行政院國家科學委員會專題研究計畫　期中進度報告

偏微分方程在非直角座標區域之四階緊緻差分法(1/3)

計畫類別：個別型計畫
計畫編號：NSC92-2115-M-009-012-
執行期間：92 年 08 月 01 日至 93 年 07 月 31 日
執行單位：國立交通大學應用數學系

計畫主持人：賴明治

報告類型：精簡報告
報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文
處理方式：本計畫可公開查詢

中　華　民　國 93 年 5 月 24 日

一、中英文摘要：

(一)中文摘要：

在筆者近年來所執行的國科會計畫裡，主要是發展橢圓型的 Poisson 方程在圓柱及球座標中二維及三維的快速算法。在此計畫裡，我們打算發展一些有趣的偏微分方程(包含橢圓方程、傳導擴散方程、流體力學的 Navier-Stokes 方程、燃燒的 flame sheet 問題、量子力學的 Bose-Einstein 凝結方程等)，在二維或三維非直角區域上的數值算法。我們將著重於方程在包含圓盤、圓柱、球體及橢圓區域上四階精度緊緻差分的研究。相對於傳統緊緻差分在直角座標區域的發展，上述的文獻可說是非常的少，特別是在流體力學的 Navier-Stokes 方程上，如何在圓柱座標表示下發展出高效率且高精度的緊緻差分算法，一直都是一個非常有趣的問題。特別值得一提的是四階緊緻差分比傳統二階的中間差分精確，而且比四階的中間差分少網格點，因此能更有效率地處理邊界問題，進而避免了數值的不穩定性，所產生的線性矩陣也比較簡單。

中文關鍵詞：快速算法、緊緻差分、極座標、圓柱座標、球座標、橢圓座標

(二)英文摘要

In the past NSC research project, we have successfully developed 2D and 3D fast Poisson solvers in polar, cylindrical and spherical coordinates. In the current proposal, we plan to develop the numerical methods for the PDEs including the convection-diffusion equation, the Navier-Stokes equations,and Gross-Pitaevskii equation on non-Cartesian geometries. More precisely, we shall focus on the development of the fourth-order compact schemes for the above equations on the polar, cylindrical, spherical and elliptical domains. Comparing to the development of compact schemes on Cartesian domain, the literature for non-Cartesian domain is relatively few. For example, developing an efficient and fourth-order accurate compact schemes for Navier-Stokes equations on 3D cylindrical geometry is an interesting and important problem.

One should notice that the fourth-order compact differencing is more accurate than the standard second-order central differencing. Besides, it uses a smaller stencil than the five-point central differencing so the difference scheme handles the boundary easily. The resultant matrix is easier too.

Keywords: Fast Poisson solver; compact scheme; polar coordinates; cylindrical coordinates; spherical coordinates; elliptical coordinates.

二、報告內容：

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-Bernard 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。

在數值偏微分方程的有限差分中，緊緻差分法(compact scheme)與傳統的中央差分法(centered difference scheme)最大的差別是前者可用比較少的網格點就能得到想要的精度。(譬如，在二階導數的離散近似中，傳統中央差分需要五點格式而緊緻差分僅需三點格式便能達到四階精度)。另外，緊緻差分法的優點還包括因使用較少的網格點，邊界的處理較容易，所產生的矩陣問題也較簡單。

偏微分方程，特別是筆者感興趣的橢圓型、拋物型及流體力學方程式在直角座標下的高階緊緻差分法，已經發展得相當完整，然而，在非直角座標系(包含極座標、圓柱、球及橢圓座標系)，類似的文獻還不算多。因此，如何設計上述這些方程在非直角座標區域下的緊緻差分算法，一直是科學計算中有趣的問題，也正是此研究計畫的最主要目的。

筆者在 2002 年 JCP 的一篇文章裡(JCP，182，337-，(2002))，發展了一種 Poisson 方程在二維圓盤上的緊緻差分法，其精確度是形式四階但實際三階的結果。這種失去一階精度的原因乃由於原點附近的離散行為所導致，如何改善此一小瑕疵，使之能保持實際四階的精度，仍是一項待研究的工作。即使如此，我們的方法仍比現存的一些方法簡單和精確。

三、計畫成果自評：

本計畫屬於三年期之計畫，目前的報告乃是此計畫執行第一年(92/08-93/07)的成果，我們基本上完成了二項主要工作：

(一) Poisson 方程在二維橢圓[1]及三維橢球[2]區域上的快速算法。在二維橢圓區域上，我們的四階精確法即屬於緊緻差分的形式。

(二) 發展一些針對非線性薛丁格方程(Gross-Pitaevskii 方程)在球對稱及圓柱對稱座標下的有限差分數值方法，並藉此研究 Bose-Einstein 凝結的物理現象[3,4]。此外，我們也發展了一些計算基態(ground state)的數值方法，並與其它方法比較[4]。

綜合上述成果，我們完成了原計畫所提內容的第 2 及第 4 項。(請參考原計畫之研究項目及步驟)，並得到了第 1 項之部分結果，因此筆者認為已達到原計畫預期的目標。

四、參考文獻：

[1] M.-C. Lai, Fast direct solver for Poisson equation in a 2D elliptical domain, Number Methods Partial Differential Eq. 20: 72-81, (2004).

[2] M.-C. Lai, Fast Poisson solver in a three-dimensional ellipsoid, Contemporary Mathematics, vol. 329, AMS, (2003).

[3] M.-C. Lai, C.-Y. Huang and T.-S. Lin, A simple Dufort-Frankel type scheme for the Gross-Pitaevskii equation of Bose-Einstein condensates on different geometries, to appear.

[4] Te-Sheng Lin, Numerial methods for the nonlinear Schrodinger equation, Master thesis, Department of Mathematics, National Chung Cheng University, June, 2004.