

The Fast Algorithm for the Charge Conserving Poisson-Boltzmann Equation in Elliptic Domain

國立成功大學應用數學研究所

學生：辛承威

指導教授：舒宇宸

Jan 10, 2018

Outline

1 介紹問題

2 數值方法

3 數值結果

4 結論

Outline

1 介紹問題

2 數值方法

3 數值結果

4 結論

Charge Conserving Poisson-Boltzmann Equation

近幾十年來，建立的泊松-玻茲曼方程，幫助處理了各式的問題，以下為電荷守恆的泊松-玻茲曼 (Charge Conserving Poisson-Boltzmann) 方程來描述多種離子在離子溶液中的形式，簡稱為 CCPB 方程：

Charge Conserving Poisson-Boltzmann Equation

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta u = \sum_{k=1}^{N_1} \frac{a_k \alpha_k e^{a_k u}}{\int_{\Omega} e^{a_k u} dx} - \sum_{l=1}^{N_2} \frac{b_l \beta_l e^{-b_l u}}{\int_{\Omega} e^{-b_l u} dx} & \text{in } \Omega \\ u + \eta \frac{\partial u}{\partial \vec{v}} = u_{\partial\Omega} & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (1)$$

Charge Conserving Poisson-Boltzmann Equation

其 u 是靜電勢， Δ 是拉普拉斯算子在 \mathbb{R}^N 空間， Ω 是在 \mathbb{R}^N 上某一個有界範圍， $\partial\Omega$ 代表的是光滑邊界，和 $\vec{\nu}$ 是邊界上朝外的單位法向量，常數 a_k 、 α_k 、 b_l 和 β_l 需要滿足

$$\begin{cases} 0 < a_1 < a_2 < \cdots < a_{N_1} \\ 0 < b_1 < b_2 < \cdots < b_{N_2} \end{cases}$$

邊界 $\partial\Omega$ 可以視為電雙層，這個邊界條件也是所謂的 Robin boundary condition， η 是一個非負常數而且跟表層的介電常數和離子溶液的表面電容有關。

目標問題

因為如果要直接要解這個方程是很困難的，於是我們簡化了這個方程，如果我們只單純看氯化鈉 (NaCl) 溶液，因為鈉離子是帶正 1 價、氯離子是帶負 1 價，而將 η 假設為 0，而且選擇定義域為一個橢圓，所以 Eq. (1) 將會被簡略。

目標問題

但是這樣還是難以去求解。

$$\begin{cases} \Delta u = \frac{e^u - e^{-u}}{2}, & \text{in } \Omega \\ u = u_{\partial\Omega} \end{cases} \quad (2)$$

因此，對於這個區域外加一個外力 f ，例如電場等，這樣將會改變成

$$\begin{cases} \Delta u = \frac{e^u - e^{-u}}{2} + f, & \text{in } \Omega \\ u = u_{\partial\Omega} \end{cases} \quad (3)$$

Eq. (3) 就是這篇論文要解決的目標

Outline

1 介紹問題

2 數值方法

3 數值結果

4 結論

橢圓座標系

要先介紹橢圓座標系，橢圓座標系為二維正交座標系，其橢圓座標的最常見的定義為：

橢圓座標系

要先介紹橢圓座標系，橢圓座標系為二維正交座標系，其橢圓座標的最常見的定義為：

$$\begin{cases} x = A \cosh \phi \cos \theta \\ y = A \sinh \phi \sin \theta \end{cases} \quad (4)$$

橢圓座標系

要先介紹橢圓座標系，橢圓座標系為二維正交座標系，其橢圓座標的最常見的定義為：

$$\begin{cases} x = A \cosh \phi \cos \theta \\ y = A \sinh \phi \sin \theta \end{cases} \quad (4)$$

其中 $\phi \geq 0$ 為非負之實數，而且 $\theta \in [0, 2\pi)$ 。

橢圓座標系

(a) 如果現在分別給定 $A = 1$ 、 $\phi = 1$ ，那麼我們令：

$$\begin{cases} \tilde{a} = \cosh(1) \\ \tilde{b} = \sinh(1) \end{cases} \quad (5)$$

橢圓座標系

(a) 如果現在分別給定 $A = 1$ 、 $\phi = 1$ ，那麼我們令：

$$\begin{cases} \tilde{a} = \cosh(1) \\ \tilde{b} = \sinh(1) \end{cases} \quad (5)$$

分別把 \tilde{a} 、 \tilde{b} 代入 Eq. (5)，得到了

$$\begin{cases} x = \tilde{a} \cdot \cos \theta \\ y = \tilde{b} \cdot \sin \theta \end{cases} \quad (6)$$

