，暂定延拓算子会经过平滑处理（因此称为“平滑聚合”），其详细说明见第2.2节，

2.1 连接强度度量与丢弃准则

对于各向同性问题，通常会直接对任意给定层级 ℓ 的矩阵 $\mathcal{G}\left(A^{(\ell)}\right)$ 的图应用聚合算法，而忽略连接强度度量和丢弃准则。然而，这种做法通常不适用于各向异性或非均质问题。在各向异性情形下，几何光滑误差分量沿强方向分布，而弱方向上的误差则会出现振荡。应用光滑算子会导致收敛效果不佳，因为只有光滑误差分量能被有效减小。第 3 节将对此进行更详细的讨论。可以改用移除“不重要”元素后的修正图来改善这一表现：$\mathcal{G}_C(A^{(\ell)}) := \mathcal{G}\left(C(S(A^{(\ell)}))\right)$，其中 $S(\cdot)$ 是连接强度函数，$C(\cdot)$ 是丢弃准则函数。在各向异性情形下，与各向异性方向不对齐的连接被视为弱连接，相应元素则被视为不重要。所得算子 $C(S(A))$ 是一个由 1 和 0 组成的矩阵，其稀疏模式与该层级对应的算子 $A^{(\ell)}$ 相同，但移除了相应的元素。

最常见的丢弃准则有时称为逐点丢弃。对于给定的连接强度矩阵S以及用户选定的丢弃容差 $0 \le \theta \le 1$，逐点丢弃定义为

$$C^{\mathrm{pw}}(S)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } |S_{ij}| \ge \theta, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{8}$$

由此得到的准则会独立地考察每个矩阵元素。

另一种丢弃准则是截断丢弃准则[22]，它按行处理，而不是逐个矩阵元素处理。

令 $\mathrm{j(i,\cdot)}$ 为一个排列，它将 S 的第 i 行元素按降序排列，即 $|S_{i,j(i,1)}| \ge |S_{i,j(i,2)}| \ge \cdots \ge |S_{i,j(i,n)}|$，并令 $\mathrm{k(i)} \in \{1, \ldots, \mathrm{n}-1\}$ 为满足 $\theta|S_{i,j(i,k(i))}| \ge |S_{i,j(i,k(i)+1)}|$ 的最小指标，并设 $\mathrm{j(i)} = \mathrm{j(i,k(i))}$。截断丢弃准则定义为

$$C^{\text{cut-drop}}(S)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } |S_{ij}| \ge |S_{i,\hat{j}(i)}|, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{9}$$

换言之，截断丢弃准则将S_{ij} 第i 行的所有条目按降序排列，找出排序后相邻条目中第一个间隔大于 θ 的条目对，然后丢弃该间隔之后的所有值。

传统的平滑聚合[15] 使用 $S^{sa}(A) = D^{-1/2}AD^{-1/2}$（矩阵对角线为 $D := \mathrm{diag}(A)$）作为连接强度度量，并结合逐点丢弃准则。若将这些表达式展开为$C^{\mathrm{pw}}(S^{sa})$，便可得到更为熟悉的形式

$$\frac{|A_{ij}|}{\sqrt{|A_{ii}||A_{jj}|}} \ge \theta. \tag{10}$$

尽管这一准则在许多情况下都很稳健，但将其应用于高度非均质且各向异性的材料系数时，仍面临挑战[17]。

或者，可以使用距离拉普拉斯算子[18,19]，作为连接强度度量。它使用与稀疏矩阵A 及坐标 $\{x_i \in \mathbb{R}^{\mathrm{d}}\}_i$相关的距离度量$d$，写作

$$L_d(A,x)_{ij} := \begin{cases} -\frac{1}{d(x_i,x_j)^2} & \text{if } i \ne j \text{ and } A_{ij} \ne 0, \\ 0 & \text{if } i \ne j \text{ and } A_{ij} = 0, \\ -\sum_{j \ne i} L_d(A,x)_{ij} & \text{if } i = j. \end{cases} \tag{11}$$

因此，$\mathrm{L}_d(\mathrm{A,x})$与A的模式相匹配，而其取值由相关坐标之间的距离给出。若A具有对称稀疏模式，则由于$\mathrm{d(x}_i\mathrm{,x}j) = \mathrm{d(x}j\mathrm{,x}_i)$，$\mathrm{L}_d\mathrm{(A,\,x)}$是对称的。距离拉普拉斯连接强度函数随后定义为$\mathrm{S}^{dlap} = \mathrm{D}^{-1/2}\mathrm{LD}^{-1/2}$，其中$\mathrm{L} = \mathrm{L}^{\|\cdot\|_2}\mathrm{(A,x)}$，$\mathrm{D} = \mathrm{diag\ (L)}$，且x为有限元离散自由度的坐标[23]。当与逐点丢弃结合时，距离拉普拉斯$\mathrm{C}^{\mathrm{pw}}(\mathrm{S}^{dlap})$已被证明对与拉伸网格和系数跳跃相关的问题效果良好[24]，但由于仅使用了A的稀疏模式而非其取值，因而缺乏材料信息。

2.2 延拓算子平滑与矩阵滤波

传统平滑聚合为暂定延拓算子 $\widehat{P}^{(\ell)}$ 引入平滑过程，以降低粗层基函数的能量[15,21]，从而改善代数多重网格法的收敛性质。为此，对暂定延拓算子施加一步加权雅可比迭代，从而得到最终的平滑传递算子

$$P^{(\ell)} = (I - \omega D^{-1} A^{(\ell)})\widehat{P}^{(\ell)} \tag{12}$$

其中 $D = \mathrm{diag}(A)$，阻尼因子为 $\omega \geq 0$。由于我们的模型问题具有对称性，阻尼因子通常选为 $\omega = \frac{\omega_{sym}}{\tilde{\lambda}}$，其中 $\tilde{\lambda} \geq \rho(D^{-1}A)$ 用作谱半径的近似值，该近似值通过幂法的若干次迭代确定，并且 $\omega_{sym} = \frac{4}{3}$[21]。

式 (12) 中给出的平滑步骤会使 $P^{(\ell)}$ 的稠密度增加，相较于 $\widehat{P}^{(\ell)}$。这种稠密度增长会通过 Galerkin 乘积传递到粗层算子。所谓的算子复杂度

$$\mathcal{C} = \frac{\sum_{\ell=1}^{L} \mathrm{nnz}(A^{(\ell)})}{\mathrm{nnz}(A^{(1)})} \tag{13}$$

衡量层次结构所有层上的非零元数量（nnz）相对于细层系统矩阵非零元数量的比例。自然地，$\mathcal{C} \geq 1$。较低的算子复杂度更为理想，因为它对应于代数多重网格预条件器中算子的计算成本。在弱连接较多的情形下（例如各向异性和非均质问题中），因此从 $\mathcal{G}(A^{(\ell)})$ 中移除了大量条目，延拓算子平滑会导致非相邻聚合之间的基函数发生不必要的重叠。这会造成过高的填充，进而导致算子复杂度不必要地升高[23,24]，使多重网格方法难以实际应用。为避免这一问题并降低算子复杂度，可以将平滑步骤 (12) 中使用的矩阵 $A^{(\ell)}$ 替换为滤波矩阵 $A^{(\ell)}{}_F := \mathcal{F}_C(A^{(\ell)})$。该滤波矩阵由丢弃准则 C 构造：

$$\mathcal{F}_C(A^{(\ell)})_{ij} = \begin{cases} A_{ij}^{(\ell)} & \text{if } i \neq j \text{ and } C_{ij} = 1, \\ 0 & \text{if } i \neq j \text{ and } C_{ij} = 0, \\ A_{ii}^{(\ell)} + \sum_{k \neq i} (A_{ik}^{(\ell)} - \mathcal{F}_C(A^{(\ell)})_{ik}) & \text{if } i = j. \end{cases} \tag{14}$$

通过集总非对角元素来修改 $A^{(\ell)}{}_F$ 的对角元素，使得只要 $A^{(\ell)}$ 某一行的元素之和为零，滤波矩阵中对应行的元素之和也为零。这对于在延拓算子平滑后保持近零空间的正确插值是必要的。使用滤波矩阵进行平滑时，最终的延拓算子为

$$P^{(\ell)} = (I - \omega D_F{}^{-1} A_F^{(\ell)})\widehat{P}^{(\ell)} \tag{15}$$

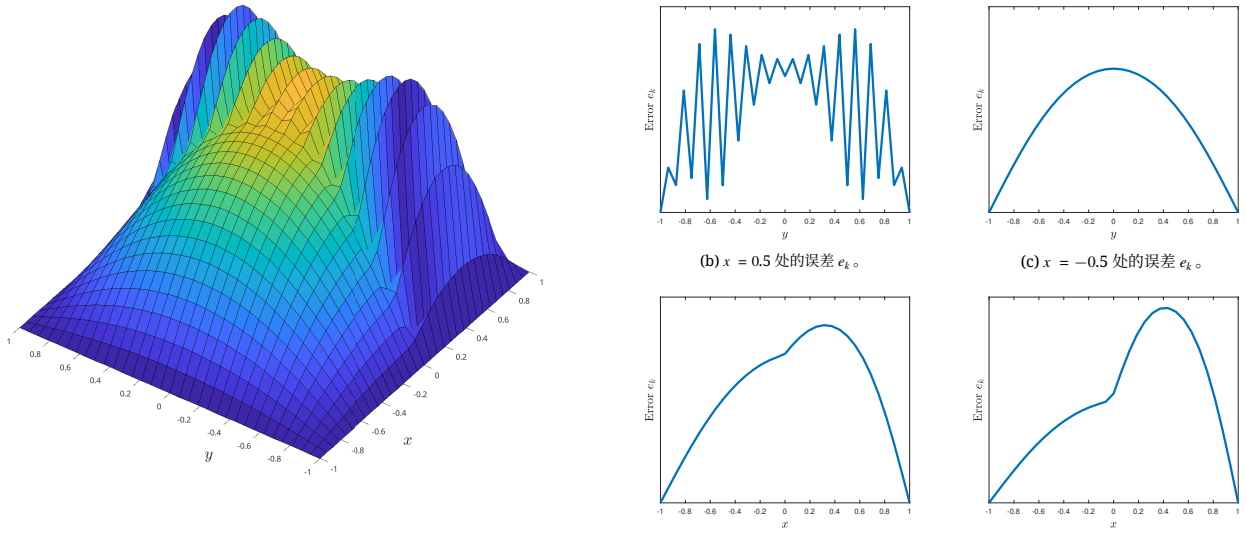
其中 $D_F := \mathrm{diag}(A_F)$。然而，在过度丢弃的情况下，集总过程 (14) 可能会导致 A_F 中出现接近于零甚至为负的对角元素。这会使延拓算子平滑过程失效，甚至产生反效果。$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$解决这一问题的一种方法是引入一个基于 A_F 绝对行和定义的对角矩阵 $D_F = (D_F)_{ii}$，其定义如下

$$(\widehat{D}_F)_{ii} = \sum_j |(A_F)_{ij}|. \tag{16}$$

(16) 中给出的表达式可解释为对角线的 1-范数近似，它能更好地反映整行的缩放，因此受滤波矩阵的对角占优性质的影响较小[24]。分布式集总技术通过使非零元素按各自的大小成比例保留来维持行和，但本文不考虑这类方法。

3 | 一种基于材料的连接强度度量

现在，我们将介绍一种新型连接强度度量的构造方法，旨在克服第2.1节所讨论方法的局限性，尤其是在处理材料非均质性和各向异性方面。



(a) Ω 上解的误差 e_k。 (b) $x = 0.5$ 处的误差 e_k。 (c) $x = -0.5$ 处的误差 e_k。

(d) $y = 0.0$ 处的误差 e_k。 (e) $y = 0.5$ 处的误差 e_k。

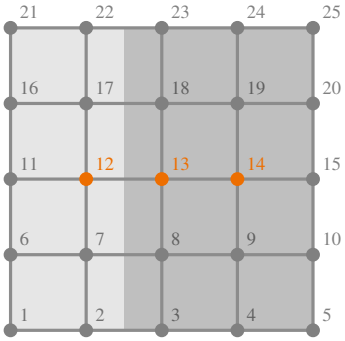
图 1经过若干次k 雅可比迭代后，域 Ω 上误差e_k在不同x和y坐标处各方向分量的可视化表示。

考虑单位正方形 $\Omega = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : -1 < x < 1, -1 < y < 1\}$ 上的模型问题 (1)，其材料张量如下[25]

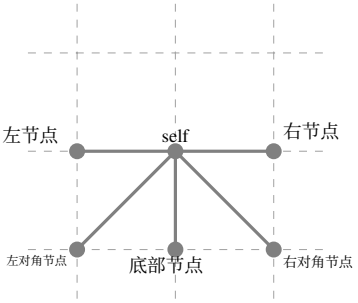
$$\sigma(x) = \begin{cases} I & \text{for } x < 0, \\ \begin{pmatrix} \kappa & \\ & 1 \end{pmatrix} & \text{for } x \geq 0. \end{cases} \tag{17}$$

在材料对比度较大 κ 的情况下，对于$x \geq 0$，x方向与y方向的耦合较弱，而$x = 0$ 两侧的子域之间连接较弱。这使得光滑误差e_k 沿各向异性方向排列，同时在$x = 0$处变得不光滑。因此，雅可比或高斯-赛德尔迭代等逐点平滑器，在削弱弱耦合方向上的振荡误差分量时效率低下。图 1 展示了这一现象：对于$x < 0$，误差是光滑的；在$x = 0$ 处，误差的导数不连续；对于$x \geq 0$，误差在y方向上呈振荡状态。因此，有效的连接强度度量需要检测与材料属性相关的弱连接，并从 $\mathcal{G}\left(A^{(\ell)}\right)$中剔除这些不重要的元素，从而沿光滑误差分量的方向进行粗化。尽管第 2.1 节介绍的连接强度度量在某些情况下可能表现出这种特性，但这并无保证，因为这些度量仅依赖矩阵元素或坐标信息，并未显式利用底层问题的材料属性。

