arXiv:2603.02763v1 [math.NA] 3 Mar 2026

局部弛豫：分层网格上的快速泊松方法

ZhenliXu *，QianYin †，HongyuZhou ‡2026年3月4日

摘要

局部松弛算法有望快速求解泊松方程。该算法通过局部无旋更新逐步计算电场分布，同时严格满足高斯定律。我们提出一种新颖的分层局部弛豫（HLR）方法，以加快无旋迭代的收敛速度。该局部算法将泊松方程改写为电场形式，并扫描每个网格单元以最小化相应的电能，从而避免求解线性系统。采用分层网格进行更新，显著加快了局部无旋更新过程中残差低频分量的缓慢收敛。我们通过收敛性分析证明了层次松弛方法的收敛性。数值结果表明，HLR 方法具有良好的精度和效率，而层次结构使总体计算复杂度相对于网格点数达到 $\mathcal{O}(N \log N)$。特别是，在求解泊松–玻尔兹曼方程和泊松–能斯特–普朗克方程中的应用，展现出其在需要频繁求解泊松方程的问题上的优异性能。

关键词和短语：泊松方程；非均匀介电常数；层次结构；局部无旋松弛。

1 引言

泊松方程是描述源分布与势场之间关系的基本模型，在许多领域中都普遍存在 [3, 15, 27, 43]。在分子动力学（MD）模拟中，长程静电力的准确计算依赖于反复求解泊松方程或其等价形式 [16, 38, 44]。此外，泊松方程还与能斯特–普朗克方程或弗拉索夫方程耦合，用于描述离子输运以及带电粒子在电场作用下的自洽演化 [19, 46]。在所有这些情况下，高效且可扩展的求解器对于实现高效模拟都至关重要。反复求解泊松方程是模拟大型或空间非均匀系统时的一项主要计算负担。有限元方法（FEM） [7, 40, 48] 和边界元方法（BEM） [2, 6, 13] 是求解泊松方程的两类传统方法，但对于时变问题，它们被认为效率较低。当介电常数随时间变化时，有限元法需要反复进行矩阵组装。边界元法依赖解析基本解，而解析基本解通常

*上海交通大学数学科学学院、MOE-LSC 和 CMA-Shanghai，中国上海 200240。（xuzl@sjtu.edu.cn）

†香港理工大学应用数学系，中国香港。（qqian.yin@polyu.edu.hk）

‡通讯作者。上海交通大学数学科学学院、MOE-LSC 和 CMA-Shanghai，中国上海 200240。（zhouhongyu@sjtu.edu.cn）

不适用于介电常数空间变化的问题。局部算法提供了一种高效的替代方案：它将电场作为基本变量，并将高斯定律作为约束条件，而不是直接求解静电势 [25, 37]。与介电常数恒定的情况相比，这种局部形式能够处理随时间变化的介电常数，且无需额外成本。

局部算法最初是为离散电荷系统提出的，Maggs 及其合作者 [25, 26, 37] 提出采用无旋弛豫，对库仑系统进行局部蒙特卡洛模拟。这一思想随后扩展到分子动力学方法 [10, 33] ，通过将全局耦合的库仑相互作用转化为局部更新的电磁场，在保持热力学性质的同时满足高斯定律和准静态约束。这类局部方法具有线性规模复杂度，且天然适用于并行计算，同时能够维持物理上一致的粒子—场动力学。随后，同一原理被用于求解 Poisson–Boltzmann（PB）方程：将 PB模型重新表述为一个使自由能泛函最小化的变分问题，并采用 Maggs 型算法 [1, 47]求解。最近，Qiao等人 [34, 35]进一步将局部算法推广至 Poisson–Nernst–Planck（PNP）模型，建立了 Maxwell–Amp`ere Nernst–Planck（MANP）框架来描述电荷输运。此外，局部算法为粒子网格（PIC）模拟提供了一种高效且物理一致的策略 [36], ，能够在局部更新电场和粒子位置，同时严格保持高斯定律，并支持大规模并行计算。

在现有文献中，电场在每个离散单元内进行局部更新。然而，这种弛豫更新在消除旋度残差的低频分量方面效率较低。受多重网格方法解决线性系统中高斯–赛德尔迭代针对低频误差收敛缓慢问题的启发 [14, 28, 30], ，我们提出一种高效的分层局部弛豫（HLR）方法来求解泊松方程。HLR方法将计算区域分解为由不同分辨率网格组成的层级，并在每个层级执行无旋弛豫。细网格上的弛豫能有效阻尼高频误差，而粗网格校正则能有效减小低频误差，从而加快整体收敛。我们表明，这一思路可以自然地扩展到其他基于Maggs型局部公式的算法，包括求解PB方程和MANP系统的算法。此外，通过采用镜像电荷法 [29], ，我们将局部算法推广到非周期边界条件。

与基于快速傅里叶变换的 [8, 11, 32]以及基于AMG的[39, 41] 方法等传统快速泊松求解器相比，HLR方法得益于其局部形式，能够自然适应随空间和时间变化的介电常数。不同于基于AMG的方法需要将问题离散化为大型稀疏线性系统，并针对时变介质反复进行刚度矩阵组装，HLR方法完全避免了全局代数形式与矩阵组装。此外，通过将层次结构引入局部无旋松弛，HLR方法能够高效消除低频旋度残差，从而显著加快收敛性并提升整体计算效率。凭借这些优势，HLR有望广泛应用于需要快速泊松求解器的各类问题。

本文其余部分安排如下：第 2 节重新表述泊松方程，并说明求解泊松方程等价于计算电场。第3 节介绍一类用于泊松方程的局部算法，并提出 HLR 方法。第 4 节对所提出的 HLR 方法进行严格的理论分析。第5 节展示数值实验，以验证所提出算法的准确性和效率。最后，在第6 节得出结论。

2 泊松方程的电场形式

考虑如下形式的泊松方程

$$-\nabla \cdot (\varepsilon(\boldsymbol{x})\nabla\phi) = \rho(\boldsymbol{x}), \tag{2.1}$$

其中， ϕ 是标量场， ε 是空间变化的系数， ρ 是给定的源项。在带电系统中，泊松方程描述给定的电荷分布如何产生静电势，以及介质的介电响应如何影响这一过程，其中 ϕ 对应电势， ε 为介电常数， ρ 描述电荷密度。因此，电场由 $\boldsymbol{E} = -\nabla\phi$给出。利用 $\boldsymbol{E}$，泊松方程可写为:

$$\text{Gauss's law: } \nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{E}) = \rho, \tag{2.2a}$$

$$\text{Curl free: } \nabla \times \boldsymbol{E} = 0. \tag{2.2b}$$

对于有界单连通区域，利用亥姆霍兹分解可以构造出 (2.1) 与 (2.2) 之间的等价关系 [20, 31]。

带电系统的静电能可以表示为电场的泛函:

$$\mathcal{F}_{\text{pot}}[\boldsymbol{E}] := \int_{\Omega} \frac{\varepsilon|\boldsymbol{E}|^2}{2} d\boldsymbol{x}. \tag{2.3}$$

在静电学中，介电常数 ε 必须为正，以确保连续介质在物理上可行且热力学稳定，使静电能量密度保持正定。命题1 阐述了静电能的凸性，因此可以通过求解约束能量泛函最小化问题来计算静电场。

命题1. 静电能泛函 $\mathcal{F}_{pot}: L^2(\Omega\ \mathbb{R}^n) \to \mathbb{R}$ 是凸的。具体而言，对于任意 $\boldsymbol{E}_1, \boldsymbol{E}_2 \in L^2(\Omega\ \mathbb{R}^n)$，以及 $\forall\theta \in (0,\ 1)$，有

$$\mathcal{F}_{pot}(\theta\boldsymbol{E}_1 + (1-\theta)\boldsymbol{E}_2) \le \theta\mathcal{F}_{pot}(\boldsymbol{E}_1) + (1-\theta)\mathcal{F}_{pot}(\boldsymbol{E}_2). \tag{2.4}$$

当且仅当 $\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{E}_2$ 时，等号成立。

证明。 由于 $\varepsilon > 0$, (2.4) 等价于以下不等式,

$$|\theta\boldsymbol{E}_1 + (1-\theta)\boldsymbol{E}_2|^2 \le \theta|\boldsymbol{E}_1|^2 + (1-\theta)|\boldsymbol{E}_2|^2. \tag{2.5}$$

剩下只需证明 (2.5) 成立,

$$\begin{aligned} |\theta\boldsymbol{E}_1 + (1-\theta)\boldsymbol{E}_2|^2 &\le (|\theta\boldsymbol{E}_1| + |(1-\theta)\boldsymbol{E}_2|)^2 \\ &= \theta^2|\ \boldsymbol{E}_1|^2 + (1-\theta)^2|\boldsymbol{E}_2|^2 + 2\theta(1-\theta)|\boldsymbol{E}_1||\boldsymbol{E}_2| \\ &\le \theta^2|\boldsymbol{E}_1|^2 + (1-\theta)^2|\boldsymbol{E}_2|^2 + \theta(1-\theta)(|\boldsymbol{E}_1|^2 + |\boldsymbol{E}_2|^2) \\ &= \theta|\boldsymbol{E}_1|^2 + (1-\theta)|\boldsymbol{E}_2|^2. \end{aligned}$$

当且仅当 $\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{E}_2$ 时等号成立，这显而易见。 □

考虑上述凸静电能在高斯定律约束（2.2a）下的极小化问题。由于静电能泛函（2.3）是凸的，且高斯定律约束是线性的，因此相应的约束极小化问题是一个凸优化问题。由此，Karush–Kuhn–Tucker（KKT）条件 [17]是极小值点的充要条件。该优化问题的拉格朗日泛函为

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{E},\phi] := \int_\Omega \frac{\varepsilon|\boldsymbol{E}|^2}{2} d\boldsymbol{x} - \int_\Omega \phi(\nabla\cdot(\varepsilon\boldsymbol{E}) - \rho)\, d\boldsymbol{x},$$

其中 ϕ 是拉格朗日乘子。根据驻定条件和原始可行性条件，可得

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi \quad \text{and} \quad \nabla\cdot(\varepsilon\boldsymbol{E}) = \rho.$$

这表明，拉格朗日乘子 ϕ恰好对应于静电势，且极小值点处的电场满足无旋条件 $\nabla\times\boldsymbol{E} = 0$。

事实上，可以证明，由上述能量泛函的极小化得到的电场 $\boldsymbol{E}$ 与适当索伯列夫空间中泊松方程弱解的负梯度一致。为简单起见，我们假设 $\Omega = (0,\ L_x) \times (0,\ L_y)$ 是一个具有周期性边界条件的区域。令 $L^p_{per}(\Omega)$ 和 $H^k_{per}(\Omega)$ 分别表示所有在 $\mathbb{R}^n$ 上定义、以 Ω 为周期且在 Ω 上的限制分别属于 $L^p(\Omega)$ 和 $H^k(\Omega)$ 的函数空间。定义

$$\mathring{L}^p_{per}(\Omega) = \{f(\boldsymbol{x}) \in L^p_{per}(\Omega) : \mathscr{A}_\Omega(f) = 0\},$$
$$\mathring{H}^k_{per}(\Omega) = \{f(\boldsymbol{x}) \in H^k_{per}(\Omega) : \mathscr{A}_\Omega(f) = 0\},$$

其中 $\mathscr{A}_\Omega(f)$ 表示平均值

$$\mathscr{A}_\Omega(f) := \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega f(\boldsymbol{x})\ d\boldsymbol{x}.$$