這個其實是一個橢圓的參數式。

橢圓座標系

(b) 另一方面，如果分別給定 $A = 1$ 、 $\theta = \frac{1}{3}\pi$ ，那麼我們令：

$$\begin{cases} \tilde{c} = \cos\left(\frac{1}{3}\pi\right) \\ \tilde{d} = \sin\left(\frac{1}{3}\pi\right) \end{cases} \quad (7)$$

橢圓座標系

(b) 另一方面，如果分別給定 $A = 1$ 、 $\theta = \frac{1}{3}\pi$ ，那麼我們令：

$$\begin{cases} \tilde{c} = \cos(\frac{1}{3}\pi) \\ \tilde{d} = \sin(\frac{1}{3}\pi) \end{cases} \quad (7)$$

分別把 c 、 d 代入 Eq. (4)，得到了

$$\begin{cases} x = \tilde{c} \cdot \cosh \phi \\ y = \tilde{d} \cdot \sinh \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{x}{\tilde{c}} = \cosh \phi \\ \frac{y}{\tilde{d}} = \sinh \phi \end{cases} \quad (8)$$

橢圓座標系

Eq. (8) 上下同時平方後相減，可以得到

$$\frac{x^2}{\tilde{c}^2} - \frac{y^2}{\tilde{d}^2} = (\cosh \phi)^2 - (\sinh \phi)^2 = 1 \quad (9)$$

這個其實是一個雙曲線的方程式。

橢圓座標轉換

因為我們主要的問題是一個非線性的偏微分方程，首先，先回到最簡單的 Poisson Equation 來看

$$\begin{cases} \Delta u = u_{xx} + u_{yy} = f, & \text{in } \Omega = \left\{ (x, y) \mid \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1 \right\} \\ u|_{\partial\Omega} = u \end{cases} \quad (10)$$

$u = u(x, y)$ 、 $f = f(x, y)$ ， $u|_{\partial\Omega} = u$ 是其邊界條件， a 和 b 屬於非零實數且 $a > b$ 。

橢圓座標轉換

$$\begin{aligned}
 u_{\phi\phi} + u_{\theta\theta} &= u_{xx} \cdot (x_{\phi})^2 + u_{yy} \cdot (x_{\theta})^2 \\
 &= \left[(A \sinh \phi \cos \theta)^2 + (A \cosh \phi \sin \theta)^2 \right] \cdot (u_{xx} + u_{yy}) \quad (11) \\
 &= A^2 \cdot (\sinh^2 \phi + \sin^2 \theta) \cdot (u_{xx} + u_{yy})
 \end{aligned}$$

橢圓座標轉換

做完變數變換後，Poisson Equation 可以改寫成

$$\begin{cases} \Delta u = u_{\phi\phi} + u_{\theta\theta} = f \cdot A^2 \cdot (\sinh^2 \phi + \sin^2 \theta) = \tilde{f} \\ u|_{\partial\Omega} = u \end{cases} \quad (12)$$

橢圓座標轉換

做完變數變換後，Poisson Equation 可以改寫成

$$\begin{cases} \Delta u = u_{\phi\phi} + u_{\theta\theta} = f \cdot A^2 \cdot (\sinh^2 \phi + \sin^2 \theta) = \tilde{f} \\ u|_{\partial\Omega} = u \end{cases} \quad (12)$$

原本 (x, y) 的定義域是在橢圓 Ω 內部，但變數改變後， (ϕ, θ) 的定義域為何呢？！

橢圓座標轉換

從 Eq. (10)，最外側的橢圓的長軸為 a 、短軸為 b ，要如何對應到 $\phi - \theta$ 直角座標系，可由橢圓參數式推得

$$\begin{cases} x = a \cdot \cos \theta = A \cosh \phi \cos \theta \\ y = b \cdot \sin \theta = A \sinh \phi \sin \theta \end{cases} \implies \begin{cases} a = A \cdot \cosh \phi \\ b = A \cdot \sinh \phi \end{cases} \quad (13)$$

橢圓座標轉換

將兩式子相除後，可以得到 ϕ

$$\frac{b}{a} = \tanh \phi \implies \phi = \tanh^{-1} \left(\frac{b}{a} \right) \quad (14)$$

橢圓座標轉換

最外側的橢圓對應到 $\phi - \theta$ 直角座標系上是一條線段 L ，此線段

$$L = \{(\phi, \theta) \mid \phi = \tanh^{-1}\left(\frac{b}{a}\right), \text{ and } \theta \in [0, 2\pi)\}$$

