综 述

从毗域动力学到随机跳跃过程: 非局部平衡范例
及非局部微积分框架

献给林群教授 80 华诞

杜强

Department of Applied Physics and Applied Mathematics, Columbia University, New York, NY 10027, USA

E-mail: qd2125@columbia.edu

收稿日期: 2014-10-28; 接受日期: 2015-03-11

摘要 非局部效应在自然界随处可见, 对它的系统描述和认识需要突破传统模式的局限来发展新的数学思想和计算方法. 本文从非局部毗域动力学模型和有关随机跳跃过程的非局部扩散模型出发, 探讨非局部的平衡关系及其系统的数学表述, 并用简例来介绍最近发展的非局部向量微积分框架和非局部变分原理中的一些基本概念, 从而说明非局部模型与传统局部模型的关联和不同. 本文还进一步提出渐近兼容 (AC) 的数值离散格式, 为多尺度问题的非局部模型提供稳健的计算模拟方法.

关键词 毗域动力学 随机跳跃过程 Lévy 飞行 非局部扩散 非局部微积分 非局部变分问题 渐近兼容离散格式
MSC (2010) 主题分类 65R20, 74S05, 46N40, 65N99

1 引言

传统的微积分理论和微分方程是我们描述自然现象最常用的数学模型, 在物理学、化学、生物学、工程学、材料、环境、信息和社会中都有大量应用. 几百年来, 它们为我们描述和认识世界提供了便利的工具, 也是培训和教育年轻一代的必修课程 (参见文献 [1]).

随着科学的发展和我们对跨尺度的和含奇性的问题越来越多的重视, 传统的思想方法因为它们的局限性, 在处理一些建模和分析过程中所面临的新挑战的时候, 有时会显得难以胜任. 这就启发我们从新的基本点出发去建立更一般的数学模型和理论框架 (参见文献 [2]). 本文考虑的非局部毗域动力学 (peridynamics, 简称 PD) 模型和有关随机跳跃过程的非局部扩散 (nonlocal diffusion, 简称 ND) 模型与传统的偏微分方程建模方式不同, 他们利用非局部的积分算子构造出更一般的微积分方程作为模型的数学表达形式, 因而称为非局部 (nonlocal) 模型. 非局部模型描述依赖周围 (毗域) 的行为. 与之对照, 对微分方程而言, 通常单凭解在一点的性质就可确定方程是否成立, 因此, 后者被认为是局部 (或本地) 模型. 当积分算子的核函数选择适当时, 局部模型可以形式上从非局部模型得出, 因此, 非局部模型可以看作是偏微分方程的一种推广而非只是被视为一种近似的方式, 它们是对物理现实中的非局部平衡关系的数学表示. 而非局部向量微积分和非局部变分原理恰好是为非局部模型所建立的相应的理论分析框架 (参见文献 [3, 4]).

英文引用格式: Du Q. From peridynamics to stochastic jump process: Illustrations of nonlocal balance laws and nonlocal calculus framework (in Chinese). Sci Sin Math, 2015, 45: 939–952, doi: 10.1360/N012014-00222

非局部效应在自然界随处可见. 有关非局部模型的研究也有很长的历史, 甚至可以说与所谓的局部偏微分方程的研究一样古老. 近年来对多尺度问题研究不断深入, 宏观度量因为对微观变量的约简形成长程的关联, 使得非局部模型往往变为模型简化过程造成的必然后果. 随着计算模拟能力的提高, 多尺度建模和计算越来越得到重视, 这也让非局部模型的运用越来越多, 例如, 在材料和力学建模方面有很多尝试. 推动这些工作的一个重要原因是, 许多传统上局部定义的以偏微分方程为基础的统一模型及相关的数值方法在分析和模拟跨尺度的材料性质和力学行为中所产生的缺陷和断裂等奇异现象时面临极大困难. 或者说, 很关键的一点是, 连续介质模型的经典微积分理论体系不完全适用于描述某些重要物理过程所固有的空间上的不连续性. 非局部模型有望通过空间积分方程的形式避免这一基本矛盾, 通过新的数学描述使得不连续现象和连续过程都可以在一个统一的连续统模型中得以处理.

毗域动力学是非局部力学模型的一个较新的范例, 其原始雏形由 Silling^[5] 在 2000 年提出, 之后又得到进一步推广 (参见文献 [6, 7]). 近年来, PD 模型得到许多学者的关注, 并被成功地应用于不同材料和结构的静力学与动力学模拟以及断裂、破坏和失效分析^[8-11]. 在其数值模拟程序库的开发方面, 在美国 Sandia 国家实验室的推动下也有不少进展 (参见文献 [12, 13]). 关于毗域动力学方向的发展历史和最近进展的详细综述性介绍可以参考最近出版的专著 [14].

毗域动力学方法近年来在国内也受到关注, 力学进展期刊上发表了系统性的介绍工作, 参见文献 [15] (该文将 peridynamics 翻译为近场动力学, 本文采用了毗域二字, 一是它与近场的含义相同, 再者毗域的发音与原文较为贴近). 最近几年中, 毗域动力学在应用数学领域也开始得到关注, 刊登在应用与工业数学学会新闻月刊上的短文 [2] 简要地介绍了近来在 PD 模型数学理论和算法分析方面的一些进展. 毗域动力学的数学理论框架的建立对实际应用和计算模拟都有重要的指导意义. 对毗域动力学的分析和算法研究也推动了如非局部微积分、非局部变分法和渐近兼容格式等新的数学思想的产生. 鉴于文献 [15] 已对毗域动力学的历史背景和应用进行了很好的阐述, 本文选择从数学和计算的角度出发, 着重探讨近来非局部模型的数学理论和数值方法方面的研究, 而不是对材料缺陷和断裂的具体分析.

从数学形式上来说, 定义在常量函数空间上的线性 PD 算子与非局部扩散 (ND) 算子有很相近之处, 而后者与反常扩散、分数阶微分算子和随机跳跃过程密切相关 (参见文献 [16-18]). 例如, 它可以用来描述对应于随机非对称 Lévy 测度的 Lévy- 型过程的非局部主方程, 刻画比对应于正常扩散的 Brown 运动更一般的随机跳跃过程 (参见文献 [19, 20]), 这些随机跳跃过程容许样本路径中的不连续性和跳跃. 一些特殊的非局部扩散算子还可以给出对应于反常扩散的分数阶扩散方程 (参见文献 [16]). 近年来, 关于反常扩散和分数阶扩散模型的数学理论研究也越来越细致 (参见文献 [21-24]). 同时, 非局部算子与在数据挖掘、机器学习和图像处理以及网络分析中引入的扩散映射^[25, 26]、非局部均值^[27, 28] 和图像 Laplace 算子^[29] 也有密切联系. 因此, 本文的讨论有着比毗域动力学更广泛的理论意义和应用背景.

