[研究成果報導]

橢圓偏微分方程在非直角區域之快速算法及應用

交通大學應用數學系 賴明治

一、前言

許多自然科學或工程上面的應用數學問題，常常需要去解一個或一組在二維或三維非直角座標區域上的偏微分方程式，這些區域往往含括圓盤、圓柱、球面、球體，甚或橢圓及橢球區域。譬如，在研究不可壓縮流體在圓柱形水管內的流場問題，數值模擬上便需要去解一組在圓柱形區域的 Navier-Stokes 方程式；在 Rayleigh-Benard convection 的實驗裡，研究人員常用非常薄的圓柱盤來裝流體，由控制上下兩面的溫度差，而形成所謂的 convection roll，進而去研究 defect chaos 的問題。同樣的，在數學上，我們可以經由數值計算去解一組在圓柱盤上的 Boussinesq 方程式，進而去瞭解這些形態生成的物理現象；至於描述大氣物理的淺水方程式，也都是在球表面上考慮的。因此，在解這些問題的過程中，很自然的第一步，便是將這些偏微分方程式以其最方便的座標表示出來。然而經由座標轉換後的新方程式，便有所謂座標奇異點的問題，譬如，在球面上的北極和南極，即是座標奇異點發生的地方。因為他們可以是任意經度，這也使得方程式在這些奇異點上必須重新定義，進而得到所謂的奇異點條件。因此在發展數值方法計算這些座標轉換後的方程時，首先必須面臨如何處理座標奇異點的困難，而這類問題是不會在直角座標系發生的。

求橢圓偏微分方程的數值解，在科學與工程的問題上有很大的實用性。譬如，在解流體力學 Navier-Stokes 方程時的投影法，即需要解有關壓力及速度場的 Poisson 型態方程。因此，發展此類方程有效率的快速算法，一直是科學計算界熱門的研究課題。在直角座標系統下，這類方程的快速及精確算法可謂發展得相當完整。然而，在非直角座標之系統，仍然有一些改進的空間，特別是有關奇異點的處理問題。本文的主旨，即是以淺顯的文字去描述如何用簡單且能保持精確度的技巧去處理奇異點，進而發展出一些在非直角座標區域上的 Poisson 方程的快速算法。

二、Poisson 方程在圓盤及圓柱區域上的快速算法及應用

首先，在二維單位圓盤上的 Poisson 方程式可以極座標的表示如下：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2}=f(r,\theta)\,,\ 0<r<1,\ 0\le\theta<2\pi \text{ 。} \tag{1}$$

上述方程式，必須在 r=1 處賦予其邊界條件(Dirichlet 或 Neumann 或 Robin)才稱完備。如果用傳統的中央差分法[1]去離散(1)式，我們必須在極座標原點上加上一個條件，這個奇異點條件的目的是在提供離散數值在原點所需的邊界值條件。然而，如果我們將離散網格點定義成

$$r_i=(i-\frac{1}{2})\Delta r\,,\ \ \theta_j=(j-1)\Delta\theta\,,\ \ \Delta r=\frac{2}{2M+1}\,,\ \ \Delta\theta=\frac{2\pi}{N} \text{ 。} \tag{2}$$

再應用中央差分法去離散(1)式，我們可以巧妙地發現，最靠近原點的數值邊界值係數為零，因此，在實際運算上並不需要任何奇異點的條件。更好的是，離散後的線性方程組可以直接應用 block cyclic reduction 等快速算法[2]求得其數值解[3]。

另外一種簡單且快速的算法，便是利用快速傅立葉轉換(FFT, Fast Fourier Transform)。首先，我們將解表示成近似傅立葉級數如下

$$u(r,\theta)=\sum_{n=-N/2}^{N/2-1}u_n(r)e^{in\theta} \tag{3}$$

將(3)式代入(1)式中，我們便得到一組傅立葉係數 u_n 所形成的常微分方程組

$$\frac{d^2u_n}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{du_n}{dr}-\frac{n^2}{r^2}u_n=f_n,\ 0<r<1。\qquad(4)$$

用類似(2)的網格點及有限差分法，我們仍就可以得到二階精確且毋需奇異條件的結果[4]。如果，再進一步，我們利用傅立葉係數滿足 $u_n(-r)=(-1)^n u_n(r)$ 的對稱條件，靠近原點的數值邊界值便可由上述條件獲得，運用緊緻差分技巧，我們甚至可以得到高階精確的結果[5]。近來，我們利用所發展出的快速算法，將之應用到解流體 Navier-Stokes 方程在二維圓盤上的問題[6]，以及有界面(interface)的橢圓方程問題[7]。

上述的方法，可將之推廣至二維橢圓[8]及三維圓柱[9]上面。在三維圓柱區域裡，我們仍然將解寫成類似(3)式的展開，並代入 Poisson 方程裡，只是現在的傅立葉係數滿足的是一組偏微分方程式，運用類似(2)的網格點及有限差分法，所得到的三條區塊(Block tridiagonal)的線性方程組，一樣能夠有效率的被解，所以二維圓盤與三維圓柱區域的問題，在本質上是沒有差異的。