並且令 $\phi_{\max} = \tanh^{-1}\left(\frac{b}{a}\right)$

橢圓座標轉換

因為橢圓座標系的定義 Eq. (4) 的結果， (x, y) 的定義域對應到 $\phi - \theta$ 直角座標系，為以下四條線段構成的封閉區間 H

$$\left\{ \begin{array}{l} L_1 = \{(\phi, \theta) \mid \phi = \phi_{max}, \text{ and } \theta \in [0, 2\pi)\} \\ L_2 = \{(\phi, \theta) \mid \phi \in [0, \phi_{max}], \text{ and } \theta = 0\} \\ L_3 = \{(\phi, \theta) \mid \phi \in [0, \phi_{max}], \text{ and } \theta = 2\pi\} \\ L_4 = \{(\phi, \theta) \mid \phi = 0, \text{ and } \theta \in [0, 2\pi)\} \end{array} \right. \quad (15)$$

橢圓座標轉換

我們可以得到定義域的對應關係

$$\begin{aligned} \Omega : \left\{ (x, y) \mid \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1 \right\} \\ \iff H : \{ (\phi, \theta) \mid \phi \in [0, \phi_{\max}], \text{ and } \theta \in [0, 2\pi] \} \end{aligned} \quad (16)$$

離散化

有了前兩個小節的結果，我們的問題 (Eq. (10)) 改變成

$$\begin{cases} \Delta u = u_{\phi\phi} + u_{\theta\theta} = f \cdot A^2 \cdot (\sinh^2 \phi + \sin^2 \theta) = \tilde{f}, \text{ and in } H \\ u|_{\partial\Omega} = u \end{cases} \quad (17)$$

離散化

要直接解出函數 u 。要直接解出 u 非常的不容易，因此，改給有限的點，且按照以下方式選取

$$\begin{aligned}\tilde{f}_{i,j} &= \tilde{f}\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, (j-1) \cdot \left(\frac{2\pi}{N}\right)\right) \\ &= \tilde{f}(\phi_i, \theta_j) \\ u_{i,j} &= u\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, (j-1) \cdot \left(\frac{2\pi}{N}\right)\right) \\ &= u(\phi_i, \theta_j)\end{aligned}\tag{18}$$

離散化

$$\begin{aligned}\tilde{f}_{i,j} &= \tilde{f}\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{\max}, (j-1) \cdot \left(\frac{2\pi}{N}\right)\right) \\ &= \tilde{f}(\phi_i, \theta_j) \\ u_{i,j} &= u\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{\max}, (j-1) \cdot \left(\frac{2\pi}{N}\right)\right) \\ &= u(\phi_i, \theta_j)\end{aligned}\tag{19}$$

$i = 1, 2 \dots M$ 、 $j = 1, 2 \dots N$ ， M 為沿著 ϕ 方向切的點數， N 為沿著 θ 方向切的點數，我們為了以後方便表示，先令
 $\Delta\phi = \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{\max}$ 、 $\Delta\theta = \left(\frac{2\pi}{N}\right)$

離散化

藉由有限差分法，可以知道

$$\begin{aligned}\Delta u &\approx \frac{1}{\Delta\theta^2} \cdot (u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) + \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot (u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) \\ &\quad - \left(\frac{2}{\Delta\theta^2} + \frac{2}{\Delta\phi^2} \right) \cdot u_{i,j} \\ &= \tilde{f}_{i,j}\end{aligned}\tag{20}$$

離散化

令 $v_k = u_{i,j}$ 、 $e_k = \tilde{f}_{i,j}$ 而 $k = j + (i - 1)(N)$ ，我們可以改寫成

離散化

$$B \times \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{MN-N+1} \\ v_{MN-N+2} \\ \vdots \\ v_{MN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ \vdots \\ e_{MN-N+1} - \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot u|_{\partial\Omega}(\phi_{max}, 0) \\ e_{MN-N+2} - \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot u|_{\partial\Omega}(\phi_{max}, \frac{2\pi}{N}) \\ \vdots \\ e_{MN} - \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot u|_{\partial\Omega}(\phi_{max}, (N-1) \cdot \frac{2\pi}{N}) \end{pmatrix} \quad (21)$$

離散化

我們簡單表示為以下的式子：

$$Bv = e \quad (22)$$

離散化

而我們把所選的格子點做分類探討：

當 $i=1, j=1$ ，會出現 $u_{1,0}$ 、 $u_{0,1}$

$$u_{1,0} = u\left(\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, (N-1) \cdot \frac{2\pi}{N}\right) = u_{1,N}$$

$$u_{0,1} = u\left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, 0\right) = u_{1,1}$$

所以 $u_{1,0}$ 、 $u_{0,1}$ 由 $u_{1,N}$ 、 $u_{1,1}$ 取代。

離散化

當 $i = 1, j = N$ ，會出現 $u_{1,N+1}$ 、 $u_{0,N}$

$$u_{1,N+1} = u\left(\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, 0\right) = u_{1,1}$$

$$u_{0,N} = u\left(\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, \frac{2\pi}{N}\right) = u_{1,2}$$