据作者所知，迄今为止，材料非均质性和各向异性信息尚未纳入连接强度度量的计算，因此也未用于构建多重网格层次结构。这项工作的创新之处在于，在计算连接强度时考虑材料张量，以消除由材料属性变化导致的弱连接。对于常张量系数 σ，与标量椭圆型



(a)具有不同材料属性（浅灰色和深灰色）的模型问题离散化，其中重要节点 12、13 和 14 以橙色标出。



(b) 内部节点依据连接强度确定的重要邻居。强度度量是对称的，因此省略上邻域。

图 2 测试问题的均匀四边形离散化，以及连接强度度量所涉及的邻域示意图。

问题（1）可表述为

$$G(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi\sqrt{\det(\sigma)}} \log \frac{1}{\|x-y\|_\sigma} & \text{if d} = 2, \\ \frac{1}{4\pi\sqrt{\det(\sigma)}} \frac{1}{\|x-y\|_\sigma} & \text{if d} \geq 2, \end{cases} \tag{18}$$

其中 $\|x-y\|_\sigma = \sqrt{(x-y)^T\sigma^{-1}(x-y)}$。这促使我们为具有空间变化的 σ 定义材料加权距离

$$d_\sigma(x,y) := \max\{\tilde{d}_\sigma(x,y), \tilde{d}_\sigma(x,y)\} \qquad \text{with} \qquad \tilde{d}_\sigma(x,y) := \sqrt{(x-y)^T\sigma(x)^{-1}(x-y)}.$$

暂且假设 σ 可以逐点求值。距离 d_σ 随后可用于加权距离拉普拉斯算子 $L_\sigma := L^{d_\sigma}(A,x)$，其中 x 仍表示离散化自由度的坐标。与经典距离拉普拉斯算子的丢弃准则类似，我们采用连接强度 $S_\sigma^{dlap} := D_\sigma^{-1/2} L_\sigma D_\sigma^{-1/2}$，其中对角矩阵 $D_\sigma = \text{diag}(L_\sigma)$，以及 $C^{\text{pw}}(S_\sigma^{dlap})$ 或 $C^{\text{cut-drop}}(S_\sigma^{dlap})$。

˜我们注意到，对函数 $d_\sigma(x,y)$ 进行对称化以得到距离有多种方法。考虑以下简单情形，以说明为什么取最大值更可取。假设网格为规则网格，材料系数为标量 σ，且 $x_{i_{\text{low}}}$ 位于系数较低的区域 σ_{low}，$x_{i_{\text{high}}}$ 位于系数较高的区域 σ_{high}，并且自由度 i_{low} 和 i_{high} 通过一条边相连，如图 2a 所示，其中考虑节点 12 和 13。

Then

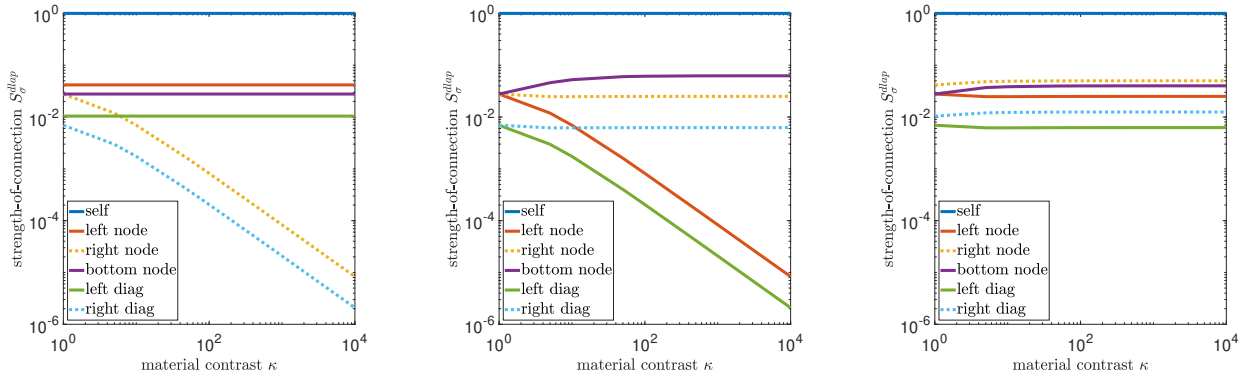
$$\tilde{d}_\sigma(x_{i_{\text{low}}},\cdot) \sim \sigma_{\text{low}}^{-1/2}, \qquad \tilde{d}_\sigma(x_{i_{\text{high}}},\cdot) \sim \sigma_{\text{high}}^{-1/2}, \qquad d_\sigma(x_{i_{\text{low}}},x_{i_{\text{high}}}) \sim \max\{\sigma_{\text{low}}^{-1/2},\sigma_{\text{high}}^{-1/2}\} \sim \sigma_{\text{low}}^{-1/2},$$
$$|(L_\sigma)_{i_{\text{low}}i_{\text{low}}}| \sim \sigma_{\text{low}}, \qquad |(L_\sigma)_{i_{\text{high}}i_{\text{high}}}| \sim \sigma_{\text{low}} + \sigma_{\text{high}}, \qquad |(L_\sigma)_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}}| \sim \sigma_{\text{low}},$$

因此

$$(S_\sigma^{dlap})_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}} = \frac{|(L_\sigma)_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}}|}{\sqrt{|(L_\sigma)_{i_{\text{low}}i_{\text{low}}}||(L_\sigma)_{i_{\text{high}}i_{\text{high}}}|}} \sim \frac{\sigma_{\text{low}}}{\sqrt{\sigma_{\text{low}}}\sqrt{\sigma_{\text{low}}+\sigma_{\text{high}}}} \sim \kappa^{-1/2} \qquad \text{with} \qquad \kappa := \frac{\sigma_{\text{high}}}{\sigma_{\text{low}}}. \tag{19}$$

˜通过选择一种对 d_σ 进行对称化的方法，使其得到 $(L_\sigma)_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}} \sim \sigma_{\text{low}}$，我们可以促使低系数区域与高系数区域之间的边被丢弃，前提是丢弃容差 θ 相对于系数对比度 κ 足够小。因此，后续的聚合算法不会生成跨越低系数区域与高系数区域界面的聚合。

图 3 展示了这一行为，分别显示了图 2a 中节点 12、13 和 14 的直接邻域在不同材料对比度 κ 下的连接强度值。节点的直接邻域定义如图 2b 所示，包括直接左右邻居、底部邻居以及相关的对角节点。由于问题及连接强度度量具有对称性，邻域的上部被省略。首先考虑节点 12，如图 3a 所示，左侧和底部邻居以及节点 12 本身均与 σ_{low} 相关，而邻域中的其余节点则位于 σ_{high} 高系数区域。与 $x_{i_{\text{low}}}$ 相连的所有节点，因此 $(S_\sigma^{dlap})_{i_{\text{low}}i_{\text{low}}}$，都表现出随 κ 增加而保持预期不变的连接强度。与相关邻居的连接



(a)S_σ^{dlap} 节点 12 在低材料参数区域中的 σ_{low}.

(b)S_σ^{dlap} 节点 13 在材料界面边界处的

(c)S_σ^{dlap} 节点 14 在高材料参数区域中的 σ_{high}.

图 3 基于基于材料距离的拉普拉斯度量，展示不同材料对比率 κ 下节点与其直接邻居之间的连接强度 S。

因此具有 $(S_\sigma^{dlap})_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}}$的连接，会如（19）中所述，呈现随$\sigma_{\text{low}}$增加而降低的连接强度。相反，对于节点 13，这一行为发生了反转，如图 3b 所示。这是可以预期的，因为左侧邻域与 σ_{low} 相关，因此 $(S_\sigma^{dlap})_{i_{\text{low}}i_{\text{high}}}$，而所有其他节点均位于具有 σ_{high}的区域中。节点 14 的邻居边的连接强度值相当简单，因为所有节点都位于高系数区域，且 $x_{i_{\text{high}}}$，因此 S_σ^{dlap} 的值随 κ增加保持不变。

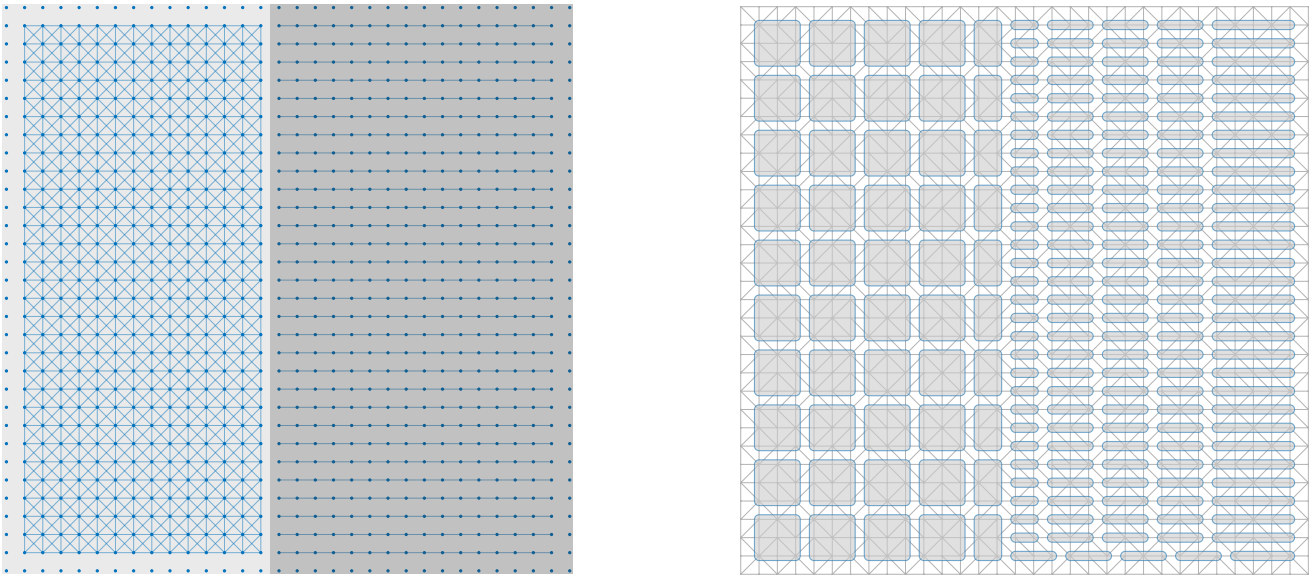
我们通过在测试问题（由 (17) 给出）上进行粗化，使用 $C^{pw}(S_\sigma^{dlap})$ 并设置适当的丢弃容差 θ，确认矩阵图中的边被正确删除，从而确保聚合构造正确。映射到下层网格节点坐标的相应矩阵图及其聚合显示在图 4 中。域的各向同性部分的矩阵图仍然连接良好，形成预期的规则形状聚合。连接具有不同材料属性区域的所有图边均已删除。此外，由于域中具有较高 κ 值的部分呈现各向异性材料属性，因此仅保留沿材料强方向的图边，从而沿x轴方向进行半粗化，符合几何上光滑的误差分量。这与图 1a 所示的误差图一致。

即使 σ 正则性较低，方程 (1) 仍有良好定义。在这种情况下，对自由度所在位置 $\{x_i\}$ 进行点值求值可能没有意义。例如，一种常见情形是系数为逐单元常张量系数。在这种情况下，我们可以将 $\sigma(x_i)$ 替换为 Clément插值[26] $(\mathcal{I}_h^C\sigma)(x_i)$，它通过对与自由度相关的邻域上的积分来定义，从而对节点周围的材料属性进行平均。因此，连接强度的输入为 $\{x_i\}_i$，其中 $x_i \in \mathbb{R}^{\text{d}}$ 和 $\{\sigma_i\}_i, \sigma_i \in \mathbb{R}^{\text{d}\times\text{d}}$。

此外，为了递归构造多重网格层，我们需要将第 ℓ 层给出的材料数据向量传递到下一个较粗层 $\ell+1$。我们通过对聚合进行平均来构造粗网格坐标和系数张量。假设第 ℓ 层上的坐标和系数分别由 $x^{(\ell)}{}_i$ 和 $\sigma^{(\ell)}{}_i$ 给出。对于与聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}{}_j$ 相关联的粗网格未知量 j，我们令

$$x_j^{(\ell+1)} = \frac{1}{|\mathcal{A}_j^{(\ell)}|}\sum_{i\in\mathcal{A}_j^{(\ell)}} x_i^{(\ell)} \qquad \text{and} \qquad \sigma_j^{(\ell+1)} = \frac{1}{|\mathcal{A}_j^{(\ell)}|}\sum_{i\in\mathcal{A}_j^{(\ell)}} \sigma_i^{(\ell)}. \tag{20}$$

我们指出，除了对聚合进行平均之外，还存在其他归一化方法，可在多重网格层次结构中保留某些量；但本文余下部分将采用（20）。由于我们的算法倾向于删除低系数区域与高系数区域之间的边，因此，如图 4 所示，我们在粗层上保留了区域之间的尖锐界面。