值得一提的是, 这里所考虑的 PD 和 ND 模型都用了由 Silling^[5] 引入的毗域半径 δ . 毗域半径描述了空间非局部作用的影响范围. 当 $\delta \rightarrow 0$, 非局部的影响逐渐消失. 这个极限过程可视为连接非局部方程与局部微分方程的桥梁, 我们可以经过不同形式搭起这一桥梁, 例如, 文献 [30, 31] 采用了适用于光滑函数的 Taylor 展开式法; 文献 [3, 32] 采用了在最小的正则性条件下适用的 Fourier 分析法; 文献 [33-35] 更严格地在有界区域上非局域函数空间的适当的拓扑意义下采用了非局部变分原理的框架. 这些理论研究推动了有稳健性好和鲁棒性强的非局部方程的离散方法, 使之既可适用于非局部方程又能用于其局部极限方程. 这类方法称为渐近兼容 (AC) 格式^[36], 它对模拟和解决多尺度、跨尺度

的问题有很重要的意义. 相应地, 如果我们把 $\delta \rightarrow 0$ 的极限探讨换成 $\delta \rightarrow \infty$, 那么, 这类思想也可以用来探讨带有限范围的非局部模型与由分数阶方程^[20] 所代表的全局或整体 (global) 模型的关系.

本文的结构如下: 第 2 节简单回顾一下毗域动力学模型和相关的非局部模型的一些例子, 然后讨论分析毗域动力学和相关非局部方程的一些数学理论, 着重介绍非局部微积分和非局部变分原理的几个要点; 第 3 节对渐近兼容 (AC) 格式作一个介绍; 最后在 4 节给出小结. 非局部模型及其数学理论的发展有方方面面, 这里的讨论大都是基于我们近期的研究, 因此忽略了对其他工作的全面评述. 由于关注的方面顾及到模型、分析和数值方法, 所以只能以点代面, 简单介绍. 有兴趣的读者可参见文献 [4, 37] 中更详尽的讨论. 我们希望本文既让读者看到非局部模型及其数学理论与传统连续统模型的相似之处, 又展示出非局部问题具有的特色和新的挑战.

本节最后给出本文将要用到的符号和简称. PD: 毗域动力学 peridynamics, δ : 毗域半径, ND: 非局部扩散, PDE: 偏微分方程, $\mathcal{D}^*$: 非局部伸张算子, $\mathfrak{D}^*$: 非局部体应变算子, $\mathfrak{D}_{w_\delta}^*$: 非局部散度算子, $\mathfrak{D}_{w_\delta}$: 非局部梯度算子, Ω : 空间区域, h : 网格尺寸、节点间距, $\mathcal{L}_\delta$: 非局部毗域算子, AC: 渐近兼容, $u_{\delta,h}$: 非局部离散模型数值解, $u_{\delta,0}$: 非局部连续模型的解, $u_{0,0}$: 局部连续模型的解, $u_{0,h}$: 局部离散模型数值解.

2 非局部平衡、非局部微积分和非局部变分原理

连续介质力学中的物理平衡方程经常被表达成偏微分方程系统, 而非局部的 PD 模型则可视为一个通过非局部通量建立的非局部平衡律. 我们以文献 [6] 给出的比原始键式 (bond-based) 的 PD 模型更一般的所谓态式 (state-based) PD 模型为例:

$$\rho \partial_{tt} \mathbf{y}(\mathbf{x}, t) = \int \{ \mathbb{T}[\mathbf{x}] \langle \mathbf{x}' - \mathbf{x} \rangle - \mathbb{T}[\mathbf{x}'] \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}' \rangle \} dV_{\mathbf{x}'} + \mathbf{b}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

这里 $\mathbb{T}[\mathbf{x}] \langle \mathbf{x}' - \mathbf{x} \rangle$ 和 $\mathbb{T}[\mathbf{x}'] \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}' \rangle$ 代表 PD 力态. 如文献 [3] 所示, 对于任何一对空间区域 Ω_1 和 Ω_2 , 我们可以定义相应的非局部通量泛函

$$\mathcal{F}(\Omega_1, \Omega_2) = \int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} \{ \mathbb{T}[\mathbf{x}] \langle \mathbf{x}' - \mathbf{x} \rangle - \mathbb{T}[\mathbf{x}'] \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}' \rangle \} dV_{\mathbf{x}'} dV_{\mathbf{x}}. \quad (2.2)$$

方程 (2.1) 和 (2.2) 中的被积函数关于 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}'$ 是反对称的. 这是一个使得相应的平衡律满足作用与反作用原理的充分必要条件. 非局部通量具有可加性, 也就是说,

$$\mathcal{F}(\Omega_1, \Omega_2) + \mathcal{F}(\Omega_1, \Omega_3) = \mathcal{F}(\Omega_1, \Omega_2 \cup \Omega_3), \quad \forall \Omega_2 \cap \Omega_3 = \emptyset.$$

同时, 它满足交替变号法则:

$$\mathcal{F}(\Omega_1, \Omega_2) = -\mathcal{F}(\Omega_2, \Omega_1), \quad \forall \Omega_1, \Omega_2.$$

非局部通量的引入带动了非局部微积分中相关非局部算子的讨论 (参见文献 [3]). 因为区域 Ω_1 和 Ω_2 不必直接接触, 它拓宽了局部通量的概念. 同时, 通过对运动方程在空间域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 上的积分, 它进而引申出非局部平衡律

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{y}} dV_{\mathbf{x}} = \mathcal{F}(\Omega, \mathbb{R}^n \setminus \Omega) + \int_{\Omega} \mathbf{b} dV_{\mathbf{x}}.$$

因此, PD 模型是利用非局部通量和空间非局部算子来取代局部通量和空间微分而得到的一种非局部平衡方程和连续统模型. 对这一类非局部模型的数学分析试图回答如下的一些基本问题:

(1) 如何建立非局部模型的适定性? 如何为方程的解定义合适的函数空间和拓扑? 如何引入合适的非局部边界条件或约束? 解有什么特定的属性、正则性或奇异行为?

(2) 当毗域半径 δ 趋于零时, 非局部模型的解和它极限意义下的经典偏微分方程的解之间有何关系? 它们相应的数值逼近格式与近似解之间有何关系?