所以 $u_{1,N+1}$ 、 $u_{0,N}$ 由 $u_{1,1}$ 、 $u_{1,2}$ 取代。

離散化

當 $i = M, j = 1$ ，會出現 $u_{M,0}$

$$u_{M,0} = u \left(\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1} \right) \phi_{max}, (N-1) \cdot \frac{2\pi}{N} \right) = u_{M,N}$$

所以 $u_{M,0}$ 由 $u_{M,N}$ 取代。

離散化

當 $i = M, j = N$ ，會出現 $u_{M,N+1}$

$$u_{M,N+1} = u\left(\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, 0\right) = u_{M,1}$$

所以 $u_{M,N+1}$ 由 $u_{M,1}$ 取代。

離散化

當 $i = 2 \cdots (M-1), j = N$ ，會出現 $u_{i,N+1}$

$$u_{i,N+1} = u\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, 0\right) = u_{i,1}$$

所以 $u_{i,N+1}$ 由 $u_{i,1}$ 取代。

離散化

當 $i = 2 \cdots (M-1), j = 1$ ，會出現 $u_{i,0}$

$$u_{i,0} = u\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, (N-1) \cdot \frac{2\pi}{N}\right) = u_{i,N}$$

所以 $u_{i,0}$ 由 $u_{i,N}$ 取代。

離散化

當 $i = 1, j = 2 \cdots (N - 1)$ ，會出現 $u_{0,j}$

$$u_{0,j} = u\left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{2}{2M+1}\right) \phi_{max}, (N - 1) \cdot \frac{2\pi}{N}\right) = u_{1,N+2-j}$$

所以 $u_{0,j}$ 由 $u_{1,N+2-j}$ 取代。

離散化

其餘的點按照著有限差分法擺放好，所以我們最後要解的其實就是

$$v = B^{-1}e. \quad (23)$$

加速方法

這邊我們選擇使用快速傅立葉轉換，那麼最重要的就是要找出特徵函數，而我們找到兩個特徵函數，為以下

加速方法

這邊我們選擇使用快速傅立葉轉換，那麼最重要的就是要找出特徵函數，而我們找到兩個特徵函數，為以下

(1)

$$u_{l,m} = \cos(A_l \cdot \phi) \cos(m \cdot \theta), \quad A_l = \frac{\pi \cdot (2l - 1)}{2 \cdot \phi_{\max}} \quad \text{and} \quad l, m \in \mathbb{N} \quad (24)$$

(2)

$$u_{l,m} = \sin(B_l \cdot \phi) \sin(m \cdot \theta), \quad B_l = \frac{\pi}{\phi_{\max}} \cdot l \quad \text{and} \quad l, m \in \mathbb{N} \quad (25)$$

加速方法

如果 $u_{l,m}$ 等於 Eq. (15)，並且做拉普拉斯

$$\Delta u_{l,m} = \frac{\partial^2 u_{l,m}}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 u_{l,m}}{\partial \theta^2} = \left(-A_l^2 - m^2\right) \cdot u_{l,m} \quad (26)$$

那麼 $(-A_l^2 - m^2)$ 也可以視為這個特徵函數的特徵值 $\lambda_{l,m}$

加速方法

$u_{l,m}$ 會滿足在定義域 H (Eq. (15)) 在邊界的條件，如以下

$$\begin{aligned} u_{l,m}(\phi, \theta + 2\pi) &= \cos(A_l \cdot \phi) \cos(m \cdot \theta) = u_{l,m}(\phi, \theta) \\ u_{l,m}(\phi_{max}, 0) &= \cos\left(\frac{\pi}{2} \cdot (2l - 1)\right) \cos(m \cdot \theta) = 0 \\ u_{l,m}(-\phi, 2\pi - \theta) &= \cos(A_l \cdot \phi) \cos(m \cdot \theta) = u_{l,m}(\phi, \theta) \end{aligned} \quad (27)$$

加速方法

如果 $u_{l,m}$ 等於 Eq. (25)

$$\Delta u_{l,m} = \frac{\partial^2 u_{l,m}}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 u_{l,m}}{\partial \theta^2} = \left(-B_l^2 - m^2 \right) \cdot u_{l,m} \quad (28)$$

那麼 $(-B_l^2 - m^2)$ 也可以視為這個特徵函數的特徵值 $\lambda_{l,m}$

加速方法

$u_{l,m}$ 也會滿足在定義域 H (Eq. (16)) 在邊界的條件，如以下

$$\begin{aligned}
 u_{l,m}(\phi, \theta + 2\pi) &= \sin(B_l \cdot \phi) \sin(m \cdot \theta) = u_{l,m}(\phi, \theta) \\
 u_{l,m}(\phi_{max}, 0) &= \sin(\pi \cdot l) \sin(m \cdot \theta) = 0 \\
 u_{l,m}(-\phi, 2\pi - \theta) &= \sin(B_l \cdot \phi) \sin(m \cdot \theta) = u_{l,m}(\phi, \theta)
 \end{aligned} \tag{29}$$