(a) 矩阵图 $\mathcal{G}\left(C^{pw}(S_\sigma^{dlap})\right)$。 (b) 聚合 $\mathcal{A}$。

图 4 修改后的矩阵图 $\mathcal{G}\left(C^{pw}(S_\sigma^{dlap})\right)$ 及其上构建的相应聚合 $\mathcal{A}$ 的示意图，其中已移除“不重要”的条目。与狄利克雷边界相关联的节点也已在 $\mathcal{G}\left(C^{pw}(S_\sigma^{dlap})\right)$ 中隔离，因此不会传递到较粗层。可以清楚地看到，材料信息按预期参与了聚合过程。

4 数值结果

我们在二维和三维中开展了多项实验，以考察所提出的粗化方案在使用 TRILINOS [27 28 29] 软件包 MUELU[30]进行平滑聚合代数多重网格预处理时的表现。前几个测试场景是学术测试问题，后几个则是实际应用案例。第一个问题由一个二维域构成，其中包含材料跃变和各向异性，与第 3 节介绍的问题相同。随后，我们研究了一个环形几何[31]，上的热扩散问题，该问题凸显了显著的各向异性材料行为。具有旋转各向异性的问题常被用作学术测试案例[32 20]。第一个应用示例基于一个热电池[9]，，其特点是采用拉伸网格，且标量材料分布高度非均匀。第二个应用案例研究太阳能电池的单位体积，其中存在一块高度局部化且高度各向异性的材料区域。

除非另有说明，使用 BELOS[33] 中的共轭梯度法（CG）求解所产生的线性方程组，并采用 MUELU 提供的代数多重网格方法作为预条件器。当残差降低至 10^8 倍时，即认为迭代求解器已收敛。我们使用二阶切比雪夫多项式进行平滑，这相当于在每一层上分别执行两次前平滑和后平滑，而最粗层则使用直接法求解。平滑暂定延拓算子时，使用式 (14) 中的滤波矩阵 A_F 来控制算子复杂度，并使用式 (16) 中的 1-范数对角近似，以抵消矩阵对角线上可能出现的小值。多重网格层次结构中的粗层通过 ZOLTAN2 实现的基于坐标的方法[34] 重新分区。

4.1 双区域问题

迄今为止，对材料加权距离拉普拉斯强连接度量 S_σ^{dlap} 的行为仅在完全孤立的情形下进行了研究，未考虑它与多重网格层次结构中其他组成部分的相互作用。我们再次考虑第 3 节中的双域测试问题：在单位正方形 $\Omega = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : -1 < x < 1, -1 < y < 1\}$ 上，采用四边形网格和一阶（双线性）拉格朗日有限元形函数，材料张量如下

$$\sigma(x) = \begin{cases} I & \text{for } x < 0, \\ \begin{pmatrix} \kappa & \\ & 1 \end{pmatrix} & \text{for } x \geq 0. \end{cases} \qquad \kappa \in \{1, 100, 10\,000\}$$

假设该域完全由均匀的狄利克雷边界包围。基础网格包含 1024 个单元，沿每个空间方向各有 32 个单元。

为确认全多重网格循环中的粗化格式能否正常工作，并初步评估鲁棒的连接强度度量与丢弃准则组合，我们根据迭代次数以及预条件器应用的成本来研究该方法的表现。预条件器应用的成本定义为算子复杂度与迭代求解器所执行的线性迭代次数的乘积。我们采用不同的网格尺寸 $h \in \{1/32, 1/128, 1/512\}$ 和基于给定材料张量 $\sigma(x)$ 的材料对比度 κ 。此外，对于粗化过程中的不同丢弃准则 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 与连接强度度量 S^{sa}、S^{dlap}、S^{dlap}_{σ} 组合，我们考虑可变的丢弃容差 $\theta \in \{0.0, 0.0025, 0.005, 0.01, 0.02, 0.04, 0.08, 0.16, 0.32, 0.64\}$。

图5展示了线性求解器在 θ 增大时，采用不同丢弃准则与连接强度度量组合时的迭代次数。每个图对应网格尺寸 h 和材料对比度 κ 的一种组合；无法进行粗化或收敛的配置未予展示。对于纯均质材料情形$\kappa = 1$，基于 S^{sa} 的连接强度度量效果最佳，S^{dlap} 和 S^{dlap}_{σ} 稍逊一筹，但仍具有竞争力。在此情形下，丢弃准则对整体结果影响不大，因为粗层上无需解析材料跃变或各向异性。此表现符合预期，且适用于所有均匀材料情形：迭代次数在所有网格细化层级上几乎保持不变。这些情形的迭代次数可作为基准或参照。随着 κ 增大，基于 S^{sa} 和 S^{dlap} 的连接强度度量开始表现不佳，无法在粗层上正确解析材料跃变和/或材料各向异性，因此与均质情形相比，迭代次数大幅增加。相比之下，基于 S^{dlap}_{σ} 的粗化具有良好的收敛性质，迭代次数较少，前提是选择合适的 θ 值。总体而言，采用材料加权距离拉普拉斯连接强度进行有效丢弃时，丢弃容差约为 $\theta > 0.01$；此时，求解相应线性系统所需的线性迭代次数会迅速下降。丢弃准则 $C^{\text{cut-drop}}$ 在较大的丢弃容差值 $\theta > 0.08$ 下表现得更稳健；对于 θ ，只要逐点丢弃准则未失效，它也能达到与该准则相近的迭代次数。对于比图示网格更精细的网格，采用 S^{sa} 和 S^{dlap} 并不可行，因为这些方法对于材料对比度 κ 和网格尺寸 h 都不够稳健。只有在 θ 最高时，传统平滑聚合度量才能体现底层材料属性的影响，以非常激进的丢弃为代价恢复适当的收敛行为。新提出的材料加权距离拉普拉斯连接强度度量对于材料对比度和网格尺寸均表现稳健，迭代次数与均质参考情形相近，因此优于最先进的连接强度度量。尤其是在激进丢弃、导致矩阵图过度稀疏时，$C^{\text{cut-drop}}$ 表现稳健。总体而言，在较宽的 θ 范围内，$C^{\text{cut-drop}}(S^{dlap}_{\sigma})$ 能够在 κ 和 h 的大多数组合下表现良好。若最看重性能，$C^{\text{pw}}(S^{dlap}_{\sigma})$ 能够实现最低的迭代次数，但对丢弃容差相当敏感。

接下来，我们讨论多重网格预条件器的应用成本，如图6所示。同样，每个图对应于 h 和 κ的一种固定组合，而成本则随 θ 的变化绘制，并采用不同的丢弃准则和连接强度度量组合。由于应用成本与迭代次数相关，均匀材料情形下的结果相似，平滑聚合连接强度略有优势。由于该问题是均匀的，丢弃很少，因此截断丢弃和逐点丢弃的效果相当。随着材料对比度 κ 增加，使用 S^{dlap}_{σ}的优势显现出来，其总体应用成本低于其他方法。与之前类似，丢弃准则 $C^{\text{cut-drop}}$ 在更宽的 θ 范围内比 C^{sa}更稳健。尽管迭代次数相关结果表明，较大的丢弃容差会带来更好的方法，但这并不一定直接意味着更低的应用成本，因此也不一定意味着格式更快。材料对比度增大时，这一点尤为明显。对于逐点丢弃，成本会随 θ增大而下降，直至算子复杂度占据主导地位，趋势随之逆转；当 θ较大时，总体成本会增加，最低应用成本出现在约 $\theta = 0.08$ 处。

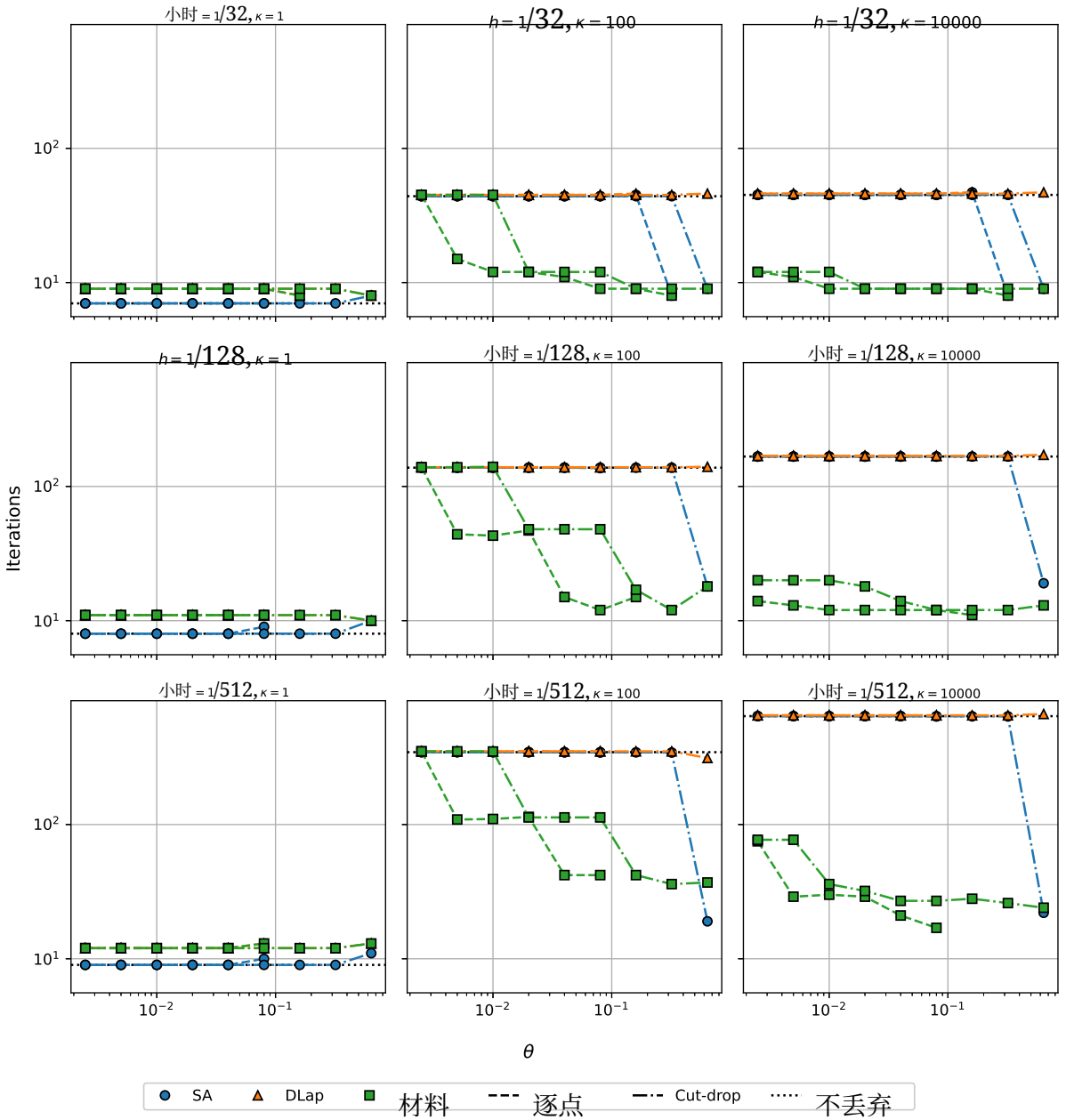


图 5 不同丢弃容差 θ 下的迭代次数，展示了不同丢弃准则组合 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 与连接强度度量 S^{sa} 、S^{dlap} 和 S_{σ}^{dlap} 在不同材料对比度 κ 和网格细化 h 下的结果。对于未能达到指定粗网格规模或未能收敛的配置，不予显示；例如，代数多重网格粗化停滞时便会出现这种情况。基于材料的丢弃在广泛的丢弃容差范围内表现出稳健性和良好性能 θ。

粗化过程中，从矩阵图中丢弃更多边可能会减少迭代次数，但正如第2.2节所述，由于矩阵的粗层表示变得更稠密，算子复杂度也会相应增加，从而推高总体成本。这也表明，应用激进丢弃时应谨慎。

总之，通过恰当选择丢弃容差、丢弃准则和连接强度度量，对矩阵图进行准确粗化，使其能够在粗层上恰当表示材料属性，从而确保多重网格预条件器对材料对比度 κ 和网格尺寸 h 具有稳健性。新引入的连接强度度量 S_{σ}^{dlap} 能够恰当捕捉这些特征，并与截断丢弃准则 $C^{\text{cut-drop}}$ 结合使用