在过去的几年中, 这些问题得到数学界的关注. 相关数学理论的发展也有助于推动材料断裂、非局部扩散和随机跳跃转移过程等相关应用领域的研究. 本文把讨论的重点放在对类似于下面的线性方程回答上述的问题,

$$\rho \partial_{tt} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{C}(\mathbf{x}', \mathbf{x})(\mathbf{u}(\mathbf{x}', t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}' + \mathbf{b}(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

这里 ρ 代表常数密度, $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ 代表外力. 张量 $\mathbf{C}$ 刻画了体系的非局部相互作用. 例如, 键式 PD 模型 $\mathbf{C}$ 是个秩为 1 的张量,

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \omega_\delta[\boldsymbol{\alpha} \otimes \boldsymbol{\alpha}] = \omega_\delta(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \left[\frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^2} \otimes \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^2} \right]. \quad (2.4)$$

上式中的向量 $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = (\mathbf{x}' - \mathbf{x})/|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^2$ 描述的是从 $\mathbf{x}$ 到 $\mathbf{x}'$ 的键的方向, 这就让 (2.3) 中的被积分量代表了一个犹如线性弹簧般的相互作用, 而标量核函数 $\omega_\delta = \omega_\delta(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)$ 刻画了弹簧系数. 对态式 PD 模型^[7], $\mathbf{C}$ 可以由更一般的张量形式给出 (参见文献 [3, 4, 33]).

对非局部扩散过程来说, 经常遇到的例子则由

$$\partial_t u(\mathbf{x}, t) = \int \omega_\delta(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)(u(\mathbf{x}', t) - u(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}' + \mathbf{b}(\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

或其稳态方程给出. 比 (2.5) 更为一般的方程

$$\partial_t u(\mathbf{x}, t) = \int \{\gamma_\delta(\mathbf{x}', \mathbf{x})u(\mathbf{x}', t) - \gamma_\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}')u(\mathbf{x}, t)\} d\mathbf{x}', \quad (2.6)$$

则可以用来描述以 $\gamma(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ 作为跳跃率的跳跃过程^[17, 19, 20]. 一般而言, $\gamma(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ 可分解为关于 $\mathbf{x}'$ 和 $\mathbf{x}$ 的对称部分和反对称部分. 如果把前者看成是非局部的扩散, 那么, 后者则体现了非局部的对流. 对非局部对流扩散方程的兴趣源于许多因素, 例如, 它们可以描述比通常的 Fokker-Planck 微分方程对应的 Brown 运动更一般的随机过程, 容许样本路径中的不连续性和跳跃. 对一些特殊的核函数 ω_δ , (2.5) 可以对应于描述反常扩散的分数阶扩散方程, 或是对应带有非对称 Lévy 测度的 Lévy- 型随机过程的主方程. 而当非局部毗域半径趋于零时或当核函数成为很特殊的在单点定义的奇异测度, 它也可以得到传统的对流扩散方程. 我们注意到对一般的核函数而言, (2.5) 和 (2.6) 里的积分通常应当理解为积分主值 (参见文献 [38]).

我们以一个非局部键式 PD 模型的线性稳态问题为例:

$$-\mathcal{L}_\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.7)$$

这里 Ω 是 $\mathbb{R}^n$ 里的一个有界域, 键式 PD 算子 $\mathcal{L}_\delta$ 的定义为

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= -\mathcal{D}(\omega_\delta \mathcal{G}^*(\mathbf{u})\mathbf{I})(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Omega \cup \Omega_I} \omega_\delta(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \otimes \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{y}, \mathbf{x})(\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) d\mathbf{y} \\ &= \int_{\Omega \cup \Omega_I} \omega_\delta(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|) \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}}{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|} \otimes \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}}{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|} (\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) d\mathbf{y}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

这里 Ω_I 为相互作用域. 在 Ω_I 中或其有非零测度的子集上, 方程的解可受到限制. 这就给出了非局部 (体积) 约束的问题^[16]. 不失一般性, 我们假设 Ω 和 Ω_I 没有除去边界外的交集, 我们用 $\tilde{\Omega} = \Omega \cup \Omega_I$ 表示整个区域. 例如, 如果 Ω_I 是一个空集, 那么, $\mathcal{L}_\delta$ 可以不带任何额外条件地在 $\tilde{\Omega} = \Omega$ 上明确定义. 这种情形可看作是偏微分方程自然边界条件的非局部的版本. 在我们较早的工作中曾人为地给一个非空的 Ω_I 并将在 Ω_I 上的方程象征性地视为非局部的约束, 而在 Ω 上则视为方程, 这样的人为区分在数学上显得多余, 但他们可能给赋予不同的物理含义. 另一方面, 我们可以施加 $u = 0$ 的条件在 Ω_I 上. 这对应的是本质性的约束. 比较常见的形式包括环绕 Ω 宽度是 δ 的带状域:

$$\Omega_I = \Omega_\delta = \{\mathbf{x} \in \Omega^c : \text{dist}(\mathbf{x}, \partial\Omega) < \delta\}.$$

但应当指出 Ω_I 的选取可以非常自由, 图 1 中列出了几种可能.

我们可以考虑较一般的非局部对流扩散时间发展方程 (2.6) 相应的初边值问题以及它所对应的 Markov 过程. 假设 γ_δ 为跳跃率, u_0 为初始状态的概率密度, 那么, (2.6) 就是相应的 Markov 过程概率密度满足的主方程. 特别是, 当 γ_δ 对应了一个有限的 Lévy 测度, 那么, 对应的积分算子就是一个可以通过一个复合 Poisson 过程表示的 Lévy 跳跃过程的生成算子. 当我们考虑有限区域时, 我们可以设定当 $t > 0$ 时, 在 $\Omega_I \subset \Omega_\delta$ 内满足 $u = 0$ 的非局部约束条件,

$$u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_I \subset \Omega_\delta, \quad t > 0.$$

图 1 几种 Ω 和 Ω_I 取法的图示

也就是说, 我们假设 X_t 是在 $X_0 \in \Omega$ 的条件下限制在 Ω 上的过程, 除非 $X_t \in \Omega_I$, 且在此情形, 相应过程被吸收而不重新返回 Ω , 那么, 这个过程的溢出时间由以下随机变量给出:

$$\tau := \inf\{t > 0, X_t \in \Omega_I \mid X_0 \in \Omega\}.$$

非局部方程 (2.6) 和上述的非局部约束条件演绎了随机变量 τ 的概率密度的时空变化. 在 $\delta \in (0, \infty)$, 我们得到一个范围有限的非对称跳跃过程. 我们考虑两种有意义的情形, 首先, 对 $\Omega_d = \Omega_I$ 的特例, 我们得到的是一个对应了非局部齐次 Dirichlet 条件下的主方程的吸收 (absorbed) 过程; 其次, $\Omega_d = \emptyset$ 对应了非局部齐次 Neumann 条件下的主方程的审视 (sensored) 过程. 一般而言, 我们得到的是混合吸收/审视过程的主方程^[17].

有关上述的一些线性问题的适定性研究可参见文献 [3, 16, 17, 22, 23, 30, 32–35, 38–46], 也可参见文献 [4] 给出的粗略介绍. 尽管有很多不同的应用背景, 我们以 PD 或 ND 作为相似的非局部模型的通称. 需要强调的是, 我们把 PD 和 ND 模型作为对实际物理过程更合适和更准确的数学表述, 它们不是对局部模型的近似, 但又可以在一定条件下约化为局部模型. 它们也不是单纯数值的离散方式, 但又能提供新的模式供模拟时运用.