加速方法

但這裡所找到的特徵值不是我們要的，因為我們已經離散化了，所以應該是用有限差分法去找到我們所需要的特徵值，所以當 $u_{l,m}$ 等於

加速方法

$$\begin{aligned}\Delta u_{l,m} &\approx \frac{1}{\Delta\theta^2} \cdot (u_{l,m}(\phi_i, \theta_{j+1}) + u_{l,m}(\phi_i, \theta_{j-1}) - 2u_{l,m}(\phi_i, \theta_j)) \\ &+ \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot (u_{l,m}(\phi_{i+1}, \theta_j) + u_{l,m}(\phi_{i-1}, \theta_j) - 2u_{l,m}(\phi_i, \theta_j)) \\ &= \left(\frac{1}{\Delta\theta^2} (2 \cos(m\Delta\theta) - 2) + \frac{1}{\Delta\phi^2} (2 \cos(A_l \Delta\phi) - 2) \right) u_{l,m} \\ &= \lambda_{l,m} \cdot u_{l,m}\end{aligned}$$

那麼 $\lambda_{l,m}$ 為離散後的特徵值。

加速方法

如果 $u_{l,m}$ 等於

加速方法

如果 $u_{l,m}$ 等於

$$\begin{aligned}\Delta u_{l,m} &\approx \frac{1}{\Delta\theta^2} \cdot (u_{l,m}(\phi_i, \theta_{j+1}) + u_{l,m}(\phi_i, \theta_{j-1}) - 2u_{l,m}(\phi_i, \theta_j)) \\ &+ \frac{1}{\Delta\phi^2} \cdot (u_{l,m}(\phi_{i+1}, \theta_j) + u_{l,m}(\phi_{i-1}, \theta_j) - 2u_{l,m}(\phi_i, \theta_j)) \\ &= \left(\frac{1}{\Delta\theta^2} (2 \cos(m\Delta\theta) - 2) + \frac{1}{\Delta\phi^2} (2 \cos(B_l \Delta\phi) - 2) \right) u_{l,m} \\ &= \lambda_{l,m} \cdot u_{l,m}\end{aligned}$$

那麼 $\lambda_{l,m}$ 為離散後的特徵值。

加速方法

最後，或許會有一些疑問，兩種特徵函數都可以使用，為什麼還要特別舉出第二個特徵函數，因為在兩個特徵值表示式中都有 $\cos(m\Delta\theta)$ 這項，週期減半，如果 l 固定下，是沒有辦法找到所有的特徵值。所以才需要兩個不同特徵函數

非線性的 Poisson Equation 求解

終於要來解決此報告想要解決的問題如下：

$$\begin{cases} \Delta u + \sinh(u) = (u_{xx} + u_{yy}) + \sinh(u) = f, \text{ in } \Omega \\ u|_{\partial\Omega} = u \end{cases} \quad (30)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

我們可以改寫成

$$B \times v + \begin{pmatrix} \sinh(v_1) \\ \sinh(v_2) \\ \sinh(v_3) \\ \vdots \\ \sinh(v_{MN-N+1}) \\ \sinh(v_{MN-N+2}) \\ \vdots \\ \sinh(v_{MN}) \end{pmatrix}_{MN \times 1} = e \quad (31)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

我們簡單表示為以下的式子：

$$Bv + s = e \quad (32)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

我們先把 Eq. (32) 另外改寫成一個聯立非線性方程組的形式

$$\left\{ \begin{array}{l} F_1(v) = \sum_{j=1}^{MN} B_{1,j} \cdot v_j + s_1 - e_1 \\ F_2(v) = \sum_{j=1}^{MN} B_{2,j} \cdot v_j + s_2 - e_2 \\ \vdots \\ F_{MN}(v) = \sum_{j=1}^{MN} B_{MN,j} \cdot v_j + s_{MN} - e_{MN} \end{array} \right. \quad (33)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

在這裡我們使用兩種方法做迭代

(a) 固定點迭代 (Fixed Point Iteration)

從 Eq. (32)，我們做一些操作

$$\begin{aligned}
 Bv + \sinh(v) &= e \\
 \Rightarrow Bv &= e - \sinh(v) \\
 \Rightarrow v &= B^{-1} \times (e - \sinh(v))
 \end{aligned} \tag{34}$$

非線性的 Poisson Equation 求解

因此，我們的迭代方程式為

$$\Rightarrow v^{k+1} = B^{-1} \times (e - \sinh(v^k)) \quad (35)$$

這裡的 k 為迭代次數。

非線性的 Poisson Equation 求解

(b) 牛頓法 (Newton's Method)