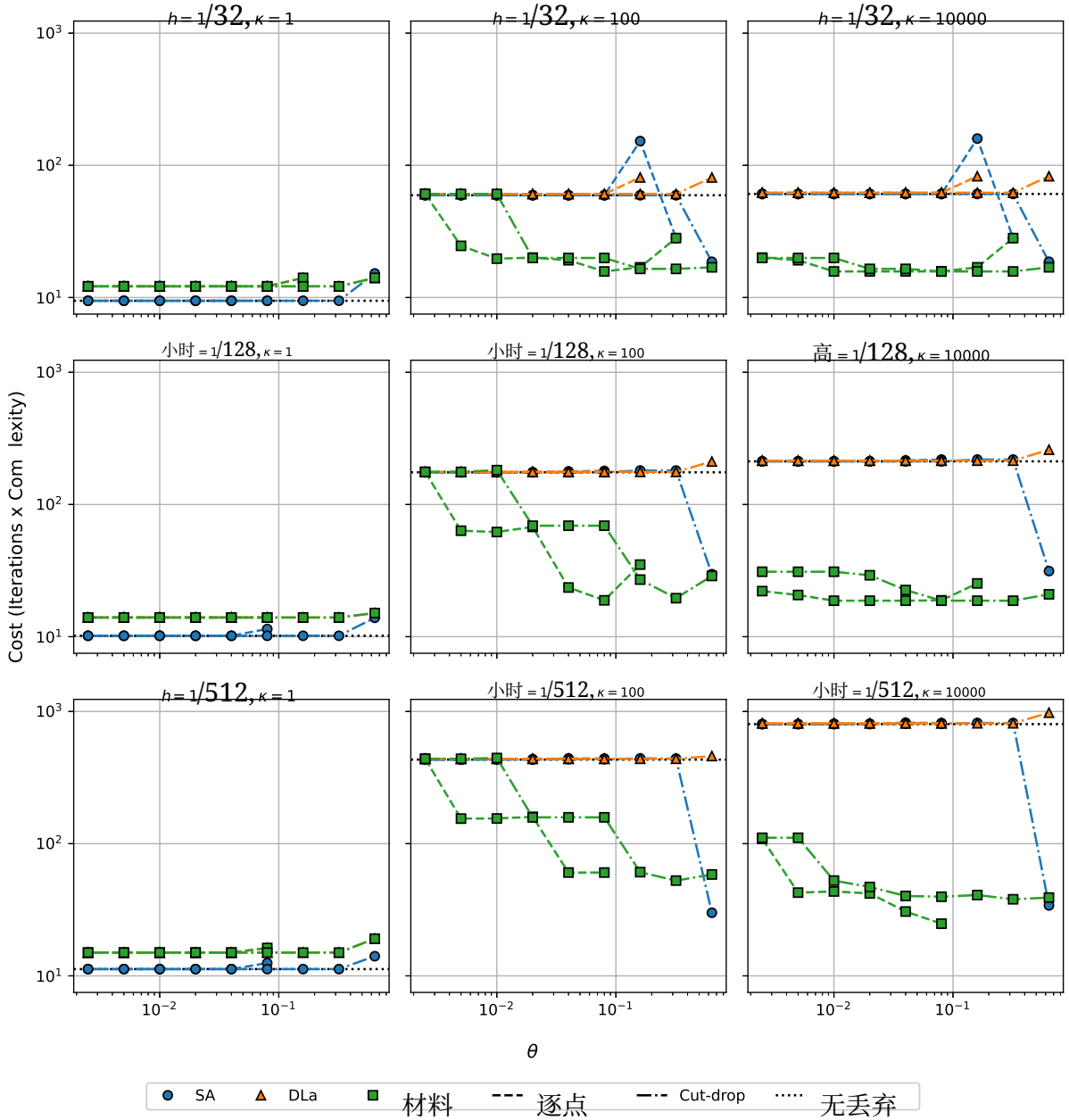
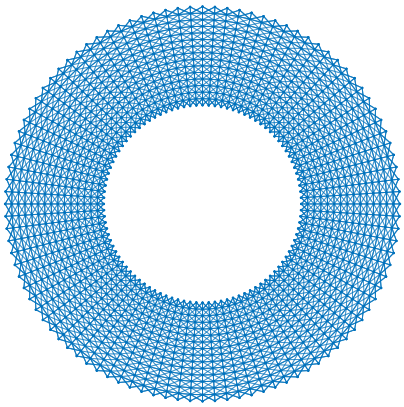
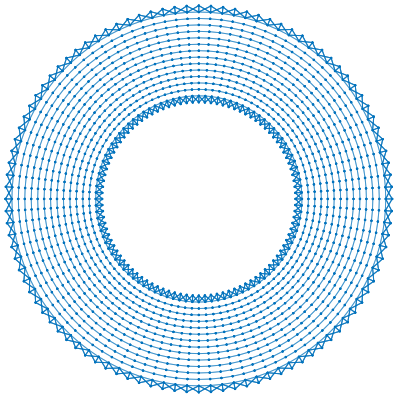


图 6 不同丢弃容差 θ 下预条件器应用的成本（迭代次数乘以算子复杂度 C），展示了不同丢弃准则 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 以及连接强度度量 S^{sa}、S^{dlap} 和 S_{σ}^{dlap}的组合，并针对不同材料对比度 κ 和网格细化 h进行了比较。与其他点相距过远的成本点未予显示。基于材料的丢弃在广泛的丢弃容差 θ范围内展现出稳健性和良好性能。

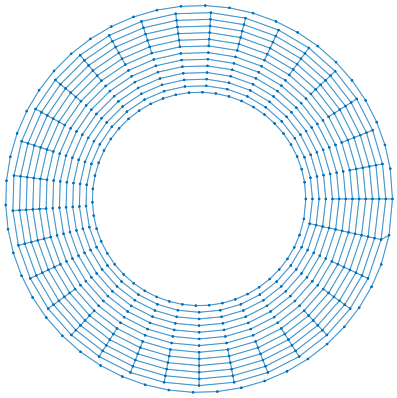
在所考察的参数范围内，该方法在线性迭代次数方面表现稳健。通过仔细调整 C^{pw}，可以获得整体最佳性能。此外，$\theta = 0.08$ 的丢弃容差是一个不错的选择，能够带来最低的应用成本。因此，作者推荐在处理这类问题时，首先尝试使用 $\theta = 0.08$ 的 $C^{\text{cut-drop}}(S_{\sigma}^{dlap})$，因为它在性能与稳健性之间实现了良好的权衡。



(a) 细层矩阵图 $\mathcal{G}\left(A^{(1)}\right)$ 映射至其空间坐标 x。



(b) 过滤后的图 $\mathcal{G}\left(C^{pw}(S_\sigma^{dlap})\right)$ 用于在层 $\ell = 1$上进行聚合。



(c) 过滤后的图 $\mathcal{G}\left(C^{pw}(S_\sigma^{dlap})\right)$ 用于在层 $\ell = 2$。

图 7 多重网格粗化过程中，细层算子以及第一个粗层上的矩阵图 $\mathcal{G}\left(A^{(1)}\right)$ 的可视化。

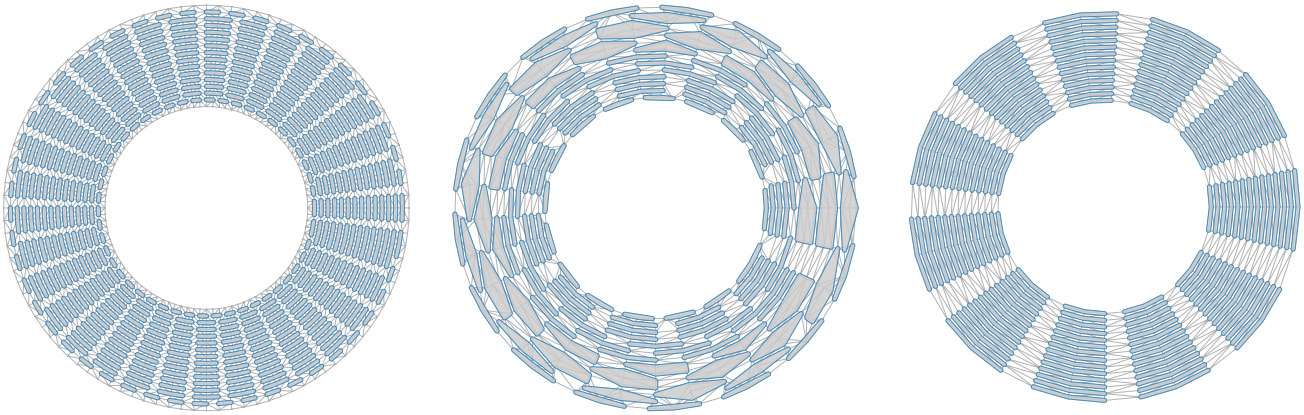
4.2 各向异性热扩散

作为第二个数值示例，我们研究了新剔除格式在热扩散场景中针对各向异性材料行为的稳健性，尤其是可扩展性。该问题在一个三维环形区域上求解，该区域的内半径为$r_i = 0.5$，外半径为$r_o = 1.0$，厚度为$t = 0.1$。在此情形下，由于周向导热率很高，材料张量呈现强各向异性，其定义如下：

$$\sigma(x) \leftarrow Q^T \hat{\sigma}(x) Q \quad \text{with} \quad Q = \begin{pmatrix} \frac{y}{r} & \frac{x}{r} & 0 \\ -\frac{x}{r} & \frac{y}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \hat{\sigma}(x) = \begin{pmatrix} \kappa & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}.$$

我们采用 3000 个六面体有限元及三线性拉格朗日形函数，对基准问题进行离散化；径向、周向和厚度方向分别使用$n_r = 20$ 个单元、$n_t = 150$ 个单元和$n_z = 1$ 个单元。所有其他网格均通过对基准问题进行均匀细化生成。环形区域的内边界和外边界施加非齐次狄利克雷边界条件，而前面和底面则施加自然边界条件。在构建多重网格层次结构时，采用所述材料加权距离拉普拉斯方法剔除弱连接。由于核为常数，因此在创建暂定延拓算子时省略了正交化步骤。系统矩阵经过粗化，直至剩余 5000 个或更少的未知量。所有模拟均使用多物理场代码 4C[35]，在由慕尼黑联邦国防军大学数学与计算机模拟研究所数据科学与计算实验室提供的集群上运行。每个 CPU 节点配备 2 颗 Intel Cascadelake CPU，每颗有 26 个核心。

首先，我们以一个简化的二维环形区域问题为例，忽略厚度方向，展示丢弃容差 θ 如何移除矩阵图 $\mathcal{G}\left(A^{(\ell)}\right)$ 中矩阵 A 在多重网格层级上的弱连接。图 7 展示了细层算子的矩阵图（映射到相应网格的节点坐标上），以及在 $\ell = 1$ 和 $\ell = 2$上进行丢弃后的结果。由于材料对比度较高，矩阵图中周向的强连接在 $\ell = 1$上得以保留，而径向的弱连接则被丢弃，从而在强各向异性方向上实现预期的半粗化。然而，在第一层上，所选丢弃容差不足以移除所有弱连接，导致环形区域外边界附近的材料行为表示不充分。图 8 展示了聚合过程的结果：由于在 $\ell = 1$上进行了半粗化，形成了一维形状聚合体。而在 $\ell = 2$ 上，则基于图连通性构造了二维聚合，因此材料属性发生了模糊。几何距离与基于材料的



(a) 第 $\ell = 1$ 层上的聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}$。 (b) 第 $\ell = 2$ 层上采用 $\theta = 0.05$ 时的聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}$。 (c) 第 $\ell = 2$ 层上采用 $\theta = 0.1$ 时的聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}$。

图 8 材料加权粗化过程中不同聚合 $\mathcal{A}^{(\ell)}$ 的可视化，展示了材料属性与空间距离之间的相互作用如何影响不同丢弃容差下聚合的生成。

距离度量之间存在着有趣的相互作用。正如式（20）所述，坐标会在相应的聚合内取平均，因此粗层可能会生成原问题的拉伸版本，使坐标发生轻微偏移。尽管我们在代数多重网格方法中不显式构造粗网格，但仍可能出现与聚合坐标相关的各向异性；比较层级 $\ell = 2$ 和 $\ell = 1$的矩阵图即可观察到这一点。由于我们沿一个方向进行半粗化，该方向上的聚合之间距离也随之增大，导致径向位置在空间上更为接近。我们的基于材料的粗化方案还会考虑空间距离，加上这一效应朝外边界逐渐增强，材料属性与空间距离的影响便相互抵消，从而形成二维聚合。这个例子凸显了粗化过程中丢弃容差 θ 的重要性。丢弃容差必须选择得足够大，才能移除所有弱连接并保持线性求解器的收敛性质。

接下来，我们研究预条件器对于单元尺寸 h 和材料对比度 κ的稳健性。我们对由 $h/2$、$h/4$、$h/8$、$h/16$ 构成的三维基础网格进行均匀网格细化，并令材料对比度取值为 $\kappa \in \{1, 10, 100, 1000, 10\,000\}$。由于基于传统平滑聚合和距离拉普拉斯算子的连接强度度量都无法实现方法收敛，因此我们仅关注新提出的材料加权距离拉普拉斯度量与逐点丢弃准则的组合。此外，受第4.1节结果启发，我们考虑丢弃容差的两个取值 $\theta \in \{0.05, 0.1\}$。线性求解器的性能列于表1，其中报告了一次线性求解的迭代次数、多重网格层数以及算子复杂度 $\mathcal{C}$，并按 h、κ 和 θ 的组合列出。$\kappa = 1$ 的情形具有均匀性质，可作为基线。随着 κ 增大，迭代求解器的迭代次数也有所增加，但当网格尺寸为 h 且 $\theta = 0.05$ 时例外：在高 κ 下，迭代次数显著增加。这很可能是前文所述材料对比度与空间距离相互作用的结果。将其增至 $\theta = 0.1$ 可解决这一问题；在更高的网格细化层次下，该问题并不那么严重。在 $\theta = 0.1$ 时，材料对比度增加 10000 倍、网格尺寸缩小 16 倍的过程中，迭代次数在 11 到 24 之间变化。提高丢弃容差会使迭代次数更加稳定，但在 κ 较小时会大幅增加算子复杂度。不过，对于高 κ 且 h 较小的难例，所提出的方法表现良好。这再次凸显了该方法的稳健性，也与迄今为止的观察结果一致：对于此例，纯粹基于矩阵和距离的连接强度度量无法使方法收敛，而所提出的材料加权粗化则能够实现收敛。

最后，我们通过开展强扩展与弱扩展研究，分析代数多重网格法的可扩展性，处理器数量最多达到$P = 512$。材料对比度设为固定值 $\kappa = 100$。对多重网格层次结构的粗层进行重新平衡，使每个活动处理器至少拥有 5000 个自由度。根据第4.1节和第4.2节的研究结果，选择逐点丢弃准则，丢弃容差设为 $\theta = 0.1$。