为了系统地表达如 (2.1) 和 (2.5) 之类的 PD 和 ND 方程中所出现的线性算子, 文献 [3] 定义了一些非局部算子作为非局部向量微积分的基石. 例如, 对于 $\mathbb{R}^n$ 中任意两点 $\mathbf{x}'$ 和 $\mathbf{x}$, 非局部算子 $\mathcal{D}$ 的定义是, 对任意双点张量函数 $\psi: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$,

$$(\mathcal{D}\psi)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} (\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \psi(\mathbf{x}', \mathbf{x})) \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}'.$$

其对偶算子 $\mathcal{D}^*$ 为, 对任意函数 $\mathbf{v}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$,

$$(\mathcal{D}^*\mathbf{v})(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\mathbf{v}(\mathbf{x}') - \mathbf{v}(\mathbf{x})) \otimes \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}).$$

$\mathcal{D}$ 与 $\mathcal{D}^*$ 互为对偶表现为

$$\int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot (\mathcal{D}\psi)(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{D}^*\mathbf{v})(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \cdot \psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' d\mathbf{x}.$$

这种对偶性可以看作是 Fubini 定理的一个应用, 如果被积量满足适当的正则性的话. 如果与经典向量微积分相比, 它也可以解释为一个非局部的分部积分公式. 我们看到与经典微积分常用的算子不同, $\mathcal{D}$ 和 $\mathcal{D}^*$ 的定义域内的函数和映射到的函数具有不同数目的变量. 这一点可以通过外形式来理解: 单点函数对应了零阶形式或单纯性的顶点, 而双点函数对应了零阶形式或单纯性两个顶点所构成的边. 我们注意到 $\mathcal{D}^*$ 和 $\text{Tr}(\mathcal{D}^*)$ 对应了线性化的非局部应变 (参见文献 [7, 34]). 文献 [3] 中对给定加权函数 $\mathfrak{w}_\delta$ 定义了给接近原始微分算子定义的加权非局部算子, 例如, 对任意标量函数 $v = v(\mathbf{x})$, 我们有

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}_\delta^* v(\mathbf{x}) &= \text{p.v.} \int_{\mathbb{R}^n} \mathfrak{w}_\delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) (\mathcal{D}^* v)(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &= \text{p.v.} \int_{\mathbb{R}^n} \mathfrak{w}_\delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) (v(\mathbf{x}') - v(\mathbf{x})) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) d\mathbf{x}'. \end{aligned}$$

后者对描述更一般的非局部方程十分关键, 其中积分通常是在主值意义下定义的. 当 $\delta \rightarrow 0$ 时, 对适当的 $\mathfrak{w}_\delta$, $\mathfrak{D}_\delta^*$ 与传统微分算子的定义是一致的 (参见文献 [3]).

有了基本的非局部算子, 我们可以进一步推导与经典微积分相似的结论, 例如,

$$\int_{\Omega} (\mathcal{D}\psi)(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = - \int_{\Omega^c} (\mathcal{D}\psi)(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

可以理解为经典散度定理的非局部版本^[3], 其等式右端的项正好是取代了边界 $\partial\Omega$ 上传统通量形式的一个非局部通量

$$-\mathcal{F}(\Omega^c, \Omega) = -\mathcal{F}(\Omega, \Omega^c).$$

同样, 等式

$$\int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{u}(\mathcal{D}(\underline{\omega}(\mathcal{D}^* \mathbf{v}))) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{D}(\underline{\omega}(\mathcal{D}^* \mathbf{u}))) \mathbf{v} d\mathbf{x} = 0$$

给出了一个非局部 Green 公式.

非局部向量微积分使我们能够重新表述线性 PD 模型, 与局部线性偏微分方程如出一辙. 例如, 给定核函数

$$\underline{\omega}_\delta = \underline{\omega}_\delta(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|),$$

对任意 $\mathbb{R}^n$ 上定义的 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$, $\mathcal{D}$ 与 $\mathcal{D}^*$ 的复合运算给出

$$\mathcal{L}_\delta(\mathbf{u})(\mathbf{x}) = -\mathcal{D}(\underline{\omega}_\delta \mathcal{D}^* \mathbf{u})(\mathbf{x}) = \int \underline{\omega}_\delta(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|)(\mathbf{u}(\mathbf{y}) - \mathbf{u}(\mathbf{x})) d\mathbf{y}.$$

这就是所谓的非局部扩散算子. 我们关注的核函数 $\underline{\omega}_\delta$ 的紧致集都包含在 $|\mathbf{y} - \mathbf{x}| \leq \delta$ 内, $\delta > 0$ 即是毗域半径. 通常我们要求

$$-\mathcal{D}(\underline{\omega}_\delta \mathcal{D}^*) \rightarrow -\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla), \quad \text{如果 } \delta \rightarrow 0,$$

$\mathbf{K}$ 为一个张量系数矩阵. 这是为何 $\mathcal{L}_\delta$ 可看作经典扩散算子的非局部版本.

在非局部微积分的基础上, 我们可以进一步发展非局部微积分来分析非局部的稳态变分问题. 我们考虑下面与 (2.7) 相关的一个非局部约束问题:

$$\begin{cases} -\mathcal{L}_\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, & \forall \mathbf{x} \in \Omega_\delta. \end{cases} \quad (2.9)$$

我们令 $\mathcal{G}^* = \text{Tr}(\mathcal{D}^*)$ ^[3], 相应的能量泛函可定义为

$$E(u) = \int_{\tilde{\Omega}} \int_{\tilde{\Omega}} \frac{1}{2} \underline{\omega}_\delta(|\mathbf{y} - \mathbf{x}|)(\mathcal{G}^* \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y}))^2 d\mathbf{y} d\mathbf{x} - \int_{\tilde{\Omega}} \mathbf{b}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.10)$$

这里提醒大家之前对 $\tilde{\Omega}$ 的定义, 即 $\tilde{\Omega} = \Omega \cup \Omega_I$.