空间 所有Ω-周期 C^k-函数构成的空间记为 $C^k_{per}(\Omega)$，其中任意 $k\in\mathbb{Z}$ 均成立，进一步定义 e

$$H(\mathrm{div},\Omega) = \{\boldsymbol{E}\in L^2(\Omega) : \nabla\cdot\boldsymbol{E}\in L^2(\Omega)\},$$
$$H_{per}(\mathrm{div},\Omega) = \text{the } H(\mathrm{div},\Omega)\text{-closure of } C^1_{per}(\overline{\Omega}) \text{ functions restricted to } \Omega.$$

给定 $\rho\in L^2_{per}(\Omega)$ 和 $\varepsilon\in L^\infty_{per}(\Omega)$，记

$$S_\rho = \{\boldsymbol{E}\in H_{per}(\mathrm{div},\Omega) : \nabla\cdot\varepsilon\boldsymbol{E} = \rho\}. \tag{2.6}$$

假设 $\rho\in\mathring{L}^2_{per}(\Omega)$ 和 ε 满足

$$0 < \varepsilon_{\min} < \varepsilon(\boldsymbol{x}) < \varepsilon_{\max}, \quad \forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n, \tag{2.7}$$

其中 $\varepsilon_{\min}$ 和 $\varepsilon_{\max}$ 分别为下界和上界。定理2.1 由 [22]给出。

定理 2.1。 *([22])* 设 $\rho\in\mathring{L}^2_{per}(\Omega)$ 和 $\varepsilon\in L^\infty_{per}(\Omega)$ 满足 (2.7)。定义

$$I[\phi] = \int_\Omega \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 - \rho\phi\right) d\boldsymbol{x} \quad \forall\phi\in H^1_{per}(\Omega), \tag{2.8}$$
$$F[\boldsymbol{E}] = \int_\Omega \frac{\varepsilon}{2}|\boldsymbol{E}|^2\ d\boldsymbol{x} \quad \forall\boldsymbol{E}\in S_\rho. \tag{2.9}$$

于是有，

1. 存在唯一的 $\phi_{min} \in \mathring{H}^1_{per}(\Omega)$ 使得 $I[\phi_{min}] = \text{最小值}_{\phi\in\mathring{H}^1_{per}(\Omega)}\, I[\phi]$，并且它是 $\mathring{H}^1_{per}(\Omega)$ 中泊松方程 (2.1)的唯一弱解。

2. 存在唯一的 $\boldsymbol{E}_{min} \in S_\rho$，使得 $F[\boldsymbol{E}_{min}] = \min_{\boldsymbol{E}\in S_\rho} F[\boldsymbol{E}]$。此外，有$\boldsymbol{E}_{min} = -\nabla\phi_{min}$.

该定理表明，求解泊松方程（2.1）等价于求解（2.9）中的极小化问题。而施加限制条件 $\boldsymbol{E} \in S_\rho$ 的条件，恰好就是高斯定律约束（2.2a）。

3 局部弛豫方法

为便于表述，本节中的所有理论推导、算法步骤和符号定义均明确限于二维构型。需要强调的是，所提出的数值算法可直接应用于三维问题，不会带来任何新的挑战，也无需进行额外的结构调整；相应的三维数值实验见第5节。

3.1 离散化

计算区域 $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ 由一个均匀网格覆盖，该网格在两个坐标方向上的网格间距分别为Δx 和 Δy。令 $\Delta\Omega = \Delta x\Delta y$ 表示一个网格单元的面积。令 N_x 和N_y 分别表示每个维度上的网格点数。记 $\Delta x\mathbb{Z} \times \Delta y\mathbb{Z} = \{(i\Delta x, j\Delta y) : i, j \in \mathbb{Z}\}$以及 $\Delta x(\mathbb{Z} + 1/2) \times \Delta y(\mathbb{Z} + 1/2) = \{((i + \frac{1}{2})\Delta x, (j + \frac{1}{2})\Delta y) : i, j \in \mathbb{Z}\}$。对于任意网格函数$f: \Delta x\mathbb{Z}\times \Delta y\mathbb{Z} \to \mathbb{R}$，记作 $f_{ij} = f(i\Delta x, j\Delta y)$。对于 Ω-周期网格函数，定义空间

$$V_h = \{\overline{\Omega}\text{-periodic grid functions } f : \Delta x\mathbb{Z} \times \Delta y\mathbb{Z} \to \mathbb{R}\}, \tag{3.1}$$

$$\text{and} \quad \mathring{V}_h = \{f \in V_h : \mathscr{A}_h(f) = 0\}, \tag{3.2}$$

其中 $\mathscr{A}_h$ 表示离散平均

$$\mathscr{A}_h(f) = \frac{1}{N_xN_y}\sum_{i=0}^{N_x-1}\sum_{j=0}^{N_y-1} f_{ij}. \tag{3.3}$$

给定 $\boldsymbol{E} = (E_x, E_y)$，定义离散电场为一个向量值函数

$$\mathbb{E}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = (E_{i+\frac{1}{2},j}, E_{i,j+\frac{1}{2}}) \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}, \tag{3.4}$$

其中 $E_{i+\frac{1}{2},j}$表示 E_x在网格点 $((i + \frac{1}{2})\Delta x, j\Delta y)$ 处的值，而 $E_{i,j+\frac{1}{2}}$表示 E_y 在网格点 $(i\Delta x, (j + \frac{1}{2})\Delta y)$ 处的值。记

$$Y_h = \{\overline{\Omega} - \text{periodic functions } \mathbb{E} : \Delta x(\mathbb{Z} + 1/2) \times \Delta y(\mathbb{Z} + 1/2) \to \mathbb{R}^2\}. \tag{3.5}$$

对于任意 $\mathbb{E} \in Y_h$，定义离散平均

$$\mathscr{A}_h(\mathbb{E}) = \frac{1}{N_xN_y}\sum_{i=0}^{N_x-1}\sum_{j=0}^{N_y-1} (E_{i+\frac{1}{2},j}, E_{i,j+\frac{1}{2}}),$$

以及范数

$$||\mathbb{E}||_h = \sqrt{\Delta\Omega \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \left(E_{i,j+\frac{1}{2}}^2 + E_{i+\frac{1}{2},j}^2 \right)}.$$

在 Y_h 上的离散散度和旋度定义为

$$(\nabla_h \cdot \mathbb{E})_{i,j} = \frac{E_{i+\frac{1}{2},j} - E_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{E_{i,j+\frac{1}{2}} - E_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y},$$
$$(\nabla_h \times \mathbb{E})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \frac{E_{i+1,j+\frac{1}{2}} - E_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{E_{i+\frac{1}{2},j+1} - E_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta y}.$$

给定 $\varepsilon \in C_{per}(\overline{\Omega})$ 满足 (2.7)，定义一个新的平均值 $\Delta x(\mathbb{Z}+1/2) \times \Delta y(\mathbb{Z}+1/2)$ b y

$$\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\varepsilon_{i,j} + \varepsilon_{i+1,j}}{2}, \quad \varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon_{i,j} + \varepsilon_{i,j+1}}{2}.$$

Gi定 $\rho^h \in \mathring{V}_h$ 离散电荷密度，高斯定律 (2.2a) 可离散化为 s

$$\nabla_h \cdot (\varepsilon \mathbb{E}) = \rho^h. \tag{3.6}$$

而静电能 (2.3) 可近似表示为

$$\mathcal{F}^h[\mathbb{E}] = \frac{\Delta\Omega}{2} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} (\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}} E_{i,j+\frac{1}{2}}^2 + \varepsilon_{i+\frac{1}{2},j} E_{i+\frac{1}{2},j}^2), \tag{3.7}$$

其需在离散高斯定律 (3.6) 的约束下取最小值 .

3.2 单网格松弛

局部算法首先初始化一个电场 $\mathbb{E}^{(0)}$，使其满足高斯定律的离散形式（3.6）。在某些必须在每个时间步求解泊松方程的应用中，满足高斯定律的电场可以通过上一时间步电场的时间演化得到。相比之下，在更广泛的情形中，该电场事先未知，因此需要显式计算。值得注意的是，构造电场 $\mathbb{E}^{(0)}$ 的过程并不唯一，一种可行方法见 [1]。令$\rho_j = \sum_{i=0}^{N_x-1} \rho_{ij}^h / N_x$表示沿第 j条 x对齐线的平均电荷。对于 $i = 0$、$\cdots$、$N_x - 1$，电场的 y分量随后由下式计算

–

$$\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}} E_{i,j+\frac{1}{2}} = \varepsilon_{i,j-\frac{1}{2}} E_{i,j-\frac{1}{2}} + \Delta y \bar{\rho}_j, \quad j = 1, \cdots, N_y - 1, \tag{3.8}$$

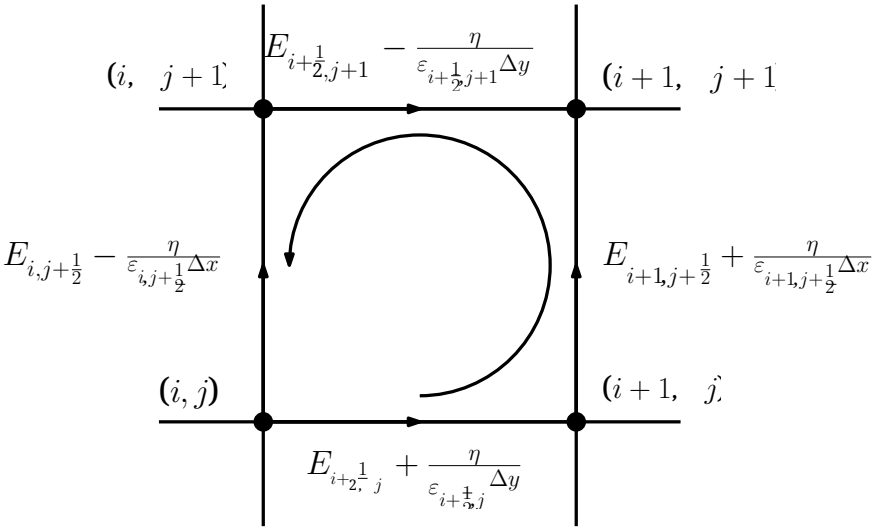
其中 $E_{i,-\frac{1}{2}} = 0$ 对所有 $i = 0$、$\cdots$、$N_x - 1$. 成立。随后，x方向的电场分量通过处理离散高斯定律（3.6）进行更新。对于 $j = 0$、$\cdots$、$N_y - 1$，计算如下

$$\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j} E_{i+\frac{1}{2},j} = \varepsilon_{i-\frac{1}{2},j} E_{i-\frac{1}{2},j} + \Delta x(\rho_{i,j}^h - \bar{\rho}_j), \quad i = 1, \cdots, N_x - 1, \tag{3.9}$$

其中 $E_{\frac{1}{2},\ j} = 0$， $j = 0$，$\cdots$，$N_y - 1$. 至关重要的是，通过依次应用 $\mathbb{E}^{(0)}$（3.8）和（3.9）构造的离散电场保证满足离散高斯定律（3.6），从而符合算法的初始要求。

局部算法的下一步是迭代更新电场，以最小化满足高斯定律约束的离散能量泛函 $\mathcal{F}^h$ （3.7）。这种最小化可确保电场无旋，从而与泊松方程的精确解一致。需要强调的是，局部算法通过专门设计的电场数值更新格式，自然且严格地保持高斯定律。对$\mathcal{F}^h$ 的最小化通过对每个计算单元内的离散电场进行局部更新 [25, 26] 来实现，因此我们称之为单网格松弛方法。从初始场 $\mathbb{E}^{(0)}$开始，沿每个网格单元的四条边引入旋转通量 η 来更新电场，如图 1所示。值得注意的是，同一网格单元的四条边均匀采用相同的通量 η ——这是为严格保持离散高斯定律而施加的一项特定设计约束。具体过程如下：

$$
\begin{aligned}
E_{i,j+\frac{1}{2}} &\leftarrow E_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\eta}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}\Delta x}, \\
E_{i+1,j+\frac{1}{2}} &\leftarrow E_{i+1,j+\frac{1}{2}} + \frac{\eta}{\varepsilon_{i+1,j+\frac{1}{2}}\Delta x}, \\
E_{i+\frac{1}{2},j} &\leftarrow E_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\eta}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}\Delta y}, \\
E_{i+\frac{1}{2},j+1} &\leftarrow E_{i+\frac{1}{2},j+1} - \frac{\eta}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j+1}\Delta y}.
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$



Figu图 1：单个网格单元上电场更新的示意图（i,j），包含通量 η.