利用牛頓法解多變數非線性方程組，可以用矩陣表示：

$$v^{k+1} = v^k - [J(v^k)]^{-1} \times F(v^k) \quad (36)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

其中 $J(v^k)$ 是 Jacobian 矩陣， F 等於 $[F_1, F_2, \dots, F_{MN}]^T$ ，這裡的 k 為迭代次數，而且

$$J(v^k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial v_1}(v^k) & \frac{\partial F_1}{\partial v_2}(v^k) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial v_{MN}}(v^k) \\ \frac{\partial F_2}{\partial v_1}(v^k) & \frac{\partial F_2}{\partial v_2}(v^k) & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial v_{MN}}(v^k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{MN}}{\partial v_1}(v^k) & \frac{\partial F_{MN}}{\partial v_2}(v^k) & \dots & \frac{\partial F_{MN}}{\partial v_{MN}}(v^k) \end{pmatrix} = B + \cosh(v^k) \quad (37)$$

非線性的 Poisson Equation 求解

因此，我們的迭代方程式為

$$v^{k+1} = v^k - (B + \cosh(v^k))^{-1} \times F(v^k) \circ \quad (38)$$

Outline

1 介紹問題

2 數值方法

3 數值結果

4 結論

真實解與數值解的誤差

這邊我們估計誤差的方法有兩種：

(1) $\text{error1} : \max(|u_{\text{real}} - u_{\text{num}}|)$

(2) $\text{error2} : \|u_{\text{real}} - u_{\text{num}}\|_2$

另外一方面，以下也會呈現線性與非線性方程求解的結果，這裡測試橢圓長軸皆為 4、短軸為 3。

線性方程

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	6.230E-02	1.553E-02	6.885E-03	3.875E-03	2.481E-03
error2	1.6297	0.7969	0.5293	0.3966	0.3171
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	1.723E-03	1.627E-03	9.695E-04	7.665E-04	6.207E-04
error2	0.2642	0.2665	0.1982	0.1761	0.1585

Table: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 與數值解的誤差表格

線性方程

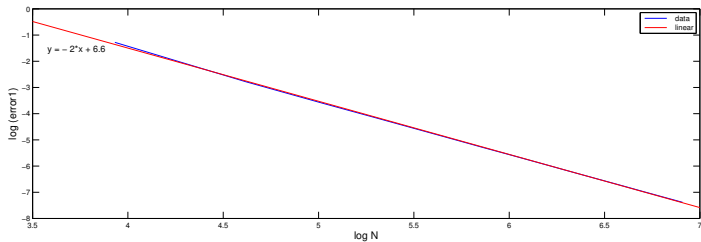


Figure: $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、線性方程、error1

線性方程

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	1.411E-04	3.563E-05	1.589E-05	8.954E-06	5.736E-06
error2	7.125E-03	3.575E-03	2.387E-03	1.791E-03	1.433E-03
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	3.986E-06	2.930E-06	2.244E-06	1.774E-06	1.437E-06
error2	1.195E-03	1.024E-03	8.964E-04	7.968E-04	7.172E-04

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 與數值解的誤差表格

線性方程

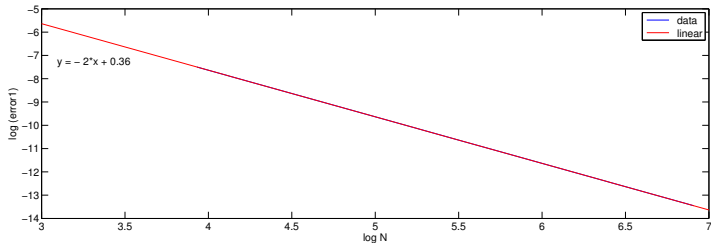


Figure: $u = x^2 + y^2$ 、線性方程、error1

非線性方程

固定點迭代

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	6.204E-02	1.547E-02	6.859E-03	3.860E-03	2.472E-03
error2	1.6233	0.7939	0.5274	0.3951	0.3160
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	1.716E-03	1.262E-03	9.659E-04	7.636E-04	6.184E-04
error2	0.2633	0.2257	0.1974	0.1755	0.1580

Table: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 與數值解的誤差表格

非線性方程

固定點迭代

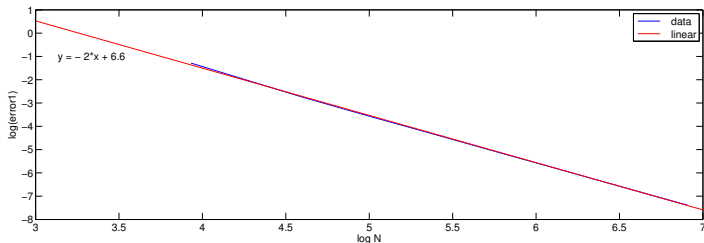


Figure: $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、固定點、error1

非線性方程

牛頓法

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	1.190E-04	3.005E-05	1.340E-05	7.548E-06	4.836E-06
error2	6.154E-03	3.088E-03	2.061E-03	1.547E-03	1.238E-03
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	3.360E-06	2.473E-06	1.894E-06	1.497E-06	1.213E-06
error2	1.032E-03	8.849E-04	7.744E-04	6.884E-04	6.196E-04