对应 (2.10) 的能量空间 V 包含了具有有限能量的平方可积函数, 它是对应于范数

$$\|\mathbf{u}\|_v = (|\mathbf{u}|_v^2 + \|\mathbf{u}\|_{L^2(\tilde{\Omega})}^2)^{1/2} = \left(\int_{\tilde{\Omega}} \left[\int_{\tilde{\Omega}} \underline{\omega}_\delta(\mathcal{G}^* \mathbf{u})^2 d\mathbf{y} + \mathbf{u}^2 \right] d\mathbf{x} \right)^{1/2}$$

的内积空间. 变分问题的解空间 $V_{c,\delta}$ 是 V 中满足给定制约的函数. 对目前的问题, 我们有

$$V_{c,\delta} = \{\mathbf{u} \in V \mid \mathbf{u} = 0, \text{ 在 } \Omega_\delta \text{ 内}\} \subset V. \quad (2.11)$$

通常我们假定 $\underline{\omega}_\delta$ 满足如下条件:

(1)

$$\underline{\omega}_\delta(r) \geq 0, \quad \forall r \in (0, \delta); \quad (2.12)$$

(2)

$$\text{supp}(\omega_\delta) \subset B_\delta(0), \quad \text{即 } \omega_\delta(r) = 0, \quad \forall r \geq \delta; \quad (2.13)$$

(3)

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\mathbf{x}|^2 \omega_\delta(|\mathbf{x}|) d\mathbf{x} < \infty. \quad (2.14)$$

在这些假设前提下, 我们可以得出 V 是个 Hilbert 空间, 具有 $H^1 \hookrightarrow V \hookrightarrow L^2$ 的连续嵌入. $V_{c,\delta}$ 是 V 的闭子空间, 并在 L^2 中稠密, 且包含 $H_0^1(\Omega)$ (在 Ω_I 上作了零延拓) 内的元素 (参见文献 [33]).

我们因而得出下列非局部变分问题:

$$\min_{\mathbf{u} \in V_{c,\delta}} E(\mathbf{u}),$$

它的解 $\mathbf{u}$ 满足

$$B_\delta(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\tilde{\Omega}} \int_{\tilde{\Omega}} \omega_\delta(\mathcal{G}^* \mathbf{u})(\mathcal{G}^* \mathbf{v}) d\mathbf{y} d\mathbf{x} = (\mathbf{b}, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in V_{c,\delta}. \quad (2.15)$$

类似于传统的变分问题, 我们可以推导所谓的非局部 Poincare 不等式, 存在常数 $c > 0$ 使得对任意 $\mathbf{v} \in V_{c,\delta}$,

$$\int_{\tilde{\Omega}} \int_{\tilde{\Omega}} \omega_\delta(\mathcal{G}^* \mathbf{u})^2 d\mathbf{y} d\mathbf{x} \geq c \|\mathbf{v}\|_{L^2}^2. \quad (2.16)$$

有关细节可参见文献 [3, 16, 32, 38]. 有了这些准备, 我们就可以用标准的步骤验证 (2.15) 的解存在唯一且满足估计 $|\mathbf{u}|_v \leq \|\mathbf{b}\|_*$, 这里 $\|\cdot\|_*$ 为对偶空间 $V_{c,\delta}^*$ 的范数.

以上的结论可以推广到更一般的非局部线性变分问题 (包括对应着各向同性、具有任意 Poisson 比的弹性力学方程的 PD 模型) 和一些非线性问题 (参见文献 [33, 34, 38]). 同时指出, 如果对 ω_δ 有进一步的适当限制, 那么, 当 $\delta \rightarrow 0$ 时, 非局部 Poincare 不等式里的常数 c 可以与 δ 无关, 这样还可以让我们进一步严格地建立非局部问题的局部极限. 细节可参考上述的文献.

3 数值逼近和渐近兼容格式

近年来对求解非局部模型的数值方法的研究有不少工作 (参见文献 [11–13, 16, 18, 35, 36, 47–56]). 这里重点介绍所谓的渐近兼容 (AC) 格式. 这类数值方法的收敛性对不同尺度的 δ 均能得到保证. AC 格式的稳健性对模拟多尺度问题也十分重要. 的确, 很多实际应用都常常要求数值方法既能在 $\delta > 0$ 时很好地求解非局部问题, 又能在 $\delta \rightarrow 0$ 时给出传统局部极限模型的解. 这对求证非局部模型的适用性也有直接帮助, 因为使用非局部模型的人往往会问, 在经典局部模型有效的情形下是否能用非局部模型来重复经典局部模型得到的解?

我们用 h 作为描述网格尺寸大小的参数, 并用图 2 中的图标标出由 h 和 δ 作参数的问题的解, 以便形象地表达我们关心的问题.

沿着图表边界的路径 (标有符号 $\diamond, \heartsuit, \clubsuit, \spadesuit$) 代表了固定一个参数的情形: $\spadesuit$ 路径连接的是局部和非局部模型的解; $\clubsuit$ 路径是数值偏微分方程的典型问题; $\diamond$ 路径保证非局部问题离散格式收敛到非局部模型; $\heartsuit$ 路径则是探讨非局部问题离散格式的局部极限是否是局部模型的一个离散格式. 如果

图 2 $u_\delta, u_\delta^h, u_0^h$ 与 u_0 之间的不同极限和路径

后者的答案是肯定的, 那么, 我们得到了一个可交换图. 这意味着从 u_δ^h 出发, 我们既可以通过标有 $\diamond$ 和 $\spadesuit$ 的路径也可通过标有 $\heartsuit$ 和 $\clubsuit$ 的路径达到 u_0 . 或者说, 无论通过哪个路径都有 $u_\delta^h \rightarrow u_0$, 只要满足 $\delta \rightarrow 0$ 和 $h \rightarrow 0$. 文献 [36] 把这类格式称为渐近兼容 (asymptotically compatible, AC) 格式, 并对一大类含参数的变分问题建立了它的理论框架.

应当指出, AC 格式的本质与数值分析中许多含参数问题的逼近是相通的, 如保渐近性 (AP) 格式和无锁 (locking-free) 格式 [57–59], 只是它们处理的问题与分析框架有所不同.

对渐近兼容 AC 格式的探讨、对非局部问题和多尺度问题的数值模拟程序的开发都有很重要的指导意义. 的确, 文献 [18] 例举了不少常用的格式都不满足渐近兼容性, 如直接由 Riemann 求和进行离散, 或是用分片常数有限元空间 (如果它们是能量空间的子空间). 这一点曾在其他学者给出的算例中也可以看到 (参见文献 [47, 60]).

在建立渐近兼容格式的理论框架时, 我们很自然要求非局部问题的精确解的极限与局部极限的精确解相同. 这个结论对非局部相互作用核函数的选取有一定要求, 参见文献 [33, 34, 36, 38]. 除此之外, 一个很有用的特性是渐近紧嵌入属性: 它保证了任何一个在解空间 $V_{c,\delta}$ 对于 $\delta \rightarrow 0$ 一致有界的序列在 L^2 中是预紧致的, 且极限点是属于 H_0^1 的. 这个结论可以帮助我们得到 u_δ 在 L^2 中收敛至 u_0 . 在此基础上, 我们可以对有限维离散空间和格式进行细致分析, 从而推导出满足渐近兼容格式的条件.

这里将注意力放在非局部线性变分问题的 Galerkin 离散, 它的形式可以很直接地得到.

给定一个 $V_{c,\delta}$ 的子空间 $W_{\delta,h}$: 找一个离散解 $U_\delta^h \in W_{\delta,h}$ 使得

$$B_\delta(u_\delta^h, v^h) = (b, v^h), \quad \forall v^h \in W_{\delta,h}. \quad (3.1)$$

文献 [18] 对基于弱形式的 Galerkin 逼近和基于强形式的差分格式或配置法进行了比较, 探讨了它们之间用于求解非局部问题时的等价性和相似性.