此外，(2)式的網格分佈，也可以應用在變係數擴散方程式

$$\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\beta r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\beta}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)\right]=f(r,\theta),\ 0<r<1,$$

$$0\le\theta<2\pi\ 。\qquad(5)$$

在此擴散係數 β 不再是常數。如果，β 只是個 r 的函數，我們仍舊可以將解寫成(3)式，再代入(5)式，而導出類似的傅立葉係數方程式。然而，如果 β 是個 r,θ 的函數，我們可以用二階精確的中央差分法直接去離散(5)式，我們會很驚訝的發現，最靠近原點的數值邊界值係數仍舊爲零，因此，此方法並不需要任何奇異點的條件。

三、Poisson 方程在球面及球體區域上的快速算法及應用

在二維單位球面上的 Poisson 方程可以球座標的表示如下：

$$\frac{1}{\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right)+\frac{1}{\sin^2\varphi}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}=f(\varphi,\theta),$$

$$0\le\varphi\le\pi,\ 0\le\theta<2\pi\ 。\qquad(6)$$

雖然上述方程並不需賦予其邊界值，但爲確保存在性，等式右邊的函數 f 必須滿足下列條件

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}f(\phi,\theta)\sin\phi\, d\phi\, d\theta=0\ 。\qquad(7)$$

從(6)式得知，方程式在 $\phi=0,\pi$ 有座標的奇異點，並分別代表北極和南極。如果用傳統的網格分佈並應用中央差分法去離散(6)式，必須在南、北極各加上一個條件。然而，如果我們避免將離散網格點定義在座標奇異點，而將其分佈在

$$\phi_i=(i-\frac{1}{2})\Delta\phi,\ \theta_j=(j-1)\Delta\theta,\ \Delta\phi=\frac{\pi}{M},$$

$$\Delta\theta=\frac{2\pi}{N},\qquad(8)$$

再配上我們導出的對稱條件 $u(-\varphi,\pi)=u(\varphi,\theta+\pi)$ 和 $u(\pi+\phi,\theta)=u(\pi-\phi,\theta+\pi)$，那麼接近奇異點的有限差分數值邊界值便可解決，而導致的線性方程組，亦可用快速算法求解。

另外一種有效率的算法，便是將(6)式的解寫成有限項的傅立葉級數，

$$u(\phi,\theta)=\sum_{n=-N/2}^{N/2-1}u_n(\varphi)e^{in\theta}\qquad(9)$$

將(9)式代入(6)式中，我們便得到一組傅立葉係數 u_n 所構成的常微分方程組

$$\frac{d^2u_n}{d\varphi^2}+\cot\phi\frac{du_n}{d\phi}-\frac{n^2}{\sin^2\phi}u_n=f_n(\phi),\ 0<\phi<\pi\qquad(10)$$

利用(8)的網格點及傅立葉係數的對稱條件 $u_n(-\varphi)=(-1)^n u_n(\varphi)$, $u_n(\pi+\phi)=(-1)^n u_n(\pi-\phi)$，中央差分法所需靠近奇異點的數值邊界值便可輕易解決，因此，我們可以得到二階及四階精確的結果[4]。上述的簡易技巧，可將之推廣至三維球體[9]及三維橢球區域[10]。不同的是，我們將要解一組傅立葉係數所構成的偏微分方程式，運用類似(8)的網格及有限差分，不僅奇異點問題不復存在，所產生的線性方程組也能有效率的被解。

結　語

在本文中，筆者針對 Poisson 方程在非直角區域上的數值解法提供了一些簡單且有效率的有限差分技巧。運用解的傅立葉級數展開，我們可以將問題的維度降低一維。巧妙地安排離散網格點及善用傅立葉係數的對稱條件，座標奇異點

的困難可以順利地被克服，而且導致的線性方程組也可有快速算法運用其上。筆者目前正將此類算法及技巧，應用在解流體力學 Navier-Stokes 方程及量子力學 Schrodinger 方程上面。

參考資料

[1] J. C. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*, p. 286-287, (1989).

[2] O. Buneman, Rep. 294, Stanford Univ. Institute for Plasma Research (1969).

[3] M.-C. Lai, *Numer. Methods Partial Differential Eq*., **17**, 199, (2001).

[4] M.-C. Lai and W. C. Wang, *Numer. Methods Partial Differential Eq*., **18**, 56, (2002).

[5] M.-C. Lai, *J. Comput. Phys*., **182**, 337, (2002).

[6] M.-C. Lai, *Int. J. Numer Meth. Fluids*, **42**, 909, (2003).

[7] Z. Li, W.-C. Wang, I.-L. Chern and M.-C. Lai, *SIAM. J. Sci. Comput*., **25**, 224, (2003).

[8] M.-C. Lai, *Numer. Methods Partial Differential Eq*., **20**, 72, (2004).

[9] M.-C. Lai, W.-W. Lin and W. Wang, *IMA J. Numer. Anal*., **22**, 537, (2002).

[10] M.-C. Lai, *Contemporary Mathematics*, **329**, (2003).