可以简单证明，在这个更新网格单元的四个节点处定义的离散高斯定律（3.6）仍然严格成立。采用此更新后，能量变化为

$$
\begin{aligned}
\delta\mathcal{F}^h[\eta] =& \frac{\eta^2}{2}\left[\frac{\Delta x}{\Delta y}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} + \frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j+1}}\right) + \frac{\Delta y}{\Delta x}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{\varepsilon_{i+1,j+\frac{1}{2}}}\right)\right] \\
&+ \eta\left[\Delta x\left(E_{i+\frac{1}{2},j} - E_{i+\frac{1}{2},j+1}\right) + \Delta y\left(E_{i+1,j+\frac{1}{2}} - E_{i,j+\frac{1}{2}}\right)\right].
\end{aligned}
\tag{3.11}
$$

这是关于 η 的二次型，因此当.....时可以精确求得其最小值

$$\eta = -\frac{\Delta y(\Delta x)^2\left(E_{i+\frac{1}{2},j} - E_{i+\frac{1}{2},j+1}\right) + \Delta x(\Delta y)^2\left(E_{i+1,j+\frac{1}{2}} - E_{i,j+\frac{1}{2}}\right)}{(\Delta x)^2\left(\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} + \frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j+1}}\right) + (\Delta y)^2\left(\frac{1}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{\varepsilon_{i+1,j+\frac{1}{2}}}\right)}. \tag{3.12}$$

该公式给出了电场变化时的最优通量。这种局部更新会遍历所有离散网格单元，并持续迭代更新，直至满足停止条件。

单网格更新不足以 [21]确保蒙特卡罗模拟采样的遍历性。它可能无法使静电能（3.7）达到最小值 [22]。为解决这一问题，引入了线移位更新 [18, 22]，其原理是确保流入离散节点的通量等于流出该节点的通量。这种设计能够严格保持离散高斯定律，同时通过能量最小化计算得出最优通量值。具体而言，对于 x方向，通量为 j的第 x 条线上的电场更新为 η_x 是

$$E_{i+\frac{1}{2},j} \leftarrow E_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\eta_x}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}, \qquad i = 0, 1, ..., N_x - 1. \tag{3.13}$$

此次更新后的能量变化为

$$\delta\mathcal{F}^h[\eta_x] = \Delta x\Delta y\left[\frac{\eta_x^2}{2}\left(\sum_{i=0}^{N_x-1}\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}\right) + \eta_x\left(\sum_{i=0}^{N_x-1}E_{i+\frac{1}{2},j}\right)\right]. \tag{3.14}$$

当时，能量达到最小值

$$\eta_x = -\sum_{i=0}^{N_x-1}E_{i+\frac{1}{2},j}\Bigg/\sum_{i=0}^{N_x-1}\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}. \tag{3.15}$$

类似地，对于 y方向，通量为η_y 的第 i条 y 线上的更新过程为

$$E_{i,j+\frac{1}{2}} \leftarrow E_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\eta_y}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}, \qquad j = 0, 1, ..., N_y - 1. \tag{3.16}$$

最优通量 η_y 为

$$\eta_y = -\sum_{j=0}^{N_y-1}E_{i,j+\frac{1}{2}}\Bigg/\sum_{j=0}^{N_y-1}\frac{1}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}. \tag{3.17}$$

总而言之，局部算法的第一步是构造一个严格满足离散高斯定律的初始电场。接下来，通过最小化静电能泛函，使电场构型达到无旋状态，同时在整个过程中严格保持离散高斯定律。采用单网格松弛的局部算法概述于算法1。

算法 1 单网格松弛局部算法

步骤 1. 初始化场 $\mathbb{E}^{(0)}$，使其满足离散高斯定律（3.6）。设置 $m = 0$。

步骤 2. 无旋弛豫 $\mathbb{E} := \mathbb{E}^{(m)}$。
更新 $\mathbb{E}$，通过式（3.10）遍历每个网格单元。
更新 $\mathbb{E}$，通过线移位，依据式（3.13）和（3.16）。

步骤 3. 终止检查：
如果 $\delta\mathcal{F}^h < \varepsilon_{tol}$ **则**
    stop
否则
    置 $\mathbb{E}^{(m+1)} = \mathbb{E}$、 $m \leftarrow m + 1$。
    转到步骤 2
结束如果

注 1。 对于非周期边界，我们采用镜像电荷法 *(ICM)* *[23]* 处理诺伊曼条件和狄利克雷条件。通过将系统映射为等效的周期构型，随后即可使用本文提出的局部方法计算电场。

3.3 层次网格松弛

单网格松弛按顺序更新最细计算网格中每个网格单元的电场。然而，这种方法的一个关键局限是，旋转误差的衰减速度很慢，尤其是对于低频误差分量，从而限制了静电能最小化的效率。回顾一下，此类局部算法的核心原则是设计专门的更新通量，以尽可能快速地降低静电能，同时始终严格保持离散高斯定律。事实上，若不考虑无旋条件（2.2b），方程（2.2a）的通解可表示为

$$\varepsilon \boldsymbol{E} = -\varepsilon \nabla \phi + \nabla \times \mathbf{Q},$$

其中 ϕ 满足 $-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) = \rho$，且 $\mathbf{Q}$ 是旋转自由度。根据 $\boldsymbol{E}$的两个分量的正交性，静电能（2.3）可写为

$$\mathcal{F}_{\text{pot}}[\boldsymbol{E}] := \int_{\Omega} \frac{\varepsilon}{2} [(\nabla \phi)^2 + (\nabla \times \mathbf{Q})^2] d\boldsymbol{x}.$$

由此可见，局部算法实质上保持梯度项（即高斯定律）不变，而能量最小化等价于旋转项相关能量的最小化。受几何多重网格方法的启发 [14, 28], ——这是一种成熟的技术，通过利用具有不同空间尺度的层次计算网格加速线性系统的迭代求解——我们提出了一种将多层次结构融入该框架的 HLR 方法。这一创新设计有望在保持局部算法原则的同时，有效加速旋转自由度在整个计算区域中的传播。

在 HLR 中，计算区域 Ω 被划分为跨越多个细化层级的一组嵌套网格块 L_k， $k = 1, \ldots\ldots, M$，其中 L_1 表示最粗层级， L_M 表示

最细层级。具体而言，层级 L_k 上的网格划分定义如下：

$$\Omega = \bigcup_{m,n=1}^{2^k} \Omega_{m,n}^{(k)},$$

其中 $\Omega_{m,n}^{(k)}$ 表示细化层级 L_k 上第 (m,n) 个网格块，每个层级 L_k 的网格块被划分为 2×2 个子块，从而构成层级 L_{k+1} 的网格（即 $\Omega_{m,n}^{(k)} = \cup_{a,b=1}^{2}\Omega_{2m-a,2n-b}^{(k+1)}$）。注意，若在 x 和 y 坐标方向上采用相同的分辨率，$2^M = N_x = N_y$。

基于这种分层网格结构，我们在局部算法框架内提出了两种 HLR 方法：前向 HLR 和之字形 HLR，如图 2 (a) 所示，此处展示的是一次迭代。与单网格松弛方法不同，后者的无旋弛豫仅限于最细网格（L_M），而 HLR 方法将无旋弛豫从单个最细网格单元转移到不同层级的网格块上。对任意网格块 $\Omega_{m,n}^{(k)}$ 执行更新，意味着在该块所覆盖的网格节点上，以相应的分辨率执行局部过程。

前向 HLR方法沿着严格按顺序、逐层更新的路径，从粗尺度网格推进至细尺度网格。从最粗网格层级 L_1（例如，初始的 2×2 块网格）开始，算法先完成当前粗层级上的场更新，然后向前推进至下一更细的层级 L_2，且不会回退。完成 L_2上的更新后，算法直接转到更细的层级 L_3，并重复这一过程，直至到达最细网格层级 $L_{\max}$。这一策略遵循单向渐进路径：

$$L_1 \to L_2 \to \cdots \to L_M.$$

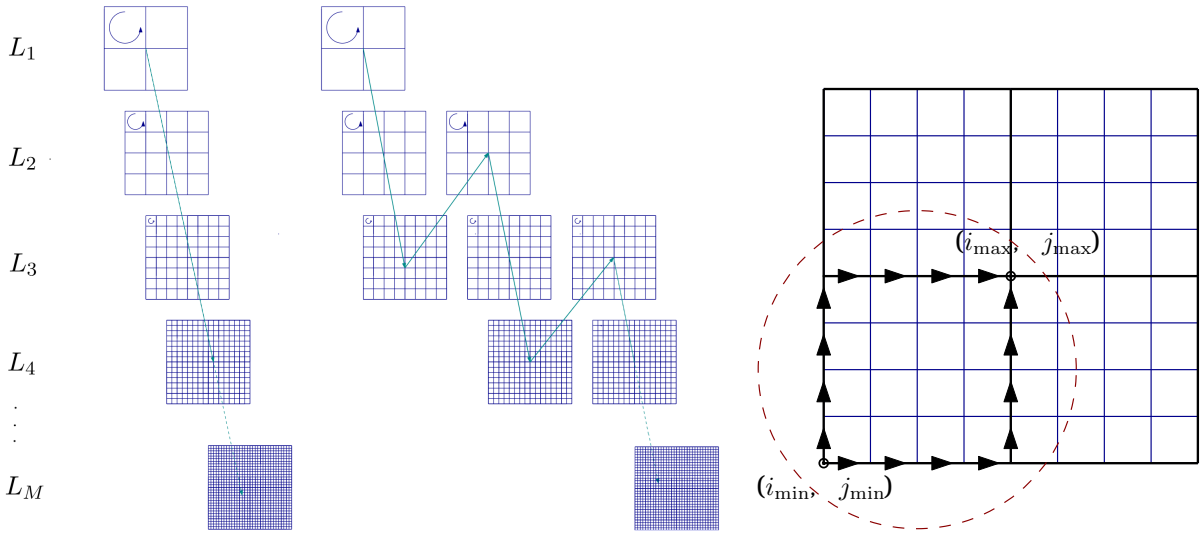
整个过程中都不会回访较粗层级，也不会对其进行校正。

相比之下，之字形 HLR 方案采用往复回溯更新路径，反复从粗层级前进至细层级，再返回粗层级并再次向细层级推进，形成跨越各网格层级的之字形轨迹。在更新最粗层级 L_1 并细化至更细的层级 L_2 和 L_3后，算法会有意回访较粗的层级 L_2，根据细尺度信息进行二次校正。随后，算法再次细化至 L_3 并继续向L_4推进，在各中间层级也进行类似的往返校正。其典型路径可概括如下：

$$L_1 \to L_2 \to L_3 \to L_2 \to L_3 \to L_4 \to \cdots \to L_M.$$

这种之字形回溯能够在粗网格和细网格之间实现双向信息交换，而不是采用正向方案中的单向传播。

粗网格上的局部无旋松弛过程与上一节所述的最细网格上的过程类似。在层级 L_k，对网格块 $\Omega_{m,n}^{(k)}$，$m,n = 1,\cdots,2^k$ 执行无旋弛豫；每个网格块都由全局最细网格索引系统中的左下角坐标 $(i_{\min}, j_{\min}) = \left(2^{M-k}(m-1)\ 2^{M-k}(n-1)\right)$ 和右上角坐标 $(i_{\max}, j_{\max}) = (2^{M-k}m, 2^{M-k}n)$ 唯一确定。对于任意给定的网格块 $\Omega_{m,n}^{(k)}$，$m,n = 1,\cdots,2^k$，仅对定义在网格块边界边上的所有电场分量应用无旋弛豫更新，并采用前文提出的相同基于旋转通量的策略。如图 2 (b) 所示，对于左下角坐标为 $(i_{\min}, j_{\min})$、右上角坐标为 $(i_{\max}, j_{\max})$ 的网格块，更新过程如下：