我们需要对 $\{W_{\delta,h}\}$ 做些约定. 首要的条件是, 要保证对每个固定的毗域半径 $\delta \in (0, \delta_0]$, 对于解空间 $V_{c,\delta}$ 中的元素, 当 $h \rightarrow 0$ 时, 我们都应该能找到很好的数值逼近. 其次, 我们关注的是同时有 $h \rightarrow 0$ 和 $\delta \rightarrow 0$ 的极限行为. 具体而言, 我们有如下假设:

(1) 对每个 $\delta \in (0, \delta_0]$, $\{W_{\delta,h}, h \in (0, h_0]\}$ 在解空间 $V_{c,\delta}$ 是稠密的, 也就是说, $\forall v \in V_{c,\delta}$, 我们可以找出一个当 $n \rightarrow \infty$ 时, $h_n \rightarrow 0$ 的序列 $\{v_n \in W_{\delta,h_n}\}$, 使得

$$\|v - v_n\|_v \rightarrow 0, \quad \text{当 } n \rightarrow \infty. \quad (3.2)$$

(2) $\{W_{\delta,h}, \delta \in (0, \delta_0], h \in (0, h_0]\}$ 在 H_0^1 内是渐近稠密的, 亦即 $\forall v \in H_0^1$, 存在一个对应于 $n \rightarrow \infty$ 的序列 $\{v_n \in W_{\delta_n,h_n}\}_{h_n \rightarrow 0, \delta_n \rightarrow 0}$, 使得

$$\|v - v_n\|_{H^1} \rightarrow 0, \quad \text{当 } n \rightarrow \infty. \quad (3.3)$$

值得注意的是, 条件 (1) 是通常函数逼近意义下的标准假设, 以保证对每个取固定毗域半径值的非局部问题都提供良好的近似. 这对大多数的离散空间而言, 都应当可以满足. 相对而言, 条件 (2) 施加了额外限制, 例如, 它排除了选择间断分段常数有限元空间的可能.

根据以上的假设, 一些典型的逼近和收敛结果可以被建立起来. 它们包括对非局部问题的最佳逼近性

$$|u_\delta - u_\delta^h|_v \leq \inf_{v^h \in W_{\delta,h}} |u_\delta - v^h|_v, \quad \text{当 } h \rightarrow 0.$$

这就保证了图 2 中标有 $\diamond$ 的路径的通顺.

文献 [35] 对于一些特殊的非局部变分问题给出了更加细致的先验误差估计, 并得出了在固定的毗域半径下相对于网格尺寸 h 的最优误差阶. 文献 [16] 也有相关的讨论. 与此同时, 满足这些条件的离散方法提供了 AC 格式, 这样, 图 2 中的其他路径在数学上也仍然成立. 特别地, 通过标有 $\heartsuit$ 的路径我们可以得到 AC 格式的局部极限成为局部极限偏微分方程的离散格式.

在文献 [36] 中, 所有含连续分段线性函数的有限元逼近都被证明是 AC 格式. 这意味着, 即使是 δ 以比网格间距 h 还快的速度减少, 我们仍可获取正确的局部极限. 文献 [36] 中的理论分析需要技术性很强的细致推导, 一个直观的解释是, 即使 h 大于 δ , 由于高阶 (大于零阶) 基底函数的引入, 非局部特征仍然在刚度矩阵中得以反映. 更数学化的解释是, 连续分片线性函数提供的空间足够大, 可以给属于局部解空间 (这是指 H^1 空间) 的局部极限提供良好的逼近. 而单靠连续的分段常数函数则不能. 鉴于后者及其对应的差分和配置法在实际问题的模拟中常被用到, 文献 [36] 给予了特别关注, 分析表明, 只要满足 $h = o(\delta)$, 分段常数有限元也可以在 $h \rightarrow 0$ 时给出正确的局部极限.

由于包含了连续分片线性元的高于零阶的有限元是 AC 格式, 而零阶分片常数则要附加网格和水平半径的限制, 我们自然提倡前者对多尺度问题的应用. 需要指出这个建议的出发点不是基于高阶元的高精度, 因为精度提高还依赖于解的光滑性, 而我们想用非局部模型处理的往往是不光滑的解. 的确, 我们看中的是高阶元的收敛性不依赖 δ 的鲁棒性或者说稳健性. 而精度的提高可以从自适应的渠道获得 (参见文献 [49, 51]).

4 总结

本文就毗域动力学 (PD) 模型和非局部扩散 (ND) 模型的数学理论和数值分析作了介绍. 我们没有进行任何细节上的探讨, 也没有提及最一般的模型和对任何具体问题的计算模拟. 本文所强调之处一方面, 指出非局部模型对多尺度问题的普适性和建立相应的新数学框架的必要性; 另一方面, 探讨与传统连续统模型的相似之处, 同时展示非局部问题具有的特色和新的挑战, 以启发我们突破传统的思想局限, 从新的角度去重新思考一些最根本的数学概念和计算模拟方式.

从理论上, 我们简略说明了非局部向量微积分的概念和非局部问题的变分思想. 在数值计算上, 我们提出了 AC 格式的概念, 并指出对多尺度非局部问题, AC 格式允许对网格尺寸和模型参数更灵活地选择, 并提供有效近似的保障. 因此, 它能帮助我们判断和验证特定的数学模型 (连续或离散) 是否对物理现实提供了好的描述, 以及计算代码是否在真实地模拟相应的数学模式. AC 格式的理论还有助于分析其他的数值近似格式, 如基于无网格逼近、再生核空间^[61–64]和光滑粒子流体动力学 (SPH)^[65–67]的方法. AC 格式的思想对非局部问题还有其他不少应用. 例如, 文献 [68] 利用此框架发展了非局部变分问题的非协调离散 Galerkin 离散方法. 它的基本思想是, 将核函数进行截断, 选取截断值作为参数, 并对一些相关文献 (如文献 [23]) 中运用过的具体截断技巧作出了改善. 同样, 如果我们仍然用 δ

作为参数, 但考虑 $\delta \rightarrow \infty$ 的极限, 那么, 我们还可以建立一套利用求解一系列有限的水平半径的非局部问题来近似求解分数阶微分方程的数值方法 (参见文献 [69]).

当然, 尽管近年来对非局部问题的研究取得了不少进展, 但还有许多挑战性的理论和计算问题有待探讨, 如相关的数值积分格式和可扩展解法等. 文献 [51] 给出的后验误差分析在 $\delta \rightarrow 0$ 时也需要修正. 对非线性带奇异解的非局部模型的数学分析和数值分析都还处于起步的阶段^[37]. 非局部模型可以从连续统的层次上引入迎风对流的概念, 从而帮助研究更一般的对流扩散现象^[70]. 对 PD 和 ND 模型研究激发了非局部向量微积分的提出, 但它的数学框架还有许多地方可以完善和改进, 它与传统微积分、分数阶微积分、网格或图上的微积分以及离散微积分都有密切联系, 值得进一步探讨. 同时, 我们也正在试图建立更一般的非局部外微积分和非局部几何的数学框架.

