簡介橢圓界面問題的數值計算

清華大學數學系　王偉成

我們考慮形如

$$\nabla\cdot(k(x)\nabla u(x)) = f(x),\quad x\in\Omega\setminus\Gamma, \tag{1}$$

的橢圓型偏微分方程，其中Ω是歐氏空間中的一個區域，在此區域中另有一個或多個界面Γ，將Ω分割成不相交的子區域（圖一）。其中 $k(x)>0$ 是給定的片斷光滑函數，在Γ上不連續（兩側極限值不相等）。這種不連續性是由不同介質的材料特性所引起的，例如不同材質有不同的密度，導熱性，或是導電性等。而Γ就是各個介質之間的分界面。當考慮材料係數在不同方向上的差異性時(anisotropy)，$k(x)$就是片斷光滑的二階張量。

對於一般的物理問題，(1)式中的 f 是有界的，因此我們可以很容易的推導出 u 以及 $k\dfrac{\partial u}{\partial n}$（其中 $\dfrac{\partial u}{\partial n}$ 是 u 的法向導數）在Γ上是連續的。更一般的情形，我們可以考慮(1)以及給定所謂的界面條件(interface condition)，

$$[u]_\Gamma = g_1(x),\quad x\in\Gamma, \tag{2}$$

$$\left[k\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma = g_2(x),\quad x\in\Gamma, \tag{3}$$

此處$[\cdot]_\Gamma$表示在界面兩側極限值的差。而橢圓界面問題就是給定(1)、(2)及(3)中的f，g_1，g_2 以及 u 在∂Ω上的邊界條件來求解 u。

這類橢圓問題的數值計算較為常見的作法是有限元與有限差分。其中有限元的處理法一般又分兩種。一種作法是特別針對跨過界面的有限元，構造滿足界面條件(2)及(3)的特殊基底函數，由此張出一個有限元空間，再於其上求解。另一種作法是在構造有限元的時候沿著Γ作切割，使得Γ只會通過有限元的邊界而非內部。如此一來，在每個有限元的內部，$k(x)$就沒有不連續點，因而能夠達到理論上的最大精度[2]。

至於有限差分法，因為推導容易，是最常被用於一般偏微分方程的數值方法。然而當我們用直角座標上的均勻網格來計算橢圓界面方程時，大部分的網格點不在界面上，對於鄰近界面的格點而言，其差分格式包含分屬界面兩邊的格點。由於 $k(x)$的不連續性，標準的差分格式在這些點將會喪失精度。即使處理得宜，一般來說最多只能到達一階精度。

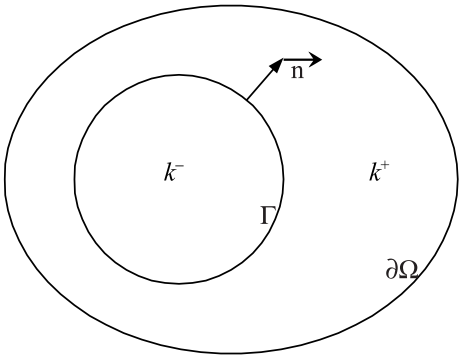
如果要推導更高精度的有限差分格式，大致有兩種作法。一種是將界面附近的格點對著界面上的某個參考點作局部高階泰勒展開，以此推導出界面附近格點的差分格式。這個過程，通常需要把(2)及(3)中的 $g_1(x)$及 $g_2(x)$沿著Γ的切向做數值微分，因此這個差分格式的推導其實是相當繁瑣的。筆者曾在[9]中提出一種新的推導過程，可以不需要求取 $g_1(x)$及 $g_2(x)$的切向導數，並且與座標無關，能夠大幅簡化推導的過程，也可以應用在諸如極座標或球座標上的均勻網格。

除此之外，筆者另於[11]中提出一種新的差分格式，採用平行於界面的曲線座標(ξ^1,ξ^2)，並考慮方程(1)的協變形式(covariant form)，

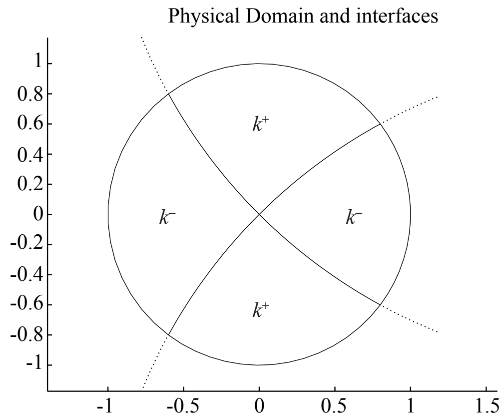
$$\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial\xi^\alpha}\left(k\sqrt{g}\,g^{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial\xi^\beta}\right)=f. \tag{4}$$

經由一個巧妙的座標選取，我們可以推出一種很自然的中間差分格式，其所對應的矩陣保持正定性與對稱性，並且可以把界面條件自動嵌入此差分格式中，不需要再額外的內差或外差處理。有限差分格式的好處之一是它可以較為容易的處理標準與非標準的邊界條件（如 Dirichlet-to-Neumann 的遠場邊界條件等）。其他有關橢圓界面方程在實際問題上的應用，諸如巨分子生化反應，三維量子點的能階計算等，參見[3,7]。

以上所提的數值方法，主要是針對界面本身是光滑的情形（此時(1)的解也是片斷光滑的）。當界面本身帶有角點甚或自交時（圖二），方程(1)的解光滑性可能僅略高於 H^1，此即所謂的「角點奇異性」(corner singularity)。一個經典的例子如下(見[8])：取 $\Omega = B(1)$。在第一、三象限 $k(x)=k^+$，在第二、四象限 $k(x)=k^-=1$。