在我们的扩展性研究中，我们考虑了五种不同的问题规模，这些规模均基于基础网格进行均匀细化，范围从$n = 6.12 \times 10^5$ 到$n = 1.02 \times 10^7$。弱扩展（每个处理器的自由度数量保持不变）用虚线表示，而强扩展（问题规模保持不变）用彩色线表示。代数多重网格求解器的设置与求解阶段

表 1 不同丢弃容差 θ、网格细化和对比度比值 $\log(\kappa)$ 下的平均线性迭代次数，括号中为层数 L 和算子复杂度 $\mathcal{C}$。

$\log(\kappa)$	h	$h/2$	$h/4$	$h/8$	$h/16$
			$\theta = 0.05$		
0	11 (2, 1.11)	11 (2, 1.13)	13 (3, 1.16)	14 (3, 1.17)	14 (3, 1.23)
1	15 (3, 1.82)	16 (3, 1.82)	17 (3, 1.83)	19 (2, 1.76)	18 (3, 2.13)
2	22 (3, 2.36)	21 (3, 2.49)	21 (3, 2.76)	21 (3, 2.82)	19 (3, 3.57)
3	41 (3, 2.73)	29 (3, 2.86)	20 (3, 3.09)	21 (3, 3.12)	18 (3, 3.79)
4	137 (3, 2.72)	59 (3, 2.88)	23 (3, 3.13)	23 (3, 3.15)	20 (3, 3.83)
			$\theta = 0.1$		
0	10 (3, 2.83)	11 (3, 2.96)	11 (3, 3.18)	12 (3, 3.41)	12 (3, 4.28)
1	11 (3, 4.17)	11 (3, 3.72)	11 (3, 3.68)	12 (3, 3.06)	12 (3, 5.58)
2	14 (3, 2.75)	15 (3, 2.89)	14 (3, 3.13)	16 (3, 3.17)	15 (3, 3.83)
3	16 (3, 2.75)	21 (3, 2.89)	18 (3, 3.13)	21 (3, 3.17)	17 (3, 3.83)
4	24 (3, 2.75)	24 (3, 2.89)	21 (3, 3.13)	23 (3, 3.17)	19 (3, 3.83)

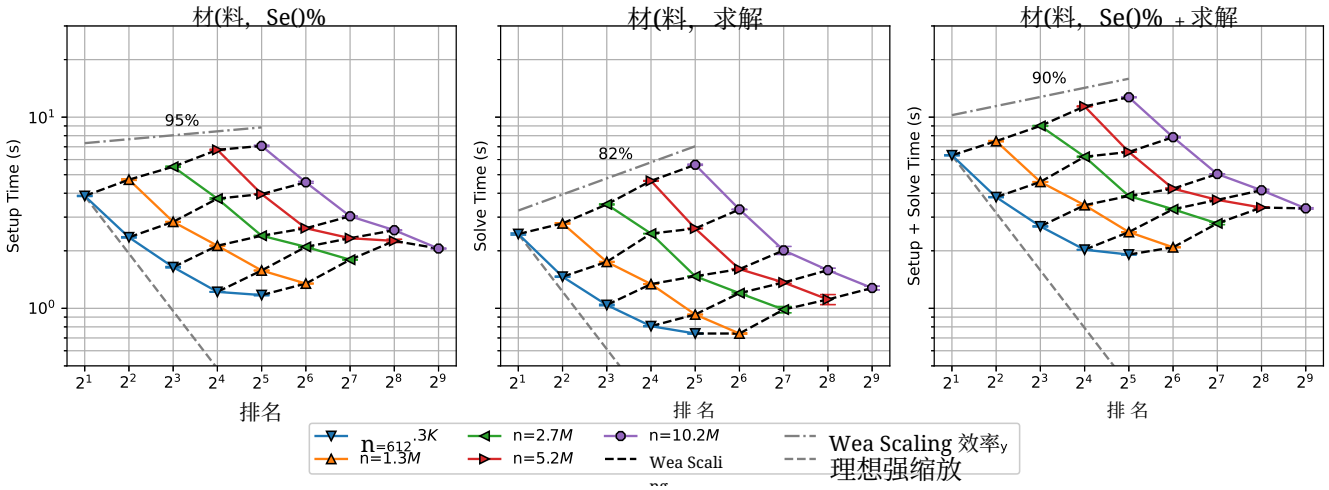


图 9 不同均匀网格细化级别下各向异性扩散问题的扩展结果。我们采用基于材料的逐点丢弃，参数为 $\theta = 0.08$。报告了多重网格的设置、求解及总耗时。图中还给出了理想强扩展作为参考，以及一条对应于各问题规模下估算的弱扩展效率的曲线。理想弱扩展是一条水平线。

对每种配置重复执行 20 次。图 9 报告了平均设置时间、求解时间以及设置与求解总时间，误差条表示相对于平均值的一个标准差。误差条总体较小，仅在少数数据点上清晰可见。对于等于或大于$n/P \sim 70\,000$的情况，强扩展效率总体高于 50%。较低的n/P 会导致扩展效率降低，这是意料之中的，因为相对通信开销会增加。由$n = 6.12 \times 10^5$ 给出的最小问题规模在$n/P \sim 40\,000$ 时几乎达到强扩展极限，此时连续配置之间的设置时间和求解时间仅略有变化。此外，设置和求解的强扩展行为在定性上相似。与分布式配置相比，较小配置中的节点内计算对总体结果似乎没有明显影响。对于求解阶段的弱扩展效率，我们达到 80%以上；在不同n/P取值下，对于较大问题规模，设置与求解总阶段的效率甚至超过这一水平，达到 90%。设置阶段的弱可扩展性效率最高可达 95%。

关于各向异性热扩散问题，我们的讨论总结如下：基于材料的粗化可针对多种网格细化程度和材料对比度，形成一种稳健的方法。第4.1节中关于新提出的连接强度度量的研究结果也证明适用于三维问题。此外，我们展示了多重网格算法的弱可扩展性和强可扩展性，凸显了该方法在纯学术研究之外的实际应用价值。虽然缺少与现有连接强度度量的直接可扩展性比较，但我们认为该方法在这些方面具有竞争力，以下数值应用案例将对此加以说明。

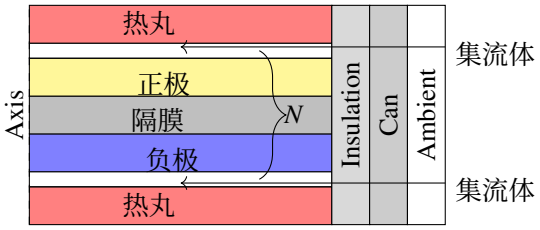


图 10 用于多物理场仿真的二维轴对称仿真域（不按比例绘制）。请注意，集流体、负极、隔膜和正极层重复$N = 20$ 次。

4.3 热激活电池

热激活电池[36,37], 也称为热电池或熔盐电池，是一种一次性使用的一次储备电源，其熔盐电解质在室温下为固态。启动过程中，点燃烟火药丸使电解质熔化，从而使电池能够持续工作，直至电解质凝固或反应物耗尽。由于这类电池只能使用一次，多物理场建模对于电池的设计和验证尤为重要。

热激活电池的模拟需要求解跨越多种物理过程贡献的整体耦合线性系统，包括 Stefan-Maxwell 扩散、达西定律和 Butler-Volmer 电化学势[9]。由于热电池问题线性系统中的多物理场耦合复杂，我们采用基于 TEKO[38,39] 的分块 Gauss-Seidel 预条件策略。预条件器应用中的一个重要子步骤是求解固相电压 Φ_s，该电压由欧姆定律决定

$$\nabla \cdot (-\sigma(x)\nabla\Phi_s) = S_e, \tag{21}$$

其中， σ 为固相电导率，S_e 为源项。材料张量 σ 在图 10 所示的域内变化幅度高达十个数量级。例如，在隔膜中为 $\sigma \approx 10^{-4}\,\mathrm{Sm}^{-1}$，而在负极中，导热率最高可达 $\sigma \approx 10^{6}\,\mathrm{S\,m}^{-1}$。图 10 所示的正极、隔膜和负极层在整个域内重复$N = 20$次。

我们针对热电池的二维轴对称模拟，考虑电化学活化过程中所取某一固定快照下电压方程（21）在三种不同网格分辨率下的解。第一种网格代表一种粗分辨率，沿轴向维度布置多个单元，以分辨电池内正极、隔膜和负极层之间的多个界面。然而，在径向维度上仅使用了极少的单元。因此，单元长宽比被严重拉长，纵横比从11.28变化到37.03。第二种网格分辨率在径向维度的单元数量上进行了16倍细化，同时在轴向维度使用相同数量的单元。在这种情况下，单元长宽比得到改善，从1.17变化到2.78。最后，第三种网格表示基于前一网格的单层均匀网格细化。丢弃容差从 $\theta = 0$ （不丢弃）变化到 $\theta = 0.64$。

三种网格分辨率下固相电压求解的结果分别如图11、图13和图14所示，对应粗网格、细化16倍的网格和均匀网格细化情形。粗网格的结果如图11所示，可以观察到，采用逐点或截断丢弃的平滑聚合连接强度方法表现不佳，直到使用较激进的丢弃容差（$\theta \geq 0.32$）时才有所改善。另一方面，在较宽的丢弃容差范围内，距离拉普拉斯算子和基于材料的连接强度方法收敛速度都快得多。当丢弃容差足够大（ $\theta \geq 0.02$）时，基于材料的连接强度方法迭代次数最少，总体成本也最低。尽管材料界面两侧的数值相差多个数量级，但网格各向异性程度足够高，因此只要 $\theta \geq 0.32$，距离拉普拉斯连接强度方法的表现就与基于材料的连接强度方法相当。然而，即使网格各向异性程度很高，将材料和网格信息同时纳入连接强度算法，也能在较宽的丢弃容差范围内降低多重网格方法的总体成本。对于网格各向同性程度更高的细化情形，仅凭网格信息并不足够，与平滑聚合丢弃相比，可能导致性能欠佳。不过，基于材料的丢弃有助于提升求解器性能。

为进一步说明传统的平滑聚合式剔除方案无法兼顾网格各向异性和材料界面，我们在图12中展示了初始粗网格分辨率下的聚合。若干个聚合跨越了

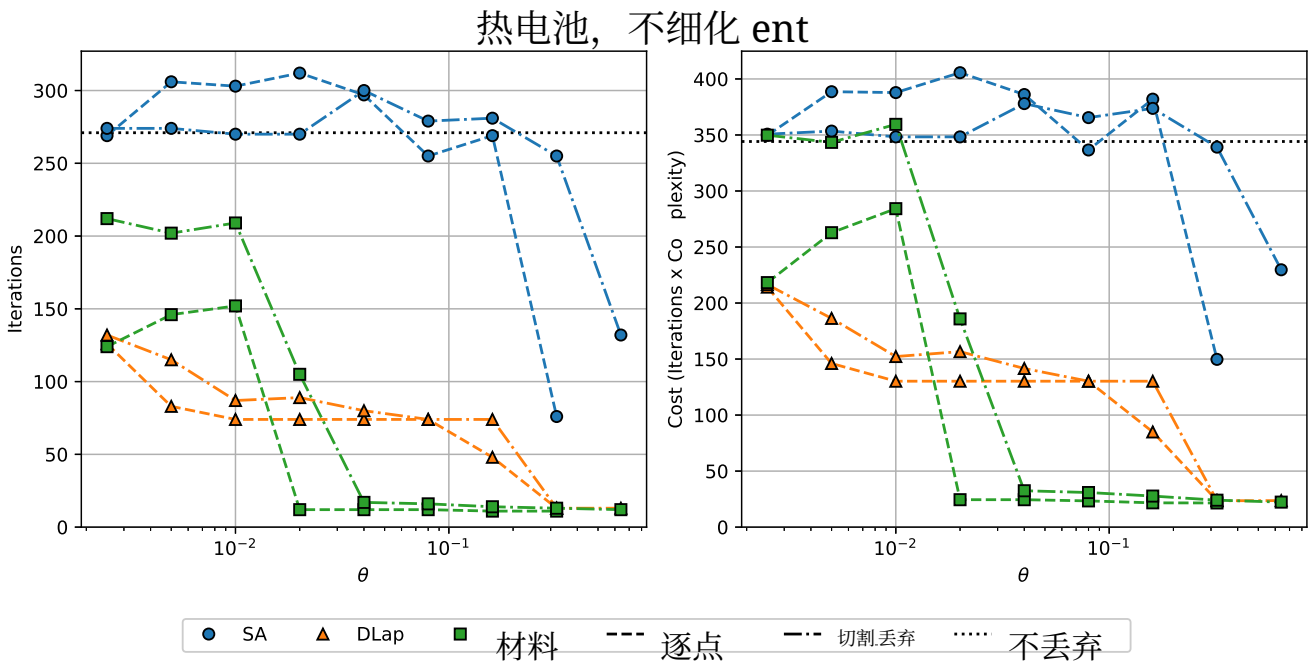
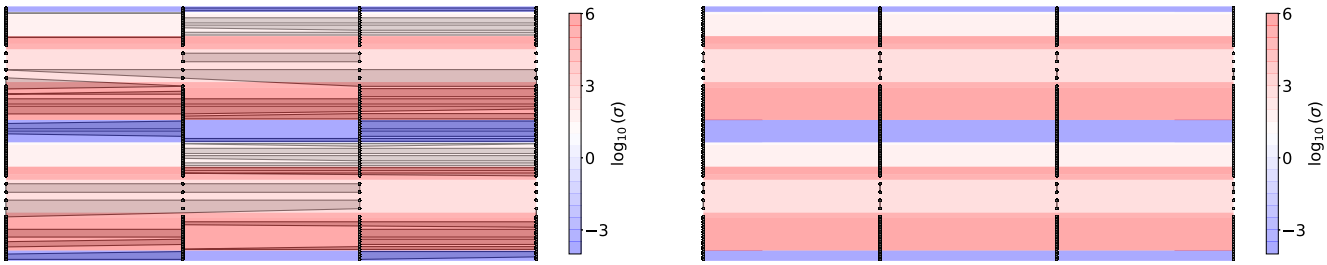