毫无疑问, 文中所涉及的数学模型、分析框架和数值方法还要通过对更多实际问题的求解来体现其科学意义. 从这一点来说, 这里所做的探讨还远远不够. 但可以预见, 由于自然界非局部效应的大量客观存在, 对非局部问题的数学研究和数值模拟在今后会得到更多关注和发展.

致谢 作者诚挚感谢 Max Gunzburger, Rich Lehoucq, Tadele Mengesha, Michael Parks, Stewart Silling, Xiaochuan Tian, Lili Ju, Florin Bobaru, John Foster, Erdogan Madenci, Wing-Kam Liu, Rob Lipton, John Mitchell 等在相关题材方面进行的讨论与合作. 作者还要感谢林群院士二十多年来给予的一贯支持、鼓励和帮助, 林群院士为推广和普及微积分大众化教育所做的大量工作, 无形中引发了作者对进一步发展本文所提的非局部向量微积分的许多思考, 也促动了作者选择这一方向为特辑撰稿. 在中文 TeX 编译过程中, 郑真真博士为作者解答了许多疑问, 也在此致谢.

参考文献

- 1 林群. 微积分让数据说话. 数学教育学报, 2013, 22: 1–3
- 2 Du Q, Lipton R. Peridynamics, fracture, and nonlocal continuum models. SIAM News, 2014, 47: 1–1
- 3 Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R, et al. A nonlocal vector calculus, nonlocal volume-constrained problems, and nonlocal balance laws. Math Models Methods Appl Sci, 2013, 23: 493–540
- 4 Du Q. Nonlocal calculus of variations and well-posedness of peridynamics. In: Handbook of Peridynamic Modeling. London: Chapman and Hall/CRC, 2015
- 5 Silling S. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. J Mech Phys Solids, 2000, 48: 175–209
- 6 Silling S, Epton M, Weckner O, et al. Peridynamic states and constitutive modeling. J Elasticity, 2007, 88: 151–184
- 7 Silling S. Linearized theory of peridynamic states. J Elasticity, 2010, 99: 85–111
- 8 Askari E, Bobaru F, Lehoucq R, et al. Peridynamics for multiscale materials modeling. J Phys: Conf Ser, 2008, 125: 012078
- 9 Kilic B, Madenci E. Coupling of peridynamic theory and the finite element method. J Mech Mater Struct, 2010, 5: 707–733
- 10 Silling S, Weckner O, Askari E, et al. Crack nucleation in a peridynamic solid. Int J Fract, 2010, 162: 219–227
- 11 Silling S, Askari E. A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics. Comput Struct, 2005, 83: 1526–1535
- 12 Parks M, Plimpton S, Lehoucq R, et al. Peridynamics with lammmps: A user guide. Sandia National Laboratory Report, SAND2008-0135. Albuquerque: Sandia National Laboratories, 2008
- 13 Parks M, Littlewood D, Mitchell J, et al. Peridigm users' guide v1.0.0. Sandia National Laboratory Report, SAND2012-7800. Albuquerque: Sandia National Laboratories, 2012
- 14 Florin B, Foster J, Geubelle P, et al. Handbook of Peridynamic Modeling. London: Chapman and Hall/CRC, 2015
- 15 黄丹, 章青, 乔丕忠, 等. 近场动力学方法及其应用. 力学进展, 2010, 40: 448–459
- 16 Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R, et al. Analysis and approximation of nonlocal diffusion problems with volume constraints. SIAM Rev, 2012, 56: 676–696
- 17 Du Q, Huang Z, Lehoucq R. Nonlocal convection-diffusion volume-constrained problems and jump processes. Discrete Contin Dyn Syst Ser B, 2014, 19: 373–389

- 18 Tian X, Du Q. Analysis and comparison of different approximations to nonlocal diffusion and linear peridynamic equations. *SIAM J Numer Anal*, 2013, 51: 3458–3482
- 19 Applebaum D. *Lévy Processes and Stochastic Calculus*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009
- 20 Meerschaert M, Sikorskii A. *Stochastic Models for Fractional Calculus*, vol. 43. Berlin: Walter de Gruyter, 2011
- 21 Caffarelli L, Silvestre L. An extension problem related to the fractional Laplacian. *Commun Partial Differential Equations*, 2007, 32: 1245–1260
- 22 Andreu F, Mazón J M, Rossi J D, et al. *Nonlocal Diffusion Problems*, vol. 165. Mathematical Surveys and Monographs. Providence, RI: Amer Math Soc, 2010
- 23 Guan Q Y, Ma Z M. Boundary problems for fractional Laplacians. *Stoch Dyn*, 2005, 5: 385–424
- 24 Tian X, Gunzburger M, Du Q. Asymptotically compatible approximations of space fractional diffusion equations on bounded domains. Submitted, 2015
- 25 Coifman R R, Lafon S. Diffusion maps. *Appl Comput Harmon Anal Appl*, 2006, 21: 5–30
- 26 Nadler B, Lafon S, Coifman R R, et al. Diffusion maps, spectral clustering and reaction coordinates of dynamical systems. *Appl Comput Harmon Anal*, 2006, 21: 113–127
- 27 Gilboa G, Osher S. Nonlocal operators with applications to image processing. *Multiscale Model Simul*, 2008, 7: 1005–1028
- 28 Lou Y, Zhang X, Osher S, et al. Image recovery via nonlocal operators. *J Sci Comput*, 2010, 42: 185–197
- 29 Belkin M, Niyog P. Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering. *Adv Neural Inf Process Syst*, 2001, 14: 585–591
- 30 Emmrich E, Weckner O. On the well-posedness of the linear peridynamic model and its convergence towards the Navier equation of linear elasticity. *Commun Math Sci*, 2007, 5: 851–864
- 31 Silling S, Lehoucq R. Convergence of peridynamics to classical elasticity theory. *J Elasticity*, 2008, 93: 13–37
- 32 Du Q, Zhou K. Mathematical analysis for the peridynamic nonlocal continuum theory. *Math Model Numer Anal*, 2011, 45: 217–234
- 33 Mengesha T, Du Q. The bond-based peridynamic system with Dirichlet type volume constraint. *Proc Roy Soc Edinburgh Sect A*, 2014, 144: 161–186
- 34 Mengesha T, Du Q. Nonlocal constrained value problems for a linear peridynamic Navier equation. *J Elasticity*, 2014, 116: 27–51
- 35 Zhou K, Du Q. Mathematical and numerical analysis of linear peridynamic models with nonlocal boundary conditions. *SIAM J Numer Anal*, 2010, 48: 1759–1780
- 36 Tian X, Du Q. Asymptotically compatible schemes and applications to robust discretization of nonlocal models. *SIAM J Numer Anal*, 2014, 52: 1641–1665
- 37 Du Q. Local limits and asymptotically compatible discretizations. In: *Handbook of Peridynamic Modeling*. London: Chapman and Hall/CRC, 2015
- 38 Mengesha T, Du Q. Analysis of a scalar nonlocal peridynamic model with a sign changing kernel. *Discrete Contin Dyn Syst Ser B*, 2013, 18: 1415–1437
- 39 Erbay H, Erkip A, Muslu G. The Cauchy problem for a one-dimensional nonlinear elastic peridynamic model. *J Differential Equations*, 2012, 252: 4392–4409
- 40 Du Q, Kamm J, Lehoucq R, et al. A new approach to nonlocal nonlinear conservation laws. *SIAM J Appl Math*, 2012, 72: 464–487
- 41 Emmrich E, Puhst D. Well-posedness of the peridynamic model with Lipschitz continuous pairwise force function. *Commun Math Sci*, 2013, 11: 1039–1049
- 42 Aksoylu B, Parks M. Variational theory and domain decomposition for nonlocal problems. *Appl Math Comput*, 2011, 217: 6498–6515
- 43 Mengesha T, Du Q. Multiscale analysis of linearized peridynamics. *Comm Math Sci*, in press, 2015
- 44 Du Q, Lipton R, Mengesha T. Multiscale analysis of an abstract evolution equation with applications to nonlocal models for heterogeneous media. Submitted, 2015
- 45 Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R, et al. Analysis of the volume-constrained peridynamic Navier equation of linear elasticity. *J Elasticity*, 2013, 113: 193–217
- 46 Felsinger M, Kassmann M, Voigt P. The Dirichlet problem for nonlocal operators. *Math Z*, 2013, 279: 1–31
- 47 Bobaru F, Yang M, Alves L, et al. Convergence, adaptive refinement, and scaling in 1d peridynamics. *Int J Numer Methods Eng*, 2009, 77: 852–877
- 48 Chen X, Gunzburger M. Continuous and discontinuous finite element methods for a peridynamics model of mechanics. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2011, 200: 1237–1250