(a) (b)

图2：(a) 分层网格上弛豫的示意图，左侧为正向 HLR，右侧为之字形 HLR。(b) 覆盖多个最细单元的粗网格块上电场更新的示意图。

$$
\begin{aligned}
E_{i_{\min},j+\frac{1}{2}} &\leftarrow E_{i_{\min},j+\frac{1}{2}} - \frac{\eta}{\varepsilon_{i_{\min},j+\frac{1}{2}}\Delta x}, \quad j_{\min} \le j < j_{\max}, \\
E_{i_{\max},j+\frac{1}{2}} &\leftarrow E_{i_{\max},j+\frac{1}{2}} + \frac{\eta}{\varepsilon_{i_{\max},j+\frac{1}{2}}\Delta x}, \quad j_{\min} \le j < j_{\max}, \\
E_{i+\frac{1}{2},j_{\min}} &\leftarrow E_{i+\frac{1}{2},j_{\min}} + \frac{\eta}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\min}}\Delta y}, \quad i_{\min} \le i < i_{\max}, \\
E_{i+\frac{1}{2},j_{\max}} &\leftarrow E_{i+\frac{1}{2},j_{\max}} - \frac{\eta}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\max}}\Delta y}, \quad i_{\min} \le i < i_{\max}.
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

此更新保持该网格块边界上所有网格所定义的离散高斯定律。同样，电位移更新后的能量变化为

$$
\begin{aligned}
\delta\mathcal{F}^h[\eta] =& \frac{\eta^2}{2}\left[\frac{\Delta x}{\Delta y}\sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}-1}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\min}}}+\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\max}}}\right)+\frac{\Delta y}{\Delta x}\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}-1}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i_{\min},j+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{\varepsilon_{i_{\max},j+\frac{1}{2}}}\right)\right] \\
&+\eta\left[\Delta x\sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}-1}\left(E_{i+\frac{1}{2},j_{\min}}-E_{i+\frac{1}{2},j_{\max}}\right)+\Delta y\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}-1}\left(E_{i_{\max},j+\frac{1}{2}}-E_{i_{\min},j+\frac{1}{2}}\right)\right].
\end{aligned}
\tag{3.19}
$$

能量变化的最大化给出 η的精确解：

$$
\eta = -\frac{\Delta y(\Delta x)^2\sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}-1}\left(E_{i+\frac{1}{2},j_{\min}}-E_{i+\frac{1}{2},j_{\max}}\right)+\Delta x(\Delta y)^2\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}-1}\left(E_{i_{\max},j+\frac{1}{2}}-E_{i_{\min},j+\frac{1}{2}}\right)}{(\Delta x)^2\sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}-1}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\min}}}+\frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j_{\max}}}\right)+(\Delta y)^2\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}-1}\left(\frac{1}{\varepsilon_{i_{\min},j+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{\varepsilon_{i_{\max},j+\frac{1}{2}}}\right)}.
\tag{3.20}
$$

采用 HLR 方法的局部算法总结见算法 2。

算法 2 HLR 方法的局部算法。1: **步骤 1**。 初始化位移 $\mathbb{E}^{(0)}$ ，使其满足离散高斯定律 (3.6)。设定 $m=0$.

2：步骤 2。**无旋弛豫** $\mathbb{E}:=\mathbb{E}^{(m)}$。**正向：3：对于层级：** ~~$L_k=L_1$~~ **至** L_M **，执行 4：对于每个块：** $m,n=1$ **至** 2^k **，执行 5：更新** $\mathbb{E}$ **以通过 (3.18) 和** $\mathbb{E}\leftarrow\mathbb{E}^*$ **得到** $\mathbb{E}^*$ 。**6：结束循环 7：结束循环 之字形：8：对于层级：** $L_\ell=L_1$ **至** L_{M-2} **，执行 9：对于层级：** $L_k=L_\ell$ **至** $L_{\ell+2}$ **，执行 10：对于每个块：** $m,n=1$ **至** 2^k **，执行 11：更新** $\mathbb{E}$ **以通过 (3.18) 和** $\mathbb{E}\leftarrow\mathbb{E}^*$. **得到** $\mathbb{E}^*$ **12：结束循环 13：结束循环 14：结束循环 15：通过 (3.13) 和 (3.16) 的线移位更新** $\mathbb{E}$。**16：步骤 3。终止检查：17：如果** $\delta\mathcal{F}^h<\varepsilon_{tol}$ **，则 18：停止 19：否则 20：设定** $\mathbb{E}^{(m+1)}=\mathbb{E}$, $m\leftarrow m+1$。**21：转到步骤 2 22：结束条件判断**

4 收敛性分析

本节将沿用 [22] 的思路，给出新提出的 HLR 松弛方法的收敛性证明。为方便起见，假设 $L_x=L_y=L$ 且 $N_x=N_y=N=2^M$，使得 $\Delta x=\Delta y=h=L/2^M$。因此，可以记 $h\mathbb{Z}^2=\Delta x\mathbb{Z}\times\Delta y\mathbb{Z}$ 且 $h(\mathbb{Z}+1/2)^2=\Delta x(\mathbb{Z}+1/2)\times\Delta y(\mathbb{Z}+1/2)$。给定 $\varepsilon\in Y_h$ 和 $\rho^h\in\mathring{V}_h$，定义

$$S_{\rho,h}=\{\mathbb{E}\in Y_h:\nabla_h\cdot(\varepsilon\mathbb{E})=\rho^h \text{ on } h\mathbb{Z}^2\}. \tag{4.1}$$

因此，离散静电能（3.7）可视为泛函 $\mathcal{F}^h:S_{\rho,h}\to\mathbb{R}$。引理 4.1 和4.2在 [22], 中得出，它们给出了关于 $\mathcal{F}^h$的极小值点的一些等价条件。

引理 4.1。设 $\varepsilon\in Y_h$ 满足 (2.7)且 $\rho^h\in\mathring{V}_h$。存在唯一极小化元 $\mathbb{E}^h_{min}$ ，它是 $\mathcal{F}^h:S_{\rho,h}\to\mathbb{R}$。对于 $\mathbb{E}\in S_{\rho,h}$, $\mathbb{E}=\mathbb{E}^h_{min}$ 当且仅当：

1. 局部平衡： $\mathbb{E}$ 无旋，即 $\nabla_h\times\mathbb{E}=0$ 在 $h(\mathbb{Z}+1/2)^2$;
2. 总场为零： $\mathscr{A}_h(\mathbb{E})=0$ 在 $\mathbb{R}^2$ 中。

引理 4.2。 设 $\varepsilon \in Y_h$ 满足 (2.7)， $\rho^h \in \mathring{V}_h$ 且 $\mathbb{E} \in S_{\rho,\ h}$。给定 i， $j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$， η_{ij} 由下式给出 (3.12)。则 $\mathbb{E}$ 是无旋的，即 $\nabla_h \times \mathbb{E} = 0$ 在 $h(\mathbb{Z}+1/2)^2$, 当且仅当 $\eta_{ij} = 0$ 对所有i 和 j均成立。

引理 4.3 说明了局部松弛方法的一些性质，这些性质将用于证明第3.3节提出的算法的收敛性。

引理 4.3。 设 $\varepsilon \in Y_h$ 满足(2.7)， $\rho^h \in \mathring{V}_h$ 和 $\mathbb{E} \in S_{\rho,\ h}$。

ˆ1. 给定 $i, j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$。设 $\mathbb{E}$ 由 $\mathbb{E}$ 根据 *(3.10)* 更新，其中 $\eta_{i,j}$ 由 *(3.12)* 给出。ˆˆ则 $\mathbb{E} \in S_{\rho,h}$ 和 $\mathscr{A}_h(\varepsilon\mathbb{E}) = \mathscr{A}_h(\varepsilon\mathbb{E})$。 *ˆ2.* 给定 $i_{\min}, j_{\min}, i_{\max}, j_{\max} \in \{0,1,\ldots,N-1\}$，其中 $i_{\min} < i_{\max}$ 和 $j_{\min} < j_{\max}$。设 $\mathbb{E}$ 由 $\mathbb{E}$ 根据 *(3.18)* 更新，其中 η 由 *(3.20)* 给出。则 $\mathbb{E} \in S_{\rho,h}$ 和 $\mathscr{A}_h(\varepsilon\mathbb{E}) = \mathscr{A}_h(\varepsilon\mathbb{E})$。 *ˆ3.* 对所有 $j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$，设 $\mathbb{E}$ 由 $\mathbb{E}$ 根据 *(3.13)* 更新，其中 η_x 由 *(3.15)* 给出；并对所有 $i \in \{0,1,\ldots,N-1\}$，根据 *(3.16)* 更新，其中 η_y 由 *(3.17)* 给出。则 $\mathbb{E} \in S_{\rho,h}$ 和 $\mathscr{A}_h(\mathbb{E}) = 0$。

证明。 前两项可通过直接代入验证。第三项的证明如下。由于针对不同 j的更新彼此独立，在给定 $j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$固定的情况下，

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{N-1} \hat{E}_{i+\frac{1}{2},j} &= \sum_{i=0}^{N-1} E_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\eta_x}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} E_{i+\frac{1}{2},j} + \eta_x \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} E_{i+\frac{1}{2},j} + \left(- \sum_{i=0}^{N_x-1} E_{i+\frac{1}{2},j} \Big/ \sum_{i=0}^{N_x-1} \frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} \right) \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

因此，

$$\sum_{j=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{N-1} \hat{E}_{i+\frac{1}{2},j} = 0.$$

类似地，根据更新式（3.16），可得

$$\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \hat{E}_{i,j+\frac{1}{2}} = 0.$$

ˆ因此，我们可以直接得到 $\mathscr{A}_h(\mathbb{E}) = 0$ 。 □

根据引理 4.1， $\mathscr{A}_h(\mathbb{E}^h_{min}) = 0$ 是 $\mathbb{E}^h_{min}$ 成为泛函 $\mathcal{F}^h$的极小值点的必要条件。此外，引理 4.3 表明，线移位是对离散电场施加总零场约束的机制。若没有这一步，迭代格式就无法确保极限电场满足总零场条件。因此，线移位至关重要。下面我们在定理 4.1中给出该算法的收敛性分析。

定理 4.1。 设 $\varepsilon \in Y_h$ 满足 （2.7）， $\rho^h \in \mathring{V}_h$ 以及 $\mathbb{E}^h_{min} \in S_{\rho,\ h}$ 由下式的唯一极小化元给出 F^h : $S_{\rho,\ h} \to \mathbb{R}$。设 $\mathbb{E}^{(0)} \in S_{\rho,\ h}$ 和 $\mathbb{E}^{(t)}$ 是由算法 2生成的序列。

1. 如果该序列有限并终止于 $\mathbb{E}^{(m)}$，则 $\mathbb{E}^{(m)} = \mathbb{E}^h_{min}$。

2. 如果该序列是无限的，那么 $\mathbb{E}^{(t)} \to \mathbb{E}^h_{min}$ 在 $h(\mathbb{Z}+1/2)^2$ 上。