图 11 初始（粗）网格分辨率下，不同丢弃容差 θ 对应的迭代次数和应用成本，展示了丢弃准则 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 与连接强度度量 S^{sa}、S^{dlap} 和 S^{dlap}_{σ} 的不同组合。未达到指定粗网格规模或未能收敛的配置未予显示。距离拉普拉斯算子，尤其是基于材料的丢弃，在宽泛的丢弃容差范围内表现出稳健性和良好性能 θ。



(a) 基于 SA 的逐点丢弃，$\theta = 0.01$。

(b) 基于材料的逐点丢弃，$\theta = 0.08$。

F I 图 12 初始（粗）热电池网格上的聚合。单点以单个点表示。

$C^{\text{pw}}(S^{sa})$ 跨越了材料界面。此外，逐点平滑聚合在构建较粗层时，无法有效地对径向拉伸单元进行“半粗化”。然而，逐点材料丢弃能够在粗网格表示中清晰地分隔材料界面。因此，逐点材料丢弃构建出质量更高、内容更丰富的粗空间，能够有效地对初始粗网格分辨率下的薄单元进行“半粗化”。

我们考虑图13中径向细化16倍的情形。随着径向网格细化，该情形网格中单元的纵横比比前一段所述情形显著更接近于1。尽管距离拉普拉斯丢弃方案在图11的各向异性情形中、在相当低的丢弃容差（$\theta \leq 0.01$）下取得了较低的迭代次数和成本，但我们在图13中观察到，无论采用逐点丢弃还是截断丢弃方法，在所有丢弃容差下，迭代次数和成本均未优于不丢弃选项。在此情形中，将网格信息纳入剔除方案似乎对多重网格方法的收敛产生了负面影响。另一方面，结合逐点丢弃的经典平滑聚合对于所有大于零的丢弃容差 $\theta \geq 0$表现相当良好。这与前一情形中各向异性网格的结果相反；在那里，基于距离拉普拉斯算子的

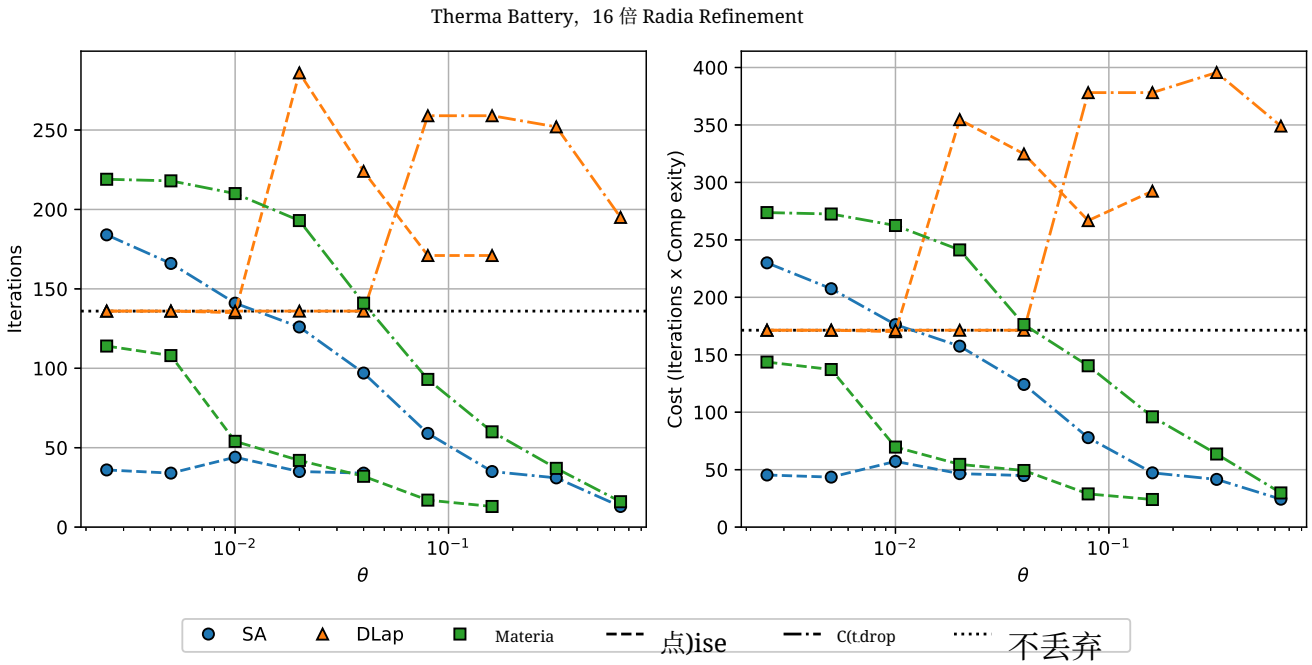


图13在不同丢弃容差下，针对丢弃准则C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$与连接强度度量S^{sa}、S^{dlap}和S_{σ}^{dlap}的组合，展示了16倍径向网格细化情形下的迭代次数和应用成本。未展示无法达到指定粗网格规模或无法收敛的配置。网格纵横比的降低减弱了距离拉普拉斯连接强度的影响，并提升了平滑聚合和基于材料的格式的表现。

方案相对于基于平滑聚合的丢弃方案带来了显著改进。不过，两种情形之间始终不变的一点是，基于材料的方法能够提供最佳的迭代次数和成本。利用网格与材料属性信息，在 $\theta \geq 0.01$的条件下，逐点材料丢弃相对于逐点平滑聚合丢弃取得了相当的迭代次数和成本。我们观察到，只要使用足够高的丢弃容差 $\theta \geq 0.08$，逐点材料丢弃相对于逐点平滑聚合便可提供更优的迭代次数和成本。此外，采用 $\theta = 0.08$的逐点材料丢弃相对于采用 $\theta = 0.04$的逐点平滑聚合丢弃，将迭代次数从34降至17，同时平滑器复杂度仅从1.32适度增至1.70。因此，基于材料的逐点丢弃的最佳配置使总体求解成本相对于最佳逐点材料平滑聚合丢弃降为原来的1/1.5。最后，我们注意到，尽管较大的丢弃容差改善了迭代次数，但基于材料的逐点丢弃剔除方案的成本 在 $\theta = 0.16$处达到最小，而 $\theta = 0.08$的表现与之相当。

在丢弃容差足够大时，基于材料的丢弃能带来更少的迭代次数和更低的成本，但截断丢弃法并非如此。图13显示，对于所有考察的丢弃容差，采用截断丢弃的平滑聚合都比采用截断丢弃的基于材料格式成本更低。作者指出，随着丢弃容差增大，迭代次数和总体计算成本均持续下降。这一趋势表明，选择更大的 θ 值或许能进一步提升效果。

现在考虑图14中径向细化16倍且经过一次均匀网格细化的情形。正如均匀网格细化情形下所预期的那样，图14中的结果与图13所示结果十分相似。作者指出，采用逐点丢弃的基于材料的格式迭代次数最低，并且在 $\theta = 0.08$ 时成本最低； $\theta = 0.16$ 时的性能也与之相当。与径向细化16倍的情形类似，当 $0.02 \leq \theta \leq 0.16$ 时，我们观察到，采用逐点丢弃的基于材料的格式在迭代次数和成本方面优于采用逐点丢弃的平滑聚合。当 $\theta = 0.32$ 和 $\theta = 0.64$ 除外时，逐点方法明显胜过基于截断丢弃的格式。最后，采用基于材料的逐点丢弃在 $\theta = 0.08$ 时取得了观测到的最低迭代次数和成本。

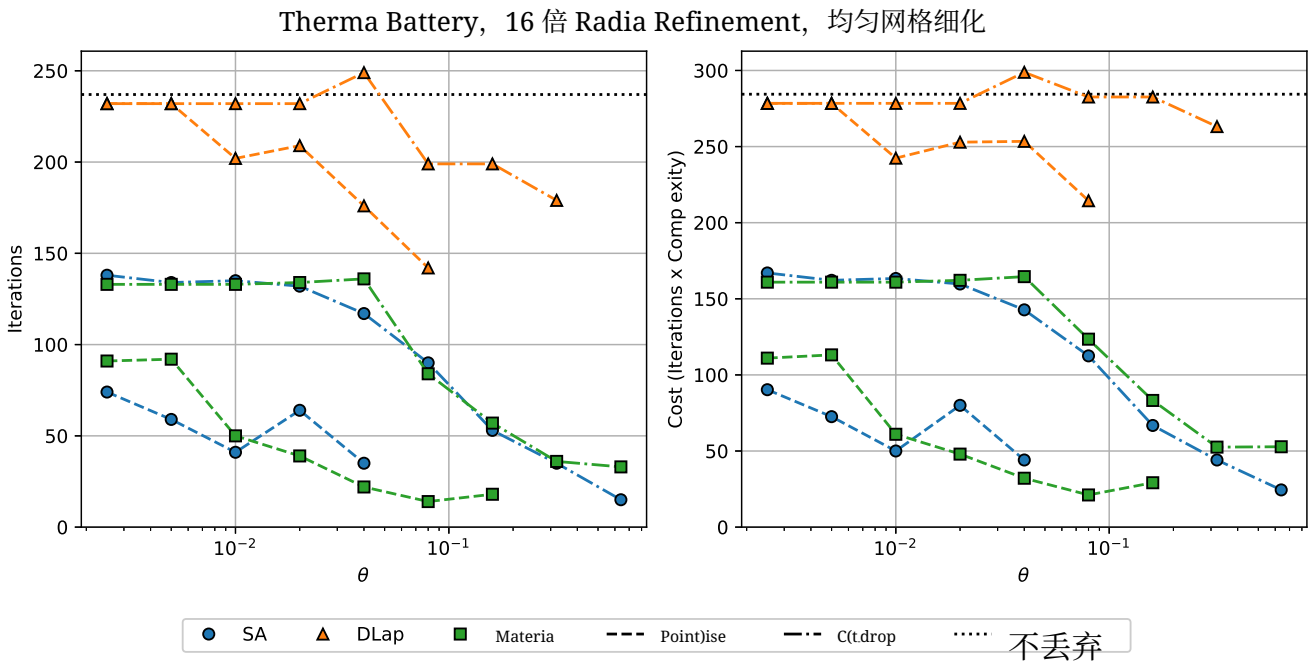


图 14 不同丢弃容差下的迭代次数和应用成本 θ，针对丢弃准则 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 与连接强度度量 S^{sa}、S^{dlap} 和 S_{σ}^{dlap} 的组合，采用 16 倍径向网格细化，以及单个均匀网格细化案例。未达到指定粗网格规模或未能收敛的配置未予展示。平滑聚合和基于材料的格式相对于距离拉普拉斯连接强度的相对性能，与 16 倍径向细化案例中的情况相同；合适的丢弃容差 θ 也保持不变。

为了评估逐点平滑聚合和基于材料的算法的可扩展性，我们在桑迪亚国家实验室的 Eclipse 系统上，使用1至8192个处理器开展强扩展与弱扩展研究。该系统的每个节点配备双插槽、18核的英特尔 Broadwell E5-2695 处理器。图13和图14中，逐点平滑聚合丢弃采用成本最低的配置，即 $\theta = 0.04$。同样，图13和图14表明，逐点基于材料的丢弃在 $\theta = 0.08$ 时成本最低。我们以径向细化16倍、具有 1.27×10^5 个自由度的情形作为基准，并进行四级均匀网格细化，最多达到 3.25×10^7。每种问题规模都从一个初始处理器数量开始，随后总共加倍5次，以进行强扩展研究。图中绘制了表示每个处理器自由度数恒定的虚线，以展示弱扩展。对每种配置，代数多重网格求解器的设置和求解阶段均重复100次，并舍弃首次运行作为预热。图15报告了设置、求解以及设置与求解总和的平均时间，误差棒表示均值的一个标准差。

图 15 中的扩展结果证实，基于材料的逐点方法比逐点平滑聚合能更快地求解。这些结果与图 13 和图 14 中的成本预测一致。不过，逐点平滑聚合的设置成本低于基于材料的格式。在矩阵保持不变的连续右端项求解场景中，例如求解不可压缩纳维–斯托克斯方程[40,41]，基于材料的格式较高的设置成本或可得到缓解。在这种情况下，多重网格设置成本只需支付一次。尽管设置成本较高，在所考察的所有问题规模和资源配置下，基于材料的方法的设置与求解总和仍优于逐点平滑聚合。超过设置和求解总和的强扩展极限（$n/P < 15\,000$）后，基于材料的丢弃的设置相关成本开始超过求解成本。尽管如此，基于材料的丢弃格式在端到端设置与求解总成本方面仍优于基于 SA 的丢弃格式。此外，就求解时间而言，基于材料的丢弃相较于基于 SA 的丢弃可显著加速。例如，基于平滑聚合的丢弃只有在使用 2^{10} 个 MPI 进程后，才能使 $n = 3.25 \times 10^7$ 问题的求解时间达到亚秒级，为 0.58 秒。基于材料的格式仅需 2^8 个 MPI 进程，便几乎能达到亚秒级求解时间。在同样使用 2^{10} 个 MPI 进程的情况下，基于材料的方法可将求解时间缩短至 0.35 秒。