- 49 Du Q, Tian L, Zhao X. A convergent adaptive finite element algorithm for nonlocal diffusion and peridynamic models. *SIAM J Numer Anal*, 2013, 51: 1211–1234
- 50 Macek R, Silling S. Peridynamics via finite element analysis. *Finite Elem Anal Des*, 2007, 43: 1169–1178
- 51 Du Q, Ju L, Tian L, et al. A posteriori error analysis of finite element method for linear nonlocal diffusion and peridynamic models. *Math Comp*, 2013, 82: 1889–1922
- 52 Aksoylu B, Unlu Z. Conditioning analysis of nonlocal integral operators in fractional Sobolev spaces. *SIAM J Numer Anal*, 2014, 52: 653–677
- 53 Du Q, Tian X. Robust discretization of nonlocal models related to peridynamics. In: *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, vol. 100. Berlin: Springer, 2015, 97–111
- 54 Wang H, Tian H. A fast galerkin method with efficient matrix assembly and storage for a peridynamic model. *J Comput Phys*, 2012, 240: 49–57
- 55 Tian H, Wang H, Wang W. An efficient collocation method for a non-local diffusion model. *Int J Numer Anal Model*, 2013, 10: 815–825
- 56 Wang H, Tian H. A fast and faithful collocation method with efficient matrix assembly for a two-dimensional nonlocal diffusion model. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2014, 273: 19–36
- 57 Arnold D, Brezzi F. Locking-free finite element methods for shells. *Math Comp*, 1997, 66: 1–14
- 58 Jin S. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM J Sci Comput*, 1999, 21: 441–454
- 59 Guermond J L, Kanschat G. Asymptotic analysis of upwind discontinuous Galerkin approximation of the radiative transport equation in the diffusive limit. *SIAM J Numer Anal*, 2010, 48: 53–78
- 60 Bobaru F, Duangpanya M. The peridynamic formulation for transient heat conduction. *Int J Heat Mass Tran*, 2010, 53: 4047–4059
- 61 Chen J, Wu C, Belytschko T. Regularization of material instabilities by meshfree approximations with intrinsic length scales. *Internat J Numer Methods Eng*, 2000, 47: 1303–1322
- 62 Liu W, Chen Y, Jun S, et al. Overview and applications of the reproducing kernel particle methods. *Arch Comput Methods Eng*, 1996, 3: 3–80
- 63 Liu W, Li S, Belytschko T. Moving least-square reproducing kernel methods (i) methodology and convergence. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 1997, 143: 113–154
- 64 Bessa M, Foster J, Belytschko T, et al. A meshfree unification: Reproducing kernel peridynamics. *Comput Mech*, 2014, 53: 1251–1264
- 65 Monaghan J. Smoothed particle hydrodynamics. *Annu Rev Astron Astr*, 1992, 30: 543–574
- 66 Monaghan J. Smoothed particle hydrodynamics. *Rep Progr Phys*, 2005, 68: 1703–1759
- 67 Du Q, Lehoucq R, Tartakovsky A. Integral approximations to classical diffusion and smoothed particle hydrodynamics. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2015, 286: 216–229
- 68 Tian X, Du Q. Nonconforming discontinuous galerkin methods for nonlocal variational problems. *SIAM J Numer Anal*, 2015, 53: 762–781
- 69 Tian X. Theory of asymptotically compatible schemes and its application. Master Thesis. University Park, Pennsylvania: Pennsylvania State University, 2014
- 70 Tian H, Ju L, Du, Q. Nonlocal convection–diffusion problems and finite element approximations. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2015, 289: 60–78

From peridynamics to stochastic jump process: Illustrations of nonlocal balance laws and nonlocal calculus framework

DU Qiang

Abstract Nonlocal effects are ubiquitous in nature. There is a need to go beyond the traditional setup to develop new mathematical insight and computational methods for their systematics study and understanding. In this paper, by working with peridynamic models of nonlocal mechanics and nonlocal diffusion models for stochastic jump processes, we systematically explore the mathematical description of nonlocal balance laws. We use simple examples to introduce the recently developed concepts of nonlocal vector calculus and nonlocal calculus

of variations and to illustrate the connections to traditional local models and the key differences. We also present the notion of asymptotically compatible (AC) discretization schemes as robust numerical algorithms for simulating multiscale problems.

Keywords peridynamics, stochastic jump processes, Lévy flight, nonlocal diffusion, nonlocal vector calculus, nonlocal variational problems, asymptotically compatible discretization

MSC(2010) 65R20, 74S05, 46N40, 65N99

doi: 10.1360/N012014-00222