证明。 1. 如果该序列是有限的，并以 $\mathbb{E}^{(m)}$ 结束，那么 $\eta_{i,\ j} = 0$ 对所有 $i,\ j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$。因此， $\mathbb{E}^{(m)}$ 由引理 4.2 可知是无旋的，并且 $\mathscr{A}_h(\mathbb{E}^{(m)}) = 0$ 由引理 4.3可知。因此，根据引理$\mathbb{E}^{(m)} = \mathbb{E}^h_{min}$ 4.1，我们可以得到。

2. 给定 $i,\ j \in \{0,1,\ldots,N-1\}$，记 $\eta_i^{(t)}{}_{,\ j}$为（3.12），其中 $\mathbb{E} = \mathbb{E}^{(t)}$。我们声称

$$\lim_{t\to\infty} \eta_{i,j}^{(t)} = 0 \quad \forall i,j \in \{0,1,\ldots N-1\}. \tag{4.2}$$

假设 (4.2) 成立。我们证明$\mathbb{E}^{(t)} \to \mathbb{E}^h_{min}$。只需证明：对于 $\mathbb{E}^{(t)}$ 的任意收敛子序列 $\mathbb{E}^{(t_r)}$，若满足 $\mathbb{E}^{(t_r)} \to \mathbb{E}^{(\infty)}$，则有 $\mathbb{E}^{(\infty)} = \mathbb{E}^h_{min}$。由于函数 $\mathscr{A}_h : Y_h \to \mathbb{R}$ 关于 $\mathbb{E}$连续，我们有 $\mathscr{A}_h(\mathbb{E}^{(\infty)}) = 0$。并且根据假设 (4.2)，$\mathbb{E}^{(\infty)} \in S_\rho$、$h$ 以及 $\eta_i^{(\infty)}$、$_j = 0$。因此，根据引理 4.2，$\mathbb{E}^{(\infty)}$ 是无旋的。于是，根据引理 4.1，$\mathbb{E}^{(\infty)} = \mathbb{E}^h_{min}$。

现在证明命题（4.2）。注意，从 $\mathbb{E}^{(t)}$ 到 $\mathbb{E}^{(t+1)}$ 的迭代由许多轮分层网格更新、单网格更新和线移位更新组成。为方便起见，我们重新定义更新序列。仍从 $\mathbb{E}^{(0)}$开始，$\mathbb{E}^{(t+1)}$ 由 $\mathbb{E}^{(t)}$ 经过一次分层网格更新（3.18）、一次单网格更新（3.10）以及一次线移位更新（3.13）或（3.16）得到。由于原序列是新序列的子序列，我们只需证明命题（4.2）对新序列成立即可。

由于 $\mathcal{F}^h[\mathbb{E}^{(t)}] > 0$随 t增大而减小，极限 $\mathcal{F}^h_\infty := \lim_{t\to\infty} \mathcal{F}^h[\mathbb{E}^{(t)}]$存在。并且两步之间的变化具有如下性质，

$$\lim_{t\to\infty} \delta_t := \lim_{t\to\infty} (\mathcal{F}^h[\mathbb{E}^{(t)}] - \mathcal{F}^h[\mathbb{E}^{(t+1)}]) = 0. \tag{4.3}$$

对于 $\mathbb{E} = \mathbb{E}^{(t)}$，我们仍用（3.12）表示 $\eta_i^{(t)}$、$_j$。令 $\tau < t$ 为在（i，j）处最后一次单网格更新的时刻，$\eta_i^{(\tau)}$、$_j$ 表示该次更新时对应的值，因此有 $\eta_i^{(\tau+1)}$、$_j = 0$。注意，$\eta_i^{(t)}$、$_j$是 $E^{(t)}_{i+\frac{1}{2}}$、$_j$、$E^{(t)}_{i+\frac{1}{2}}$、$_{j+1}$、$E^{(t)}_i$、$_{j+\frac{1}{2}}$和 $E^{(t)}_{i+1}$、$_{j+\frac{1}{2}}$的线性组合，其值由此前的某些更新得到。决定所有这些值的更新有三种情况：第一种情况是在 $\mathbb{E}^{(t')}$ 中某个（m，n）处进行单网格更新（3.10），且 $\tau < t' < t$；第二种情况是在 $\mathbb{E}^{(t')}$ 中某个（$i_{\min}$，$j_{\min}$，$i_{\max}$，$j_{\max}$）处进行分层网格更新（3.18），且 $\tau < t' < t$；最后一种情况是在 $\mathbb{E}^{(t')}$ 中进行线移位更新（3.13）或（3.16），且 $\tau < t' < t$。

考虑第一种情况。记扰动为 $\eta_m^{(t')}{}_{,\ n}$，根据假设（2.7），可得

$$\frac{4}{\varepsilon^2_{max}}[\eta^{(t')}_{m,n}]^2 \le ||\mathbb{E}^{(t'+1)} - \mathbb{E}^{(t')}||^2_h \le \frac{4}{\varepsilon^2_{min}}[\eta^{(t')}_{m,n}]^2,$$

并由（4.3）以及我们有以下事实：$t' \to \infty$ 当 $t \to \infty$，

$$\lim_{t\to\infty} ||\mathbb{E}^{(t'+1)} - \mathbb{E}^{(t')}||^2_h = \lim_{t\to\infty} [\eta^{(t')}_{m,n}]^2 = 0. \tag{4.4}$$

由方程（3.10）可知

$$|E^{(t'+1)}_{i+\frac{1}{2},j} - E^{(t')}_{i+\frac{1}{2},j}| \le \frac{\eta^{(t')}_{m,n}}{\varepsilon_{\min} h}, \tag{4.5}$$

而 $E^{(t')}_{i+\frac{1}{2},j+1}$、$E^{(t')}_{i,j+\frac{1}{2}}$和 $E^{(t')}_{i+1,j+\frac{1}{2}}$均满足与（4.5）中相同的上界。由于单部分更新由（3.12）计算得出，因此有

$$|\eta^{(t'+1)}_{i,j} - \eta^{(t')}_{i,j}| \leq \frac{\varepsilon_{\max}}{\varepsilon_{\min}} \eta^{(t')}_{m,n}. \tag{4.6}$$

结合（4.4），我们得到 $\eta^{(t'+1)}_{i,j} - \eta^{(t')}_{i,j} \to 0$，当 $t \to \infty$ 时。

N接下来考虑第二种情况。记扰动为 $\tilde{\eta}^{(t')}$。类似地，我们有 ave

$$\frac{2(i_{\max}+j_{\max}-i_{\min}-j_{\min})}{\varepsilon^2_{\max}} \leq \frac{||\mathbb{E}^{(t'+1)} - \mathbb{E}^{(t')}||^2_h}{[\tilde{\eta}^{(t')}]^2} \leq \frac{2(i_{\max}+j_{\max}-i_{\min}-j_{\min})}{\varepsilon^2_{\min}}, \tag{4.7}$$

因此

$$\lim_{t\to\infty} ||\mathbb{E}^{(t'+1)} - \mathbb{E}^{(t')}||^2_h = \lim_{t\to\infty} [\tilde{\eta}^{(t')}]^2 = 0.$$

与情况 1 的证明类似，可得 $\eta^{(t'+1)}_{i,j} - \eta^{(t')}_{i,j} \to 0$，当 $t \to \infty$ 时。

最后，考虑情况 3。我们仍有 $||\mathbb{E}^{(t'+1)} - \mathbb{E}^{(t')}||^2_h \to 0$，且 $\eta^{t'}_x \to 0$ ($\eta^{t'}_y \to 0$)，当 $t \to \infty$ 时。与情况 1 和 2 完全类似，$\eta^{(t'+1)}_{i,j} - \eta^{(t')}_{i,j} \to 0$，当 $t \to \infty$ 时成立。

由于 τ 与 t 之间只发生有限次更新，因此 $\eta^{(t)}_{i,j} \to \eta^{(\tau+1)}_{i,j} = 0$，当 $t \to \infty$ 时。至此，算法的收敛性已得到证明。 □

5 数值结果

本节通过数值实验验证所提出算法的准确性和有效性。我们从多个角度比较新提出的 HLR 方法与原始单网格方法，包括准确性、迭代步数和计算时间等指标。

5.1 Acc泊松方程精确解的准确性与比较

考虑具有周期性边界条件的 $\Omega = (0, 4) \times (0, 4)$。对于非均匀介电常数，泊松方程的解析解为

$$\phi(x,y) = \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{2}\right), \quad \text{and} \quad \varepsilon(x,y) = 2 + \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi y}{2}\right), \tag{5.1}$$

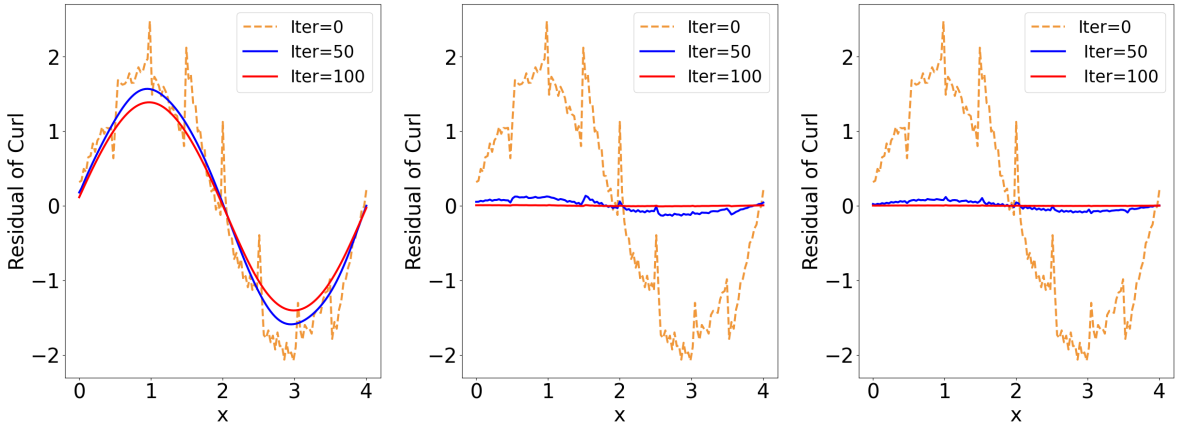
其中，源项 ρ 根据泊松方程 $-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\phi) = \rho$进行解析计算，使得唯一解由（5.1）的第一个方程给出。

在我们的计算中，通过一系列计算网格上的三种不同弛豫方法，采用局部算法求解泊松方程。根据给定的电荷密度分布，首先用相同的步骤初始化电场，使其满足高斯定律。松弛迭代收敛后，L^∞ 计算电场的数值误差。如表1所示，正向和之字形 HLR 方法的收敛阶均为二阶，且与网格点数量 $N_x = N_y = N$ 方面的 L^∞ 误差相关，其收敛行为与单网格更新方法一致。值得注意的是，所得收敛特性与 [22]中报告的结论一致。

N	单一	顺序	正向	顺序	之字形	顺序
32	8.157469E-3	-	8.157469E-3	-	8.157469E-3	-
64	2.051296E-3	1.9916	2.051296E-3	1.9916	2.051296E-3	1.9916
128	5.135733E-4	1.9979	5.135728E-4	1.9979	5.135728E-4	1.9979
256	1.284438E-4	1.9994	1.284400E-4	1.9994	1.284400E-4	1.9994

表 1：三种松弛方法的 L^∞ 误差和收敛阶。

为阐明旋度残差的收敛行为，我们分析其沿 x方向、在横截面 $y = 0.5$上的空间分布。图3比较了三种弛豫方法在 $N = 128$ 下初始阶段以及迭代 50 次和 100 次后的残差分布。单网格松弛虽然能迅速抑制高频残差，但对低频分量的收敛较慢。相比之下，HLR 方法能有效降低较宽空间尺度范围内的残差，从而加快低频误差模态的衰减。此外，之字形 HLR 方法对低频模态的衰减效果始终优于正向 HLR 方法。