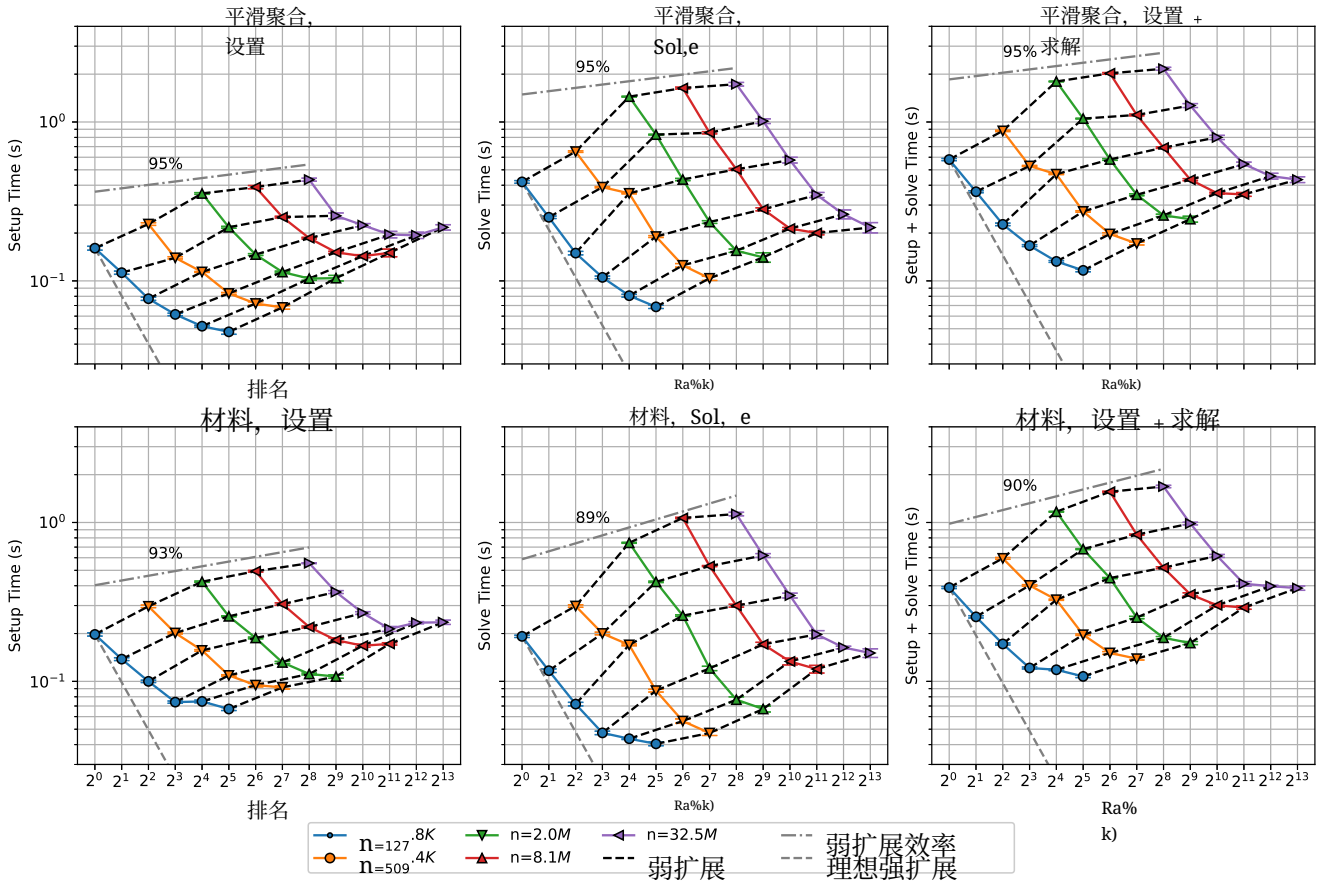
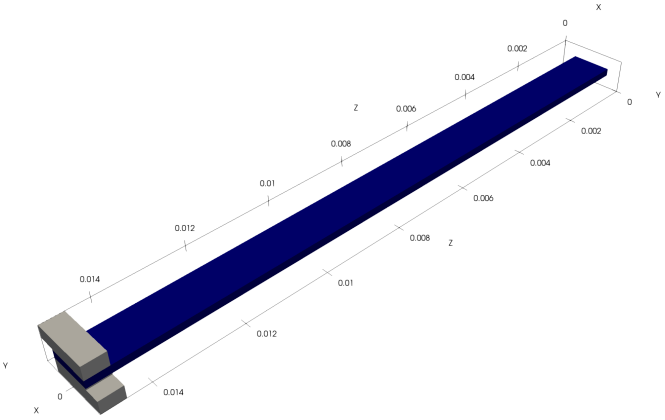


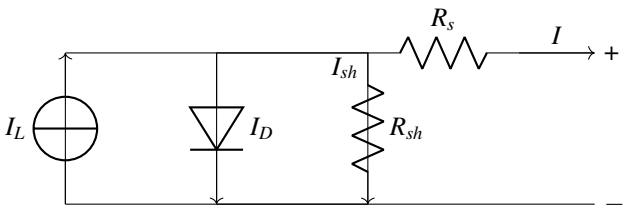
图 15 热电池问题的扩展结果，从 16 倍径向细化开始，经过四个级别的均匀网格细化。将使用 $\theta = 0.04$ 的基于平滑聚合的逐点丢弃与使用 $\theta = 0.08$ 的基于材料的丢弃进行比较。报告多重网格设置、求解和总耗时。图中显示理想强扩展以供参考，同时还给出了对应于最大三个问题规模下估计弱扩展效率的线条。理想弱扩展为水平线。

当 $n/P \sim 30\,000$ 时，基于材料的逐点丢弃和 SA 逐点丢弃的多重网格设置阶段均可达到或超过 50% 的强扩展效率。尽管基于材料的方法在设置阶段的强可扩展性略好，但在强扩展极限下，SA 丢弃格式的总体设置时间略短。不过，求解阶段的强可扩展性明显更好：基于材料的丢弃和基于平滑聚合的丢弃，其 50% 效率点分别为 $n/P \sim 8000$。在强扩展极限下，基于材料的丢弃比平滑聚合方法具有更短的求解时间。例如，基于材料的丢弃使用 2^{12} 个进程时，可在 0.17 秒内求解 $n = 3.25 \times 10^7$；而 SA 方法在相同资源用量和问题规模下需要 0.26 秒。对于设置与求解总和，平滑聚合和基于材料的丢弃的强扩展极限均为 $n/P \sim 16\,000$。尽管弱扩展曲线中 n/P 固定不变，设置时间和求解时间仍会受到问题规模的影响。在一定程度上，这是可以预期的。对于二维泊松问题，矩阵-向量乘积所需的通信模板至少需要 9 个处理器才能被完全占满；这些乘积用于多重网格切比雪夫平滑器和残差计算。这解释了多重网格求解阶段在问题规模从 $n = 1.27 \times 10^5$ 增至 $n = 2.03 \times 10^6$ 时相对较差的弱扩展表现。弱扩展中的第二个预期性能影响，是通信从纯节点内转为节点间；对于 Eclipse，这一变化发生在 32 个进程时。尽管如此，对于 SA 丢弃格式，在问题规模从 $n = 2.03 \times 10^6$ 增至 $n = 3.25 \times 10^7$ 时，我们观察到设置和求解均具有良好的弱扩展效率，接近 95%。基于材料的格式也保持了不错的弱扩展表现：设置阶段效率为 93%，求解阶段为 89%。

我们通过比较三种热激活电池案例中各剔除方案的相对性能，结束讨论。在高度各向异性网格上，我们观察到，基于距离拉普拉斯的丢弃



(a) 含互连的单个太阳能电池模型的几何结构。银色区域为各向同性电导率为 σ 的银互连，$= 6.21 \times 10^7$ S m^{-1}。深蓝色区域为具有高度各向异性电导率的电池，电导率为 $\sigma = \text{diag}\left(0.05, 0.05, 3.6 \times 10^6\right)$ S m^{-1}.



(b) 单二极管太阳能电池的等效电路。

图 16完整太阳能电池单位体积模型。

方案的表现远优于平滑聚合方法。然而，进行 16 倍径向网格细化后，平滑聚合方法的表现反而超过了基于距离拉普拉斯的方案。这意味着，网格细化后，用户需要更改求解器设置才能获得最佳性能。不过，基于材料的逐点方法无需这样做；例如，在固定 $\theta = 0.08$ 时，它仍能实现接近最佳的性能。平滑聚合方法能够适应材料系数的跳变，但无法同时适应材料系数跳变和网格各向异性。相反，基于距离拉普拉斯的方法表现恰好相反：它们能够适应网格各向异性，却无法适应材料属性的跳变。而基于材料的逐点丢弃方法结合了平滑聚合方法和基于距离拉普拉斯的方法各自的优点；基于材料的丢弃能够同时适应材料系数跳变和网格各向异性。

4.4 太阳能电池示例

开裂[42]、遮阴[43],和焦耳热[44]等效应会显著影响光伏电池的性能。为了更好地了解这些效应的影响，需要对控制物理过程进行详细建模。我们考虑图 16 所示的模型问题，它代表完整太阳能电池的一个简化“单位体积”。图 16a 中几何体生成的网格质量很高；网格采用六面体单元，整个域内的缩放雅可比均不小于 0.58，且大多数单元的缩放雅可比为 1。该域由两种不同的材料构成：第一种是具有较大各向同性电导率的银互连，$\sigma = 6.21 \times 10^7$ S m^{-1}；第二种是具有高度各向异性电导率的太阳能电池块体材料，$\sigma = \text{diag}\left(0.05, 0.05, 3.6 \times 10^6\right)$ S m^{-1}。我们求解电压V，它遵循欧姆定律

$$\nabla \cdot (-\sigma(x)\nabla V) = S, \tag{22}$$

其中 S 是一个源项。源项 S 表示如图 16b 所示的单二极管太阳能电池等效电路的输出电流。该电流源项由特性方程给出

$$S = I = I_L - I_0 \left[\exp\left(\frac{V + IR_s}{nV_T}\right)\right] - \frac{V + IR_s}{R_{sh}}, \tag{23}$$

其中 V 为电压（V），I_L 为光生电流（A），I_0 为二极管反向饱和电流（A），R_s 为串联电阻（Ω），R_{sh} 为并联电阻（Ω），n 为二极管理想因子（无量纲），最后 V_T 为热电压，由下式给出

$$V_T = \frac{kT_c}{q}$$

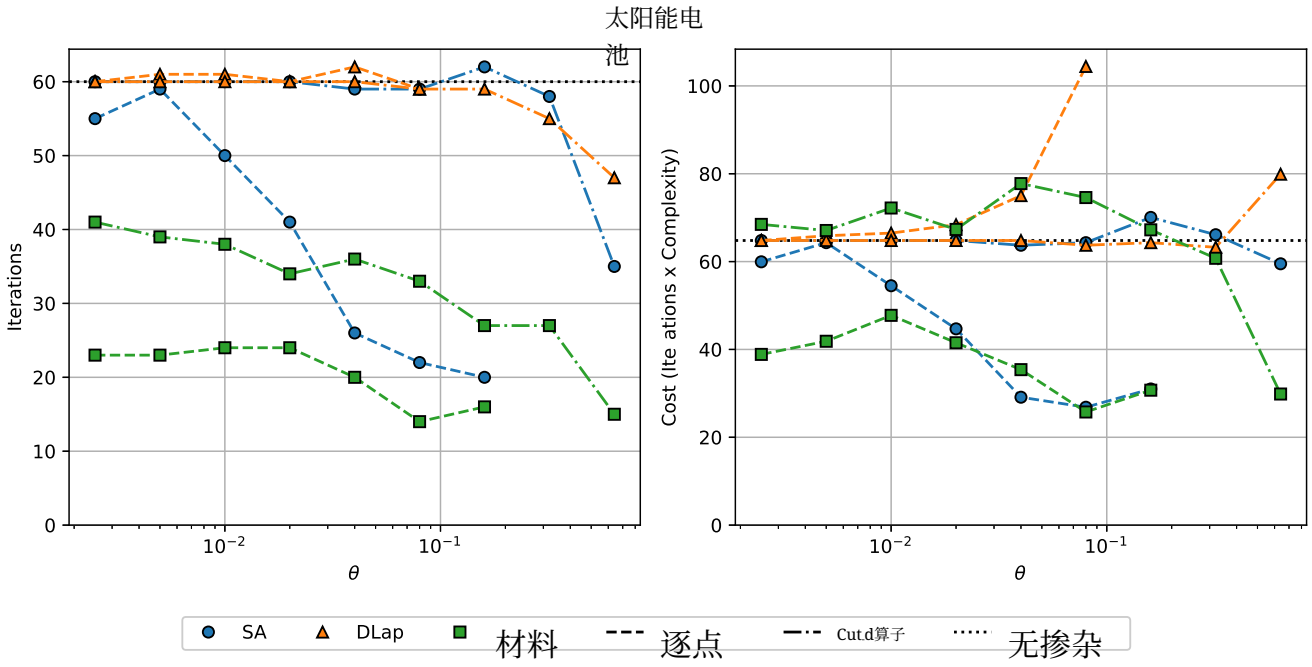


图 17 太阳能电池案例中，不同丢弃容差下的迭代次数和应用成本，展示了丢弃准则组合 C^{pw}、$C^{\text{cut-drop}}$ 与连接强度度量 S^{sa}、S^{dlap} 和S^{dlap}_{σ}的结果。未达到指定粗网格规模或未能收敛的配置未予展示。与不丢弃相比，距离拉普拉斯连接强度在迭代次数和成本方面几乎没有改善。基于材料的丢弃在几乎所有丢弃容差下都能实现最低的迭代次数和成本 $\theta \leq 0.16$。