圖一 區域 Ω 與界面 Γ



圖二 界面 Γ 自交

$$u(r,\theta)=\begin{cases} r^{\gamma}\cos((\pi/2-\sigma)\gamma)\cdot\cos((\theta-\pi/2+\tau)\gamma) & 0\le\theta\le\pi/2,\\ r^{\gamma}\cos(\tau\gamma)\cdot\cos((\theta-\pi+\sigma)\gamma) & \pi/2\le\theta\le\pi,\\ r^{\gamma}\cos(\sigma\gamma)\cdot\cos((\theta-\pi-\tau)\gamma) & \pi\le\theta\le 3\pi/2,\\ r^{\gamma}\cos((\pi/2-\tau)\gamma)\cdot\cos((\theta-3\pi/2-\sigma)\gamma) & 3\pi/2\le\theta\le 2\pi,\end{cases}$$

$f=0$。此處的常數 γ,τ,σ,k^+ 滿足下列的非線性條件：

$$\begin{cases} k^+=-\tan((\pi/2-\sigma)\gamma)\cdot\cot(\tau\gamma)\\ 1/k^+=-\tan(\tau\gamma)\cdot\cot(\sigma\gamma)\\ k^+=-\tan(\sigma\gamma)\cdot\cot((\pi/2-\tau)\gamma)\\ 0<\gamma<2\\ \max(0,\pi\gamma-\pi)<2\gamma\tau<\min(\pi\gamma,\pi)\\ \max(0,\pi-\pi\gamma)<-2\gamma\sigma<\min(\pi,2\pi-\pi\gamma)\end{cases}$$

我們可以很容易驗證解的光滑度僅有 $u\in H^{1+\delta}(\Omega),\quad \delta<\gamma$。當解本身有這類奇異性時，標準的有限元法或有限差分法均無法達成理論上的精度。例如：標準的有限元誤差估計是

$$\|u-u_h\|_{H^1}\le Ch\|u\|_{H^2}.$$

但因解 u 不在 H^2 內，我們僅能期望達到

$$\|u-u_h\|_{H^1}\le Ch^{\delta}\|u\|_{H^{1+\delta}}.$$

當γ<<1 時，收斂速度就非常慢。實際的數據顯示，用 1024×1024 個均勻分佈的節點作有限元計算，當 $\gamma=0.1$時，其相對誤差仍高達 23.68% [1]。爲了提高角奇點計算的精度，通常的做法是在奇點附近做局部的網格加密。一個著名的例子是當角點附近的界面與材料係數具有自相似性(self-similarity)時（例如界面係由以角點出發的射線所構成，而 $k(x)$在角點附近是片段常數），我們可以採用所謂的「無限元」法[4,12]。首先在角點附近構造出一圈的有限母元，再將這些母元成比例的縮小，以一序列無窮多個有限元塡滿角點附近的區域。這個「無限元」法所對應的是一個無窮維的矩陣問題，但是由於資料的自相似性，我們可以推出相鄰兩圈有限元之間的遞迴關係，因此最後我們只需要在母元所構成的有限元空間上解矩陣問題。

對於一般的情形，角奇點計算的中心議題便在於如何制定局部加密的規則，以相同的節點數達到最大的精度。一個比較成熟的理論，是採取後驗估計來調整節點的分佈，詳見[1],[10]。

針對橢圓界面問題的計算，筆者與黃印良博士發展了一套改良自[11]的有限差分法[6]。這個新方法具備對稱、正定與對角佔優（亦即滿足極大値原理）等良好的矩陣性質。配合類似極座標的座標系統，恰巧很適合用來計算這類有角點奇異性的問題。在這個問題上，奇點的特徵是解在徑向上有劇烈的變化，因此我們

在[5]中提出了一個對徑向上的網格分布作局部加密的方法。這相較一般的後驗估計簡單許多，而且也能達到二階的精度。這類的問題因爲牽涉到解與座標系統的奇異性，因此有限差分法的誤差估計理論還不是很完備，應該是一個值得探討的研究議題。

參考文獻

[1] Z. Chen and S. Dai, *SIAM J. Sci. Comput.*, **24**, 443 (2002).

[2] Z. Chen and J. Zou, *Numer. Math.*, **79,** 175 (1998).

[3] I.-L. Chern, J.-G. Liu and W.-C. Wang, *Meth. Appl. Anal.*, **10**, 309 (2003).

[4] H. Han, *Numer. Meth.*, **39**, 39 (1982).

[5] Y.-L. Huang and W.-C. Wang, *Adaptive computation of the corner singularity with the monotone jump condition capturing scheme*, Recent Advances in Adaptive Computations, American Mathematics Societh (AMS), (HangZhou, 2004), Comtemporary Mathematics (2005).

[6] Y.-L. Huang and W.-C. wang, A monotone jump condition capturing scheme for elliptic interface problems on irregular domains, Preprint.

[7] T.-M. Hwang, W.-W. Lin, W.-C. Wang and W. Wang, *J. Comput. Phys.*, **196**, 208 (2004).

[8] R.B. Kellogg, *Applicable Analysis*, **4**, 101 (1975).

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

[10] P. Morin, R.H. Nochetto and K.G. Siebert, *SIAM J. Numer. Anal.*, **37**, 466 (2000).

[11] W.-C. Wang, *SIAM J. Sci. Comput.*, **25**, 1479 (2004).

[12.] L.-A. Ying, *The infinite element method*, Peking University Press (1992).