(a) 单网格　(b) 正向 HLR　(c) 之字形 HLR

图 3：三种松弛方法在横截面 $y = 0.5$ 处沿 x方向的旋度残差分布。图 (a)–(c) 分别对应单网格松弛、前向 HLR 和之字形 HLR 方法。

5.2 时变泊松方程测试

在大多数电解质传输问题中，电荷浓度会随时间动态演变。这种时间变化要求我们在每个时间步频繁求解泊松方程，以更新电势场。为专注于泊松方程本身的数值求解，我们通过忽略电荷输运的详细动力学过程来简化问题，转而将原始时变系统抽象为一系列相互独立的泊松方程求解。随后，我们应用前述三种松弛方案进行数值求解，并比较它们的性能。

记 $\Omega = (0,4) \times (0,4)$，并采用周期性边界条件。设初始电荷密度分布和均匀介电常数由下式给出

$$\rho(x,y) = 0, \quad \text{and} \quad \varepsilon(x,y) = 1.$$

将第 n 个时间步的电荷密度记为 $\rho^{(n)}$，其由如下迭代给出

$$\rho^{(n+1)} = \rho^{(n)} + \frac{1}{M^{(n)}} \sum_{k=1}^{16} \left[a_k^{(n)} \cos\left(\frac{k\pi x}{2}\right) \sin\left(\frac{k\pi y}{2}\right) + b_k^{(n)} \sin\left(\frac{k\pi x}{2}\right) \cos\left(\frac{k\pi y}{2}\right) \right]. \tag{5.2}$$

对于 $M^{(n)} = 64 \sum_{k=1}^{16} (a_k^{(n)} + b_k^{(n)})$，且 $a_k^{(n)}$，$b_k^{(n)}$ 为在区间 (0，1) 上均匀分布的随机变量。

图 4 展示了三种松弛方法和一种基于 FFT 的求解器每个时间步的平均计算时间随网格点数的变化 N，该平均值是对 100 个时间步计算得出的。在每个时间步中，当容差 ε_{tol} 达到 10^{-7}（左图）和 10^{-9}（右图）时，迭代即终止。结果表明，与单网格方法相比，HLR 方法显著降低了计算成本。对于 $\varepsilon_{tol} = 10^{-7}$，HLR 方法仍可与基于 FFT 的求解器相媲美，在所考虑的空间步长范围内，计算时间约为后者的八倍。由于迭代次数对网格细化的依赖较弱，且算法具有层次结构，整体计算复杂度约为 $\mathcal{O}(N\log N)$。

在空间变化的介电常数情形下，我们将初始电荷密度和介电常数设定为

$$\rho(x, y) = 0, \quad \text{and} \quad \varepsilon(x, y) = 2 + \cos(\frac{\pi x}{2}) \cos(\frac{\pi y}{2}).$$

电荷密度随时间按照与（5.2）中给出的相同规则演化。图5 给出了每个时间步计算时间的平均值作为网格点 N 的函数，对应于非均匀介电常数情形下的三种松弛方法。由于基于 FFT 的方法不适用于非均匀介质，均匀介电常数情形的计算时间以虚线绘出以供比较。可以看出，HLR 方法仍能大幅降低计算成本，并保持类似快速傅里叶变换的计算复杂度。此外，与均匀介电常数情形相比，不会引入额外的计算复杂度。

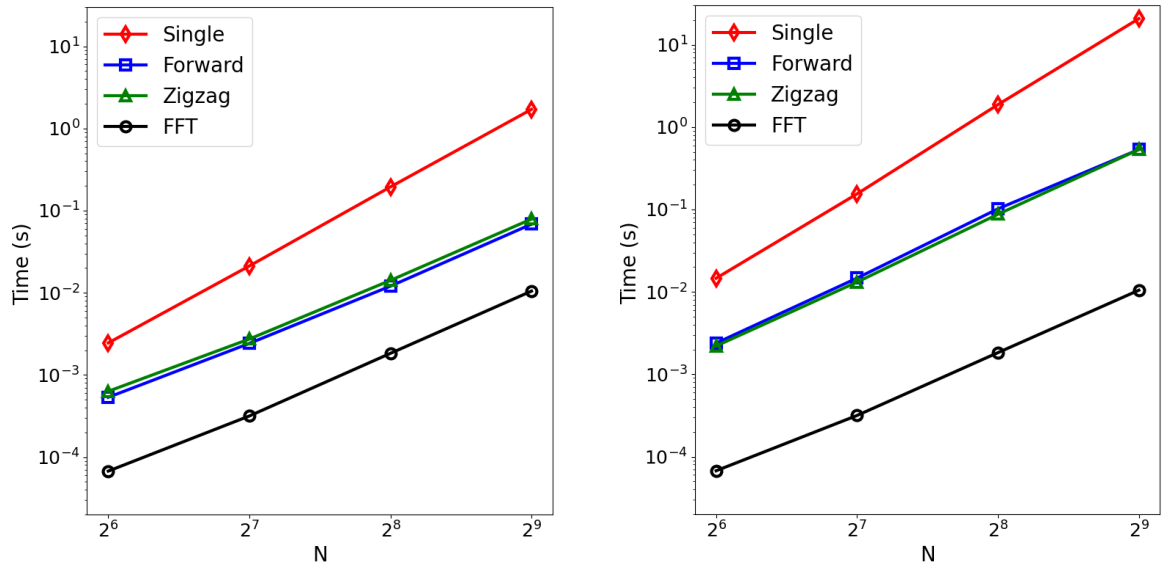


图 4：均匀介电常数情况下，三种松弛方法和一种基于快速傅里叶变换的方法在 100 个时间步上的平均迭代时间与网格点数量的关系。每个时间步的停止容差设为： $\varepsilon_{tol} = 10^{-7}$ （左），$\varepsilon_{tol} = 10^{-9}$ （右）。

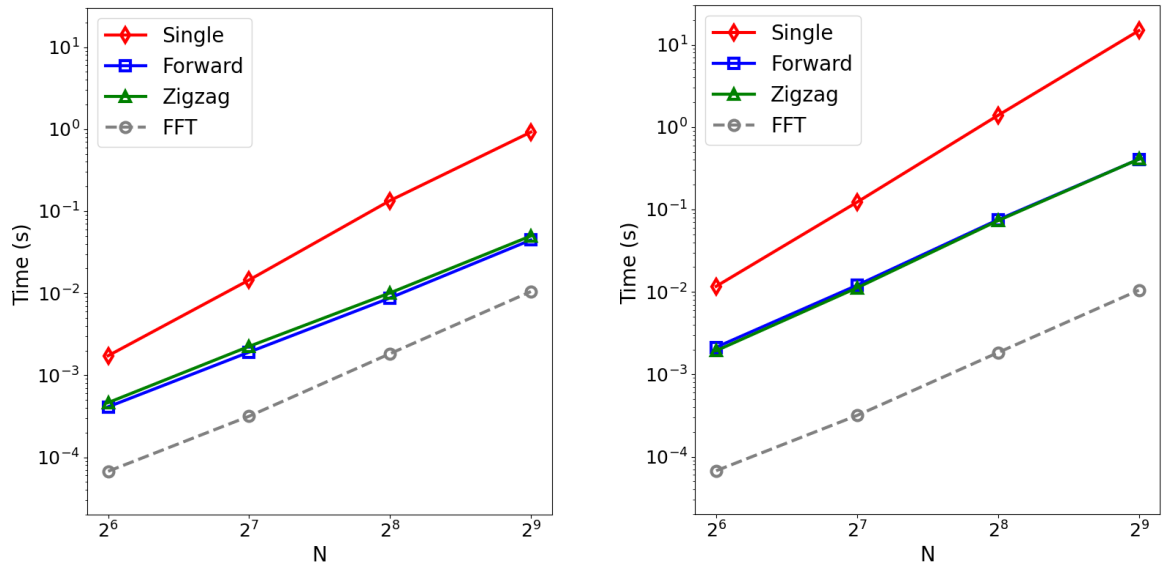


图 5：非均匀介电常数情况下，三种松弛方法在 100 个时间步上的平均迭代时间与网格点数量的关系。 N 每个时间步的停止容差设为： $\varepsilon_{tol} = 10^{-7}$ （左）， $\varepsilon_{tol} = 10^{-9}$ （右）。虚线表示图4中的快速傅里叶变换结果。

5.3 Poisson–Boltzmann方程测试

Poisson–Boltzmann（PB）方程支配热力学平衡下的静电相互作用 [12, 16, 42, 45]。在存在固定电荷密度和空间变化的介电系数时，无量纲PB方程可写为

$$-\nabla\cdot\varepsilon\nabla\phi=\kappa^2\left[\rho^f+\sum_\ell z^\ell\frac{N^\ell\exp(-z^\ell\phi)}{\int_\Omega\exp(-z^\ell\phi)d\boldsymbol{x}}\right].$$

其中 κ 为无量纲参数， ρ^f 为固定电荷密度， N^ℓ 为第ℓ种带电粒子的总数， z^ℓ 为其价数。值得注意的是，求解PB方程可重新表述为约束极小化问题。相应的能量泛函可通过Maggs 型算法 [1, 47], 进行极小化，从而得到一种不仅直观且易于实现、而且无条件稳定的数值格式。对于由 M 种粒子组成的系统，它允许在离散高斯定律和质量守恒约束下极小化如下能量泛函：

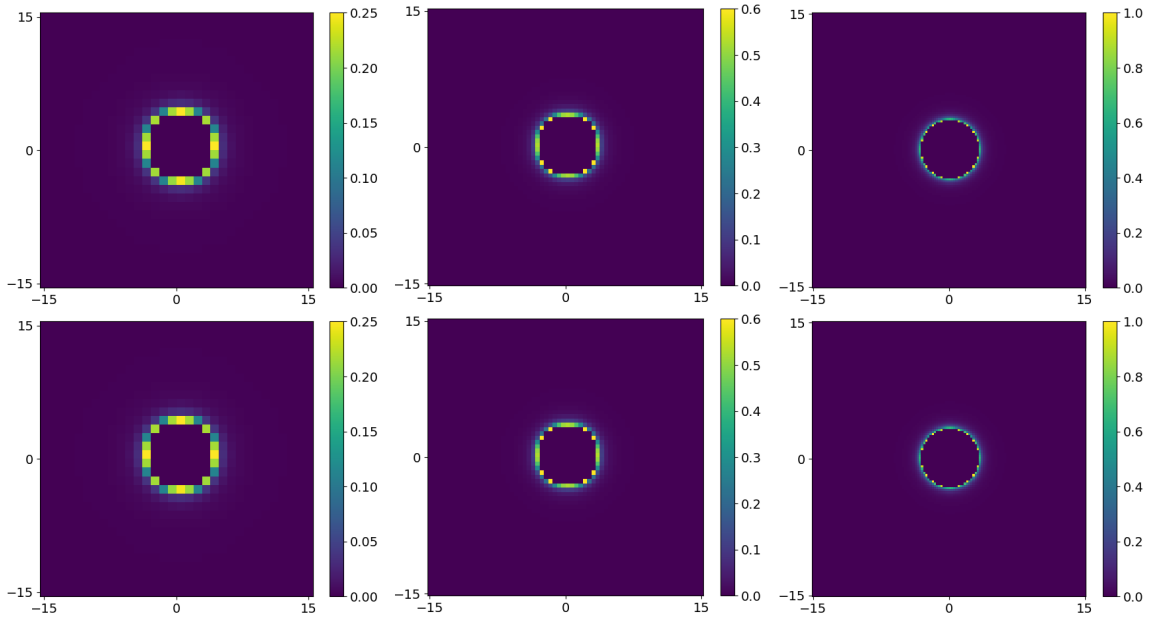
$$\mathcal{F}_{PB}=\int_\Omega\left(\frac{\varepsilon}{2}|\boldsymbol{E}|^2+\sum_{\ell=1}^{M}c^\ell\ln c^\ell\right)d\boldsymbol{x}.$$