其中玻尔兹曼常数 $k = 1.381 \times 10^{-23}\,\text{JK}^{-1}$，元电荷 $q = 1.602 \times 10^{-19}\,\text{C}$。有关太阳能电池物理学的更完整介绍，读者可参阅 Gray[45] 提供的导论。

在我们的实验中，线性求解器在绝对 l^2-范数残差达到 10^{-6} 时终止。当某一层的未知量数量降至 5000 行以下时，我们停止多重网格粗化。丢弃容差从 $\theta = 0$（不丢弃）变化至 $\theta = 0.64$。太阳能电池案例的结果见图 17。当 $\theta \leq 0.16$ 时，基于材料的逐点丢弃在几乎所有场景中都能提供迭代次数最少、成本最低的求解器，并在 $\theta = 0.08$ 时达到其最优配置。观察到的唯一例外是，在 $\theta = 0.04$ 时，基于 SA 的逐点丢弃优于基于材料的方法。对于$\theta \geq 0.32$，多重网格粗化陷入停滞，无法在最多 10 层的限制内达到所需的 5000 个粗网格规模上限。逐点平滑聚合的成本略高于逐点材料方法，但所需迭代次数更多。与逐点材料方法类似，逐点平滑聚合在 $\theta = 0.08$ 时达到最低成本，并在 $\theta \geq 0.32$ 时陷入停滞。距离拉普拉斯算子和截断丢弃方法仅在少数有限情形下，相较于不丢弃带来微乎其微的改进。鉴于现有网格质量较高，前一种结果并不令人意外。尽管材料截断丢弃能够提供比不丢弃迭代次数更少的求解器，但与逐点 SA 或基于材料的丢弃相比，其设置成本通常高得令人难以接受。一个值得注意的例外是，$\theta = 0.64$ 时的基于材料的截断丢弃，其性能与 $\theta = 0.08$ 时成本最低的基于材料逐点丢弃相当。我们得出结论，基于材料的逐点丢弃能够提供良好的求解器，且对 θ 的具体选择具有稳健性；逐点平滑聚合作为第二种选择，表现相近，这与第 4.3 节中的精细案例类似。总而言之，新提出的基于材料的距离拉普拉斯连接强度度量不仅可与现有方法相媲美，而且在具有复杂材料行为的三维应用案例中表现更优。

5 总结

本文提出了一种面向材料的平滑聚合代数多重网格方法连接强度新度量，可提高材料分布高度非均质且各向异性显著的问题的稳健性。这类系统常见于工程应用中，并会严重降低代数多重网格的性能。在粗化过程中显式纳入材料张量信息，可弥补经典连接强度度量和基于距离的度量的不足，从而更准确地识别跨材料界面的弱连接，并与各向异性方向相协调。由此得到的粗网格层次结构能够更好地表征非均质和各向异性问题的底层物理特性，进而改善收敛性质。

通过一系列学术测试和实际应用，包括各向异性热扩散、热激活电池和太阳能电池单元，我们证明了该方法对于系数跳跃、各向异性和网格变化具有稳健性。在这些测试案例中，无论是迭代次数还是求解器总体成本，基于材料的连接强度始终优于经典平滑聚合和距离拉普拉斯方法。参数研究表明，该方法在广泛的丢弃容差范围内均有效；不同的丢弃准则变体则可根据性能或稳健性需求提供灵活选择。重要的是，可扩展性和并行性能测试证实了该方法适用于大规模高性能计算模拟。

总体而言，所提出的材料感知连接强度结合了现有连接强度度量的优点，同时改进了对材料属性的处理，为具有复杂材料分布和各向异性的标量偏微分方程提供了一种稳健、可扩展且高效的代数多重网格方法。未来的工作将重点把这一方法扩展到不同类型的偏微分方程，例如麦克斯韦方程，或计算固体力学中的方程组，如弹性力学方程。另一个值得关注的方向是，将所提出的连接强度度量与块代数多重网格方法结合，用于求解多物理场应用；此外，还包括构造基于格林函数代理的连接强度度量。这些方法的开源软件实现已收录于 Trilinos 的多重网格软件包 MUELU[28] 中。

数据可用性声明

本研究中开发并应用的代数多重网格预条件器的构建模块已在 Trilinos 中公开提供，网址为 https://github.com/trilinos/Trilinos[27 28]。支持本研究结果的所有其他数据，可应合理请求向通讯作者获取。

致谢

作者感谢 James Yuan Hartley 提供太阳能电池问题的问题设置。

M. F.、M. M. 和 A. P. 感谢*dtec.bw* - 德国联邦国防军数字化与技术研究中心在“hpc.bw - 高性能计算能力平台”项目下提供的资助。dtec.bw 由欧盟 NextGenerationEU 资助。

本工作得到桑迪亚国家实验室实验室指导的研究与开发计划（项目 236939）的支持。桑迪亚国家实验室是一家多任务实验室，由桑迪亚国家技术与工程解决方案有限责任公司管理和运营，该公司是霍尼韦尔国际公司的全资子公司，并根据合同 DE-NA0003525 为美国能源部国家核安全管理局运营。SAND2026-16734O

利益冲突

作者声明，他们没有已知的可能影响本文所报告工作的竞争性经济利益或个人关系。

参考文献

1. Bochev PB, Hu JJ, Robinson AC, Tuminaro RS. 面向稳健的三维Z箍缩模拟：非均质导体中磁扩散的离散化与快速求解器。《数值分析电子汇刊》。2003;15:186–210. 2. Robinson A, Brunner T, Carroll S, Drake R, Garasi C, Gardiner T, 等. 收录于：ALEGRA：一种任意拉格朗日-欧拉多材料、多物理场代码；。可从以下网址获取：https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2008-1235。3. Robinson AC, Drake RR, Luchini CB, Moral RJ, Niederhaus JHJ, Petney SV. ALEGRA中耦合电磁连续介质力学近似的MPMD方法。《应用力学与工程中的计算方法》。2024;429:117164.

4. Cole K, Beck JV, Haji-Sheikh A, Litkouhi B. 使用格林函数进行热传导。第2版。CRC出版社，Taylor & Francis集团；2010. 5. Haji-Sheikh A, Beck JV, Agonafer D. 多层体中的稳态热传导。《国际传热传质期刊》。2003;46(13):2363–2379. 6. Chorin AJ. 纳维–斯托克斯方程的数值解。《计算数学》。1968;22:745–762. 7. Témam R. 通过分步法（I）近似求解纳维–斯托克斯方程。《理性力学与分析档案》。1969;32(2):135–153. 8. Patankar SV, Spalding DB. 三维抛物流中热、质量和动量传递的计算方法。《国际传热传质期刊》。1972;15(10):1787–1806. 9. Voskuilen TG, Moffat HK, Schroeder BB, Roberts SA. 热激活电池单体的多保真度电化学建模。《电源期刊》。2021;488:229469. 10. Brandt A, McCormick S, Ruge J. 用于稀疏矩阵方程的代数多重网格（AMG）。收录于：Evans D，编者。《稀疏性及其应用》。剑桥：剑桥大学出版社；1984. 第257–284页。11. Ruge J, Stüben K. 代数多重网格（AMG）。收录于：McCormick S，编者。《多重网格方法》。应用数学前沿第3卷。费城：工业与应用数学学会；1985. 第73–130页。12. Heinlein A, Klawonn A, Lanser M, Weber J. 面向非均质问题的节约型FETI-DP和BDDC粗空间。《数值分析电子汇刊》。2020;第562–591页。在线获取：https://epub.oeaw.ac.at/?arp=0x003c1ad0 - 最后访问日期：8.12.2025。可从以下网址获取：https://epub.oeaw.ac.at/?arp=0x003c1ad0。13. Kim HH, Chung E, Wang J. 面向具有振荡及高对比度系数的三维椭圆问题的BDDC和FETI-DP预条件器及自适应粗空间。《计算物理学杂志》。2017;349:191–214. 14. Fang R, Kronbichler M, Wurzer M, Wall WA. 面向锂离子电池单体三维耦合有限元模型的并行、面向物理的整体求解器。《应用力学与工程中的计算方法》。2019;350:803–835. 15. Vanˇek P, Mandel J, Brezina M. 用于二阶和四阶椭圆问题的平滑聚合代数多重网格。《计算》。1996;56:179–196. 16. Brannick J, Brezina M, MacLachlan S, Manteuffel T, McCormick S, Ruge J. 一种基于能量的AMG粗化策略。《数值线性代数及其应用》。2006;13(2-3):133–148. 17. Olson LN, Schroder J, Tuminaro RS. 对代数多重网格强度度量的新视角。《数值线性代数及其应用》。2010;17(4):713–733. 18. Sala M, Lin P, Tuminaro R, Shadid J. 拉伸网格上非对称偏微分方程的代数多层预条件子。收录于：Widlund OB, Keyes DE，编者。《科学与工程中的区域分解方法XVI》。计算科学与工程讲义第55卷。施普林格出版社；2006. 第739–746页。19. Gee MW, Siefert CM, Hu JJ, Tuminaro RS, Sala MG. 2006.《ML 5.0平滑聚合用户指南》。桑迪亚国家实验室。SAND2006-2649。20. Brandt A, Brannick J, Kahl K, Livshits I. 各向异性扩散问题的代数距离：多层结果。《数值分析电子汇刊》。2015;44:472–496. 21. Vanˇek P, Brezina M, Mandel J. 基于平滑聚合的代数多重网格的收敛性。《数值数学》。2001;88:559–579. 22. Siefert C, Tuminaro R, Sunderland D. 提升平滑聚合代数多重网格在拉伸网格应用中的稳健性，2026。可从以下网址获取：https://arxiv.org/abs/2601.20119。23. Gee MW, Hu JJ, Tuminaro RS. 一种用于各向异性问题的新型平滑聚合多重网格方法。《数值线性代数及其应用》。2009;16(1):19–37. 24. Hu JJ, Siefert CM, Tuminaro RS. 面向难处理的拉伸网格和ˇa系数变化问题的平滑聚合。《数值线性代数及其应用》。2022;29(6):e2442. 25. Falgout RD. 代数多重网格简介。《科学与工程计算》。2006;8(6):24–33. 26. Clément P. 利用局部正则化进行有限元函数近似。《法国自动化、信息学与运筹学评论：数值分析》。1975;9(R2):77–84. 27. Heroux MA, Bartlett RA, Howle VE, Hoekstra RJ, Hu JJ, Kolda TG, 等. Trilinos项目概述。《ACM数学软件汇刊》。2005;31(3):397–423. 28. Trilinos。《Trilinos项目》。https://trilinos.github.io 2025。访问日期：2025年8月29日。

29. Mayr M, Heinlein A, Glusa C, Rajamanickam S, Arnst M, Bartlett R, 等. Trilinos：在多样化硬件架构上实现可扩展的科学计算 2025。获取地址：https://arxiv.org/abs/2503.08126。 30. Berger-Vergiat L, Glusa CA, Harper G, Hu JJ, Mayr M, Prokopenko A, 等. 2023。《 MueLu 用户指南》。美国新墨西哥州阿尔伯克基 87185：桑迪亚国家实验室。SAND2023-12265。 31. Green D, Hu X, Lore J, Mu L, Stowell ML. 在非各向异性对齐网格上求解具有强各向异性的扩散方程的高效高阶求解器。SIAM《科学计算杂志》。 2024；46(2)：S199–S222。 32. Brezina M, Falgout RD, MacLachlan S, Manteuffel T, McCormick SF, Ruge JW. 自适应代数多重网格。SIAM《科学计算杂志》。2006；27(4)：1261–1286。 33. Bavier E, Hoemmen M, Rajamanickam S, Thornquist H. Amesos2 和 Belos：大型稀疏线性系统的直接求解器和迭代求解器。《科学编程》。2012；20(3)：243875。 34. Deveci M, Rajamanickam S, Devine K, Catalyurek U. Multi-Jagged：可扩展的并行空间划分算法。《IEEE 并行与分布式系统汇刊》。2015 01；27：1–1。 35. 4C. 4C：全面的多物理场仿真框架。https://www.4c-multiphysics.org 2025。访问日期：2025年8月29日。 36. Crompton TR. 载于：《高温热激活储备电池》。伦敦：麦克米伦教育英国；1982。第202–212页。 37. Guidotti RA, Masset P. 热激活（热）电池技术：第一部分：概述。《电源期刊》。2006；161(2)：1443–1449。 38. Phillips MT. 热激活电池的多物理场预条件。编写中。 39. Cyr EC, Shadid JN, Tuminaro RS. Teko：一种块预条件功能，并通过纳维–斯托克斯方程和磁流体力学中的具体应用示例加以说明。SIAM《科学计算杂志》。2016；38(5)：S307–S331。 40. Fischer PF. 用于以连续右端项迭代求解 Ax=b 的投影技术。《应用力学与工程中的计算方法》。1998；163(1-4)：193–204。 41. Austin AP, Chalmers N, Warburton T. GPU 加速不可压缩流求解器中线性方程组序列的初始猜测。SIAM《科学计算杂志》。2021；43(4)：C259–C289。 42. Goudelis G, Lazaridis PI, Dhimish M. 光伏裂纹和热点预测模型综述。《能源》。2022；15(12)：4303。 43. Ramezani F, Mirhosseini M. 遮阴对光伏面板性能影响的建模。《可再生与可持续能源评论》。 2025；212：115432。 44. Shang A, Li X. 光伏器件：光电热物理与建模。《先进材料》。2017；29(8)：1603492。 45. Gray JL. 太阳能电池的物理学。《光伏科学与工程手册》。2011；2：82–128。