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 與數值解的誤差表格

非線性方程

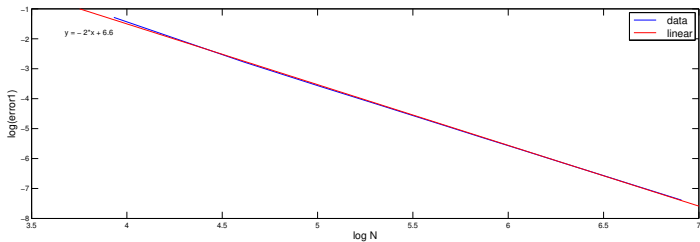


Figure: $u = \sin \pi x \sin 2\pi y$ 、牛頓法、error1

非線性方程

固定點迭代

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	1.190E-04	3.005E-05	1.340E-05	7.548E-06	4.836E-06
error2	6.154E-03	3.088E-03	2.061E-03	1.547E-03	1.238E-03
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	3.360E-06	2.473E-06	1.894E-06	1.497E-06	1.213E-06
error2	1.032E-03	8.849E-04	7.744E-04	6.884E-04	6.196E-04

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 與數值解的誤差表格

非線性方程

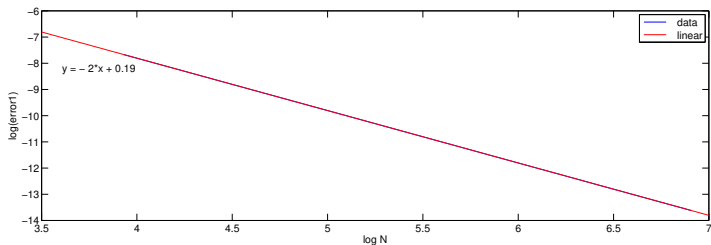


Figure: $u = x^2 + y^2$ 、固定點、error1

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
error1	1.190E-04	3.005E-05	1.340E-05	7.548E-06	4.836E-06
error2	6.154E-03	3.088E-03	2.061E-03	1.547E-03	1.238E-03
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
error1	3.360E-06	2.473E-06	1.894E-06	1.497E-06	1.213E-06
error2	1.032E-03	8.849E-04	7.744E-04	6.884E-04	6.196E-04

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ≡ ▶ ◀ ≡ ▶ ≡ ▶ ↺ 🔍 ↻

非線性方程

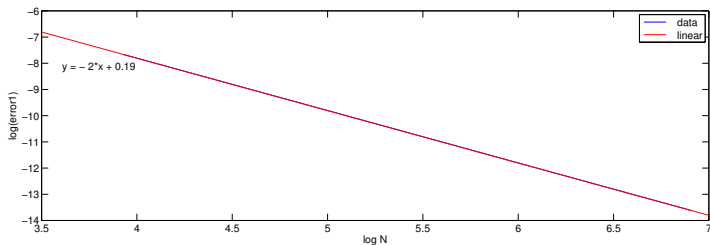


Figure: $u = x^2 + y^2$ 、牛頓法、error1

運算時間

既然誤差是有收斂的，那麼接下來就是要看是否有加速的效果，這邊我分成幾個方向來探討：

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
inv	0.0325	0.1213	0.3244	0.5978	0.9703
FFT	0.0076	0.0279	0.0847	0.1711	0.2787
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
inv	1.4417	2.1402	3.1355	4.0380	5.4382
FFT	0.4092	0.5969	0.7458	0.9564	1.1671

Table: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、線性、運算時間

運算時間

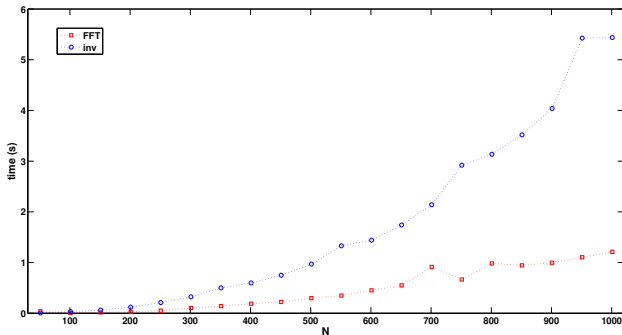


Figure: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、線性、運算時間

運算時間

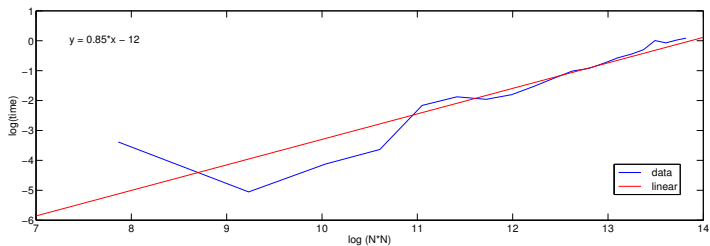


Figure: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、線性、運算時間

運算時間

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
inv	0.0317	0.1195	0.3158	0.5786	0.9740
FFT	0.0074	0.0286	0.1050	0.1773	0.3418
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
inv	1.4668	2.1450	2.8691	3.7619	5.5389
FFT	0.4172	0.6473	0.7729	1.2176	1.1832

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、線性、運算時間

運算時間

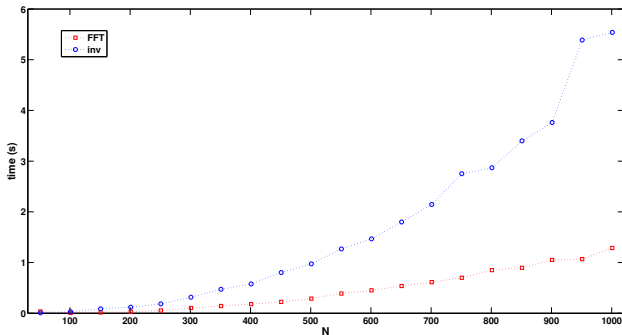


Figure: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、線性、運算時間

運算時間

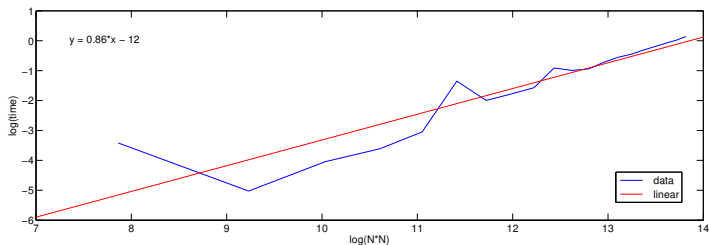


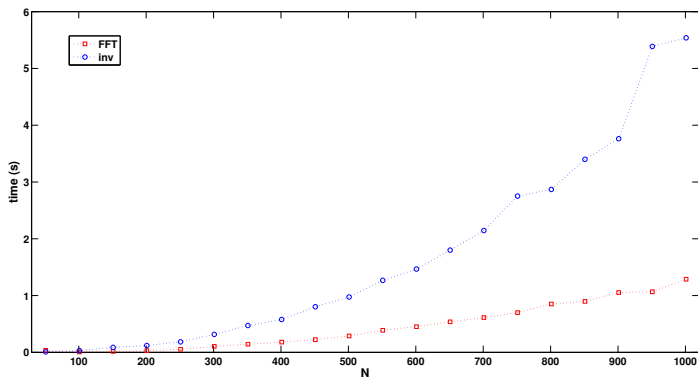
Figure: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、線性、運算時間

固定點與牛頓法運算時間比較

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
固定點	0.0272	0.1146	0.3730	0.7536	1.2222
牛頓法	0.0581	0.2293	0.5341	1.0192	1.6166
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
固定點	1.6933	1.9833	2.3298	3.2408	3.6442
牛頓法	2.4666	3.367	3.1203	3.9997	4.9720

Table: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、非線性、運算時間

固定點與牛頓法運算時間比較



固定點與牛頓法運算時間比較

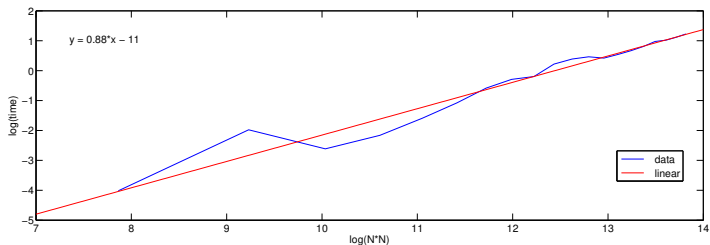


Figure: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、非線性、固定點

固定點與牛頓法運算時間比較

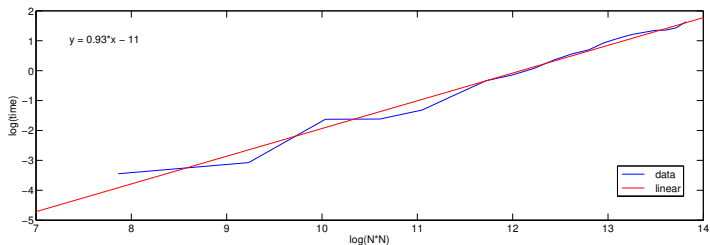