用于求解该极小化问题的Maggs 型算法由两个核心迭代步骤组成：对网格中所有最细网格单元进行的场更新，以及对所有相邻可移动网格对执行的浓度更新 [1]。该算法的一个关键特征是，两个更新步骤都严格保持离散高斯定律和质量守恒约束，这对于Poisson–Boltzmann（PB）方程解的物理一致性至关重要。场更新步骤与本文中用于求解标准泊松方程的步骤相同，PB方程所需的唯一附加部分是浓度更新步骤。本文提出的HLR 方法旨在加速Maggs型求解器的收敛性，从而提高PB方程求解的计算效率。

本节给出三维（3D）数值示例，以验证所提出的方法。在数值示例中，我们将 λ_0 记为基本长度尺度，对应于模拟中使用的 Lennard–Jones 直径。一个半径为 $r=3\lambda_0$ 的球形胶体粒子放置在立方模拟盒 $(-\frac{L}{2},\ \frac{L}{2})\times(-\frac{L}{2},\ \frac{L}{2})\times(-\frac{L}{2},\ \frac{L}{2})$ 的中心，并施加周期性边界条件，其中 $L=30\lambda_0$。胶体粒子带有总电荷 $Ze=60e$，且电荷均匀分布于其表面。溶剂中仅含有一种离子种类，即价数为 $z^1=-1$ 的单价反离子。为保持整体电荷中性，初始时在胶体粒子外部区域均匀分布总电荷为 $-Ze$ 的反离子。系统采用空间分辨率不同的三维网格进行离散，$N_x=N_y=N_z=32$，64 和 128。设定迭代停止准则，使得与场更新相关的能量变化低于 $\varepsilon_{tol}=10^{-7}$。随后，使用单网格松弛、前向 HLR 和之字形 HLR 方法最小化静电能泛函，以获得平衡反离子分布。

图 6 展示了平面 $z=0$ 上不同空间分辨率下采用 HLR 方法得到的平衡态反离子浓度横截面图。如预期，由于胶体球带正表面电荷，反离子会聚集在其附近。达到平衡态后，采用前向 HLR 和之字形 HLR 得到的反离子浓度与 [1] 中单网格更新得到的结果几乎相同。

表2 展示了三种更新方法达到平衡态时无旋步骤的计算成本和总运行时间（包括浓度移动）。与



(a) $32 \times 32 \times 32$ (b) $64 \times 64 \times 64$ (c) $128 \times 128 \times 128$

图 6：使用不同离散网格上的 HLR 方法得到的反离子浓度。从上到下各行分别表示前向 HLR 和之字形 HLR 方法。

单网格方法相比，前向 HLR 方法和之字形 HLR 方法均缩短了达到相同平衡分布所需的总计算时间，无旋步骤的改进尤为明显。对于低分辨率网格，之字形 HLR 方法达到平衡态所需的迭代步数并未显著少于前向 HLR 方法。此外，之字形 HLR 方法中的单次局部弛豫涉及的计算操作比前向 HLR 方法更多，因此两种方法的总体计算时间相近。然而，随着网格分辨率提高，之字形 HLR 方法达到平衡态所需的迭代步数明显少于前向 HLR 方法。因此，尽管之字形方案中的无旋弛豫成本略高，之字形 HLR 方法的总计算时间最终仍低于前向 HLR 方法。

N	单网格		正向 HLR		之字形 HLR	
	弛豫	总计	弛豫	总计	弛豫	总计
32	13.3秒	35.1秒	6.7s	21.4秒	7.5s	21.3秒
64	320.4秒	834.7秒	171.9秒	530.4秒	209.4秒	547.7秒
128	6494.7秒	16822.0秒	3767.3秒	11381.7秒	4006.1秒	10262.0秒

表2：单网格方法和 HLR 方法完成整个模拟以及单独进行无旋弛豫所需的计算时间。

5.4 Poisson–Nernst–Planck 方程模拟

泊松–能斯特–普朗克（PNP）方程提供了一个含时的平均场连续介质框架，用于对广泛系统中的离子输运进行建模 [4, 5, 9]，描述离子输

运在电解质溶液中的过程，通过泊松方程与能斯特–普朗克方程的耦合加以描述。然而，经典平均场近似忽略了离子间关联效应。为克服这一局限，已发展出修正的PNP模型，以同时纳入长程库仑相互作用和短程硬球（HS）关联 [24]。此外，可将PNP模型重新表述于麦克斯韦–安`培能斯特–普朗克（MANP）框架 [34]之中，从而在局部算法表述下实现电荷输运建模。在 MANP 框架内，具有 M 离子种类的系统的电荷动力学可由

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c^\ell}{\partial t} = \nabla \cdot \gamma^\ell \left(\nabla c^\ell - z^\ell c^\ell \boldsymbol{E} \right), \quad \ell = 1, 2, \ldots, M, \\ \varepsilon \dfrac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = \displaystyle\sum_{\ell=1}^{M} z^\ell \gamma^\ell \left(\nabla c^\ell - z^\ell c^\ell \boldsymbol{E} \right) + \boldsymbol{\Theta}, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{\Theta} = 0, \\ \nabla \times \boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}, \end{cases}$$

其中， $\gamma^\ell > 0$ 为扩散系数， c^ℓ 为第 ℓ种粒子的浓度， z^ℓ 为其价数。引入 $\boldsymbol{\Theta}$ 作为自由度，以实现 $\nabla \times \boldsymbol{E} = 0$，这意味着在连通空间域中存在满足泊松方程的电势。

考虑一个具有代表性的数值测试案例。所有数值实验均采用与 [34], 相同的参数和设置，具体细节见附录A。研究了粒子浓度的演化过程以及电场在演化过程中的变化。阳离子浓度的快照 c^1 和电场 $|\boldsymbol{E}|$在两个时刻（T = 0.05和2）下，采用三种不同的局部无旋弛豫方法得到的结果如图7所示。可以观察到，对于三种方法，阴离子均在负固定电荷周围受到排斥，随后扩散至其他区域。三种方法呈现出相似的演化模式，证实了HLR方法能够重现预期行为，并且在数值上保持一致。

在 [34] 中已讨论了 $\boldsymbol{\Theta}$ 的选择及其对局部无旋条件效率的影响。这里，我们采用 $\boldsymbol{\Theta}$ 的三种具体形式，其表达式如下：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Theta}_1^n =& 0, \\ \boldsymbol{\Theta}_2^n =& \frac{\varepsilon \boldsymbol{E}^n - \varepsilon \boldsymbol{E}^{n-1}}{\Delta t} + \sum_{\ell=1}^{M} z^\ell \mathbf{J}^{\ell, n-1}, \\ \boldsymbol{\Theta}_3^n =& \frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon \boldsymbol{E}^n - \varepsilon \boldsymbol{E}^{n-1}}{\Delta t} + \sum_{\ell=1}^{M} z^\ell \mathbf{J}^{\ell, n-1} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon \boldsymbol{E}^{n-1} - \varepsilon \boldsymbol{E}^{n-2}}{\Delta t} + \sum_{\ell=1}^{M} z^\ell J^{\ell, n-2} \right), \end{aligned}$$

其中 $\mathbf{J}^{\ell,\ n} = -\gamma^\ell \left(\nabla c^{\ell,\ n+1} - z^\ell c^{\ell,\ n+1} \boldsymbol{E}^n \right)$。令 $N_x = N_y = 256$，表 3 列出了在每个时间步中，为满足停止准则 $\varepsilon_{tol} = 10^{-8}$ 所需的弛豫步数；这些步数对应于不同的 $\boldsymbol{\Theta}$ 选择和更新方法。

可以观察到，当 $\boldsymbol{\Theta}$ 取值为 $\boldsymbol{\Theta}_1$ 和 $\boldsymbol{\Theta}_3$时，结合 HLR 方法的局部算法在每个时间步只需进行少数几轮更新，因此其计算成本显著低于单网格方法。在这些情况下，之字形 HLR 方法的迭代次数与前向 HLR 方法几乎相同，但其单次迭代成本较高，因此总计算时间最长。当 $\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta}_2$时，单网格方法仅在最初几个时间步需要多次迭代，此后每个时间步只需一次迭代

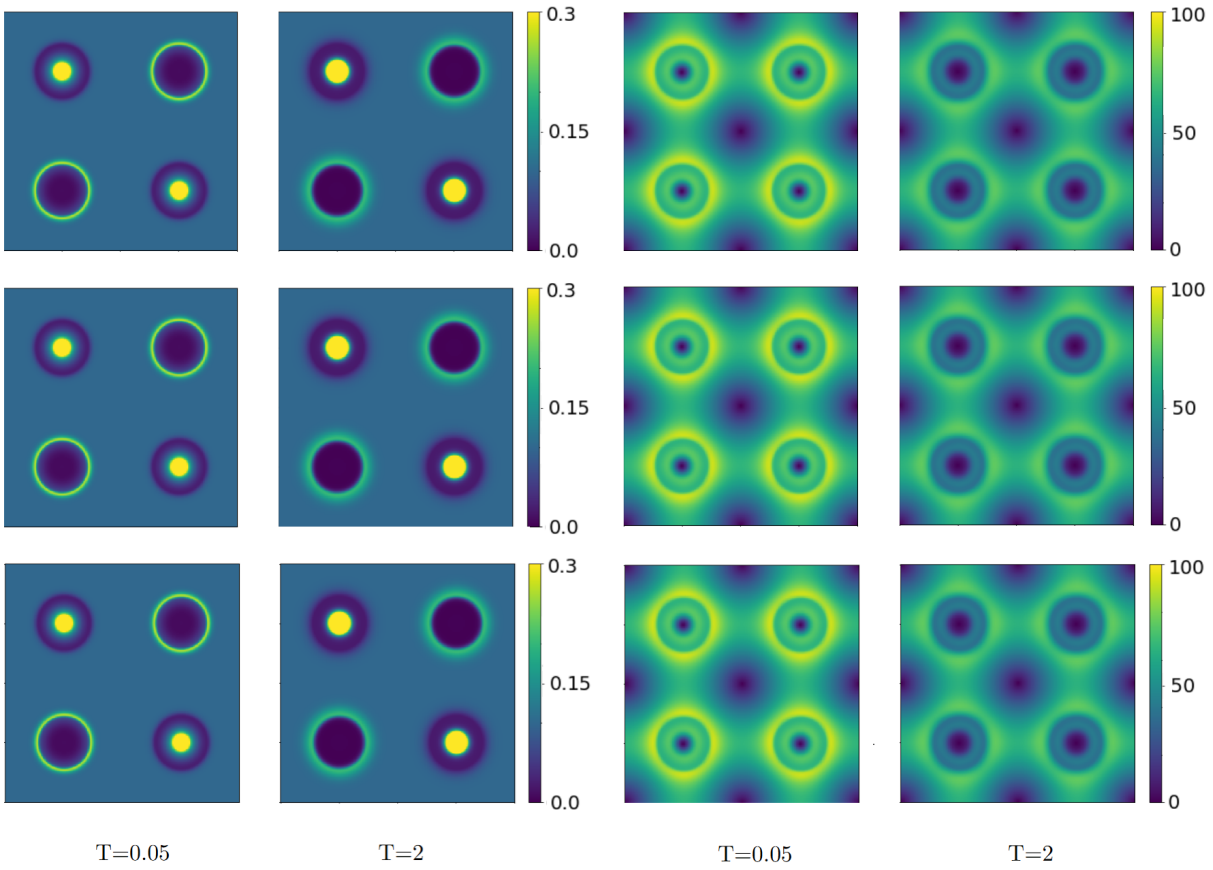


图 7：不同时刻阳离子浓度 c^1 (a) 和电场强度 $|\boldsymbol{E}|$(b} 的快照。从上到下，各行依次对应单网格松弛、正向 HLR 和之字形 HLR。

。同样，HLR 方法平均每步只需一次迭代。因此，单网格方法的总计算时间与前向 HLR 方法相当。由于之字形 HLR 方法的单次局部弛豫成本较高，它仍然是最耗时的方法。

Θ	单网格	正向 HLR	之字形 HLR
Θ_1	0.0516s	0.0116s	0.0151秒
Θ_2	0.0024秒	0.0023秒	0.0036秒
Θ_3	0.0076秒	0.0041秒	0.0043秒

表3：在 Θ取不同值时，正向 HLR、之字形 HLR 和单网格松弛方法每个时间步的平均计算时间。

6 结论

我们提出了一种变分算法，用于求解泊松方程。该算法受到 Maggs 提出的局部算法及其内在动力学性质的启发，由

两个阶段组成。首先，构造满足高斯定律的初始电场，但该电场未必无旋。其次，通过局部弛豫迭代更新电场，逐步降低静电能，直至收敛。单网格弛豫在抑制低频旋度模态方面效果有限，因此我们提出了两种层次方案：前向 HLR 和之字形 HLR 方法。这些层次策略通过有效降低低频误差，显著加快了收敛速度。我们还为所提出的算法建立了严格的收敛性证明，数值实验也证实了多层松弛的高效率。除了泊松方程，所提出的多层无旋松弛方案在更广泛的基于 Maggs 的局部算法中也展现出更快的收敛性；泊松–玻尔兹曼方程的数值测试，以及将 MANP 框架应用于泊松–能斯特–普朗克方程，都证明了这一点。由于采用严格局部更新，所提出的算法非常适合用于基于粒子的模拟中的大规模并行实现。此外，该框架的变分和多层特性也表明，它有望拓展至耦合动理场系统，例如弗拉索夫–泊松方程；我们将在未来的工作中对此进行探索。

致谢

Z. Xu 和 H. Zhou 获国家重点研发计划（项目编号：2024YFA1012403）、国家自然科学基金（项目编号：12325113 和 12426304）以及上海交通大学鲲鹏昇腾卓越中心的资助。Q. Yin 获香港理工大学博士后配对补助计划 4-W425 的部分资助。

数据可用性

如有需要，可提供数据。

声明

利益冲突作者未披露任何利益冲突。

A 数值参数与设置

第 5.4 节中的基准测试采用与 [34] 相同的设置。该系统由二元离子物种组成。固定电荷分布由以下方程定义，

$$\rho^f(x,y) = e^{-100\left[\left(x+\frac{1}{2}\right)^2+\left(y+\frac{1}{2}\right)^2\right]} - e^{-100\left[\left(x+\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2\right]} - e^{-100\left[\left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y+\frac{1}{2}\right)^2\right]} + e^{-100\left[\left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2\right]}.$$

介电常数为

$$\varepsilon(x,y) = \frac{\varepsilon_{\max}-\varepsilon_{\min}}{2}\Big[\tanh(100d-25)+1\Big] + \varepsilon_{\min},$$

其中 d 为

$$d=\begin{cases}\sqrt{\left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2}, & 0<x\le 1,\ 0<y\le 1,\\ \sqrt{\left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y+\frac{1}{2}\right)^2}, & 0<x\le 1,\ -1\le y\le 0,\\ \sqrt{\left(x+\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2}, & -1\le x\le 0,\ 0<y\le 1,\\ \sqrt{\left(x+\frac{1}{2}\right)^2+\left(y+\frac{1}{2}\right)^2}, & -1\le x\le 0,\ -1\le y\le 0.\end{cases}$$

设 $\gamma^{\ell}=0.01$，$z^1=1$，$z^2=-1$，$\varepsilon_{\min}=2\times10^{-4}$，$\varepsilon_{\max}=1.56\times10^{-2}$ 且初始离子浓度为：

$$c^{\ell}(x,y,0)=0.1,\ \ell=1,2.$$

参考文献

[1] M. Baptista、R. Schmitz 和 B. D¨unweg。泊松-玻尔兹曼方程的简单稳健求解器。《物理评论*E*》，80:016705，2009年。[2] A. H. D. Cheng 和 D. T. Cheng。边界元法的传承与早期历史。《工程分析与边界元》，29:268–302，2005年。[3] D. E. Clapham。钙信号传导。网格单元，131:1047–1058，2007年。[4] B. Corry、S. Kuyucak 和 S. Chung。离子通道泊松-玻尔兹曼模型和泊松-能斯特-普朗克模型中的介电自能。《生物物理学杂志》，84:3594–3606，2003年。[5] H. Daiguji、Y. Oka 和 K. Shirono。纳米流体二极管和双极晶体管。《纳米快报》，5:2274–2280，2005年。[6] L. Desiderio、S. Falletta、M. Ferrari 和 L. Scuderi。采用解耦阶次的CVEM-BEM耦合，用于二维外部泊松问题。《科学计算杂志》，92:96，2022年。[7] G. Dhatt、E. Lefran¸cois 和 G. Touzot。有限元法。约翰·威立父子出版公司，2012年。[8] P. Duhamel 和 M. Vetterli。快速傅里叶变换：教程式综述与最新进展。《信号处理》，19:259–299，1990年。[9] B. Eisenberg 和 W. Liu。带有固定电荷的离子通道泊松–能斯特–普朗克系统。《*SIAM*数学分析杂志》，38:1932–1966，2007年。[10] F. Fahrenberger、Z. Xu 和 C. Holm。可变介电常数水溶液中带电胶体周围电双层的模拟。《化学物理学杂志》，141:064902，2014年。[11] H. Feng、G. Long 和 S. Zhao。用于带交错边界的泊松方程的基于快速傅里叶变换的高阶中心差分格式。《科学计算杂志》，86:7，2021年。[12] G. Gouy。电解质表面电荷的构成。《物理学杂志》，9:457–468，1910年。[13] W. S. Hall。边界元法。载于边界元法，第61–83页。施普林格，1994年。[14] P. W. Hemker。多重网格方法简介。《新数学档案》，3:71–101，1981年。

[15] R. W. Hockney 和 J. W. Eastwood。粒子计算机模拟。CRC出版社，2021年。[16] B. Honig 和 A. Nicholls。生物学与化学中的经典静电学。《科学》，268:1144–1149，1995年。[17] A. F. Izmailov 和 M. Solodov。Karush-Kuhn-Tucker系统：正则性条件、误差界与一类牛顿型方法。《数学规划》，95:631–650，2003年。[18] J. Jiang 和 Z. Wang。改进的带电系统局部格点蒙特卡罗模拟。《化学物理学杂志》，148:114105，2018年。[19] H. Kim、L. Chacon 和 G. Lapenta。全隐式粒子网格算法。《美国物理学会通报》，2005年。[20] A. Kirsch 和 F. Hettlich。时谐麦克斯韦方程的数学理论。《应用数学科学》，190:20，2015年。[21] L. Levrel 和 A. C. Maggs。带电格点气体的蒙特卡罗算法。《物理评论E》，72:016715，2005年。[22] B. Li、Q. Yin 和 S. Zhou。泊松静电学和泊松-玻尔兹曼静电学的有限差分近似与局部算法。arXiv预印本 arXiv:2409.15796，2024年。[23] J. Liang、P. Liu 和 Z. Xu。基于调和曲面映射算法的高精度快速泊松求解器。《计算物理通讯》，30:210–226，2021年。[24] M. Ma、Z. Xu 和 L. Zhang。具有库仑关联和硬球关联的修正泊松–能斯特–普朗克模型。《工业与应用数学学会应用数学杂志》，81:1645–1667，2021年。[25] A. C. Maggs。用于模拟库仑相互作用的局部算法动力学。《化学物理学杂志》，117:1975–1981，2002年。[26] A. C. Maggs 和 V. Rossetto。库仑相互作用的局部模拟算法。《物理评论快报》，88:196402，2002年。[27] B. Maury。带孔区域中泊松问题的厚边界法。《科学计算杂志》，16:319–339，2001年。[28] S. F. McCormick。多重网格方法。工业与应用数学学会，1987年。[29] G. Mesa、E. Dobado-Fuentes 和 J. J. S´aenz。场发射二极管静电计算的像电荷法。《应用物理学杂志》，79:39–44，1996年。[30] J. Milaszewicz。改进雅可比迭代和高斯–赛德尔迭代。《线性代数及其应用》，93:161–170，1987年。[31] P. Monk。麦克斯韦方程的有限元方法。牛津大学出版社，2003年。[32] H. J. Nussbaumer。快速傅里叶变换。施普林格，1982年。[33] I. Pasichnyk 和 B. D¨unweg。通过局部动力学实现库仑相互作用：一种分子动力学算法。《物理学杂志：凝聚态物质》，16:S3999，2004年。[34] Z. Qiao、Z. Xu、Q. Yin 和 S. Zhou。用于电荷动力学建模的麦克斯韦–安培能斯特–普朗克框架。《工业与应用数学学会应用数学杂志》，83:374–393，2023年。

[35] Z. Qiao、Z. Xu、Q. Yin 和 S. Zhou。用于 Maxwell-Ampère–Nernst–Planck 模型的保结构数值方法。计算物理学杂志，475:111845，2023年。[36]Z. Qiao、Z. Xu、Q. Yin 和 S. Zhou。内禀局部高斯定律保持PIC方法：用于等离子体模拟的自洽场-粒子更新方案。*arXiv* 预印本 *arXiv:2506.02407*，2025年。[37] J. Rottler 和 A. C. Maggs。用于带电粒子的连续介质 O (N) 蒙特卡罗算法。《化学物理学杂志》，120:3119–3129，2004年。[38] B. Roux。离子通道的理论与计算模型。结构生物学当前观点，12:182–189，2002年。[39] J. W. Ruge 和 K. St¨uben。代数多重网格。载于 多重网格方法，第73–130页。工业与应用数学学会，1987年。[40] T. Sorokina 和 S. Zhang。用于泊松方程的插值Galerkin有限元方法。《科学计算杂志》，92:47，2022年。[41] K. St¨uben。代数多重网格综述。数值分析：*20*世纪的历史发展，第331–359页，2001年。[42] Y. Tu、Q. Pang、H. Yang 和 Z. Xu。基于分层插值分解的线性标度选定求逆：用于二维修正泊松-玻尔兹曼方程自格林函数。计算物理学杂志，461:110893，2022年。[43] F. H. van der Heyden、D. Stein、K. Besteman、S. G. Lemay 和 C. Dekker。通过流动电流研究高离子强度下的电荷反转。《物理评论快报》，96:224502，2006年。[44] E. Waisman 和 J. L. Lebowitz。带电硬球的均匀球模型积分方程 I：求解方法。《化学物理学杂志》，56:3086–3093，1972年。[45] Z. Xu 和 A. C. Maggs。求解涨落增强的泊松–玻尔兹曼方程。计算物理学杂志，275:310–322，2014年。[46] Q. Zheng、D. Chen 和 G. W. Wei。用于离子输运的二阶泊松–能斯特–普朗克求解器。计算物理学杂志，230:5239–5262，2011年。[47] S. Zhou、Z. Wang 和 B. Li。非均匀离子尺寸下离子尺寸效应的平均场描述：一种数值方法。《物理评论*E*》，84:021901，2011年。[48] O. C. Zienkiewicz、R. L. Taylor、P. Nithiarasu 和 J. Z. Zhu。有限元法。爱思唯尔，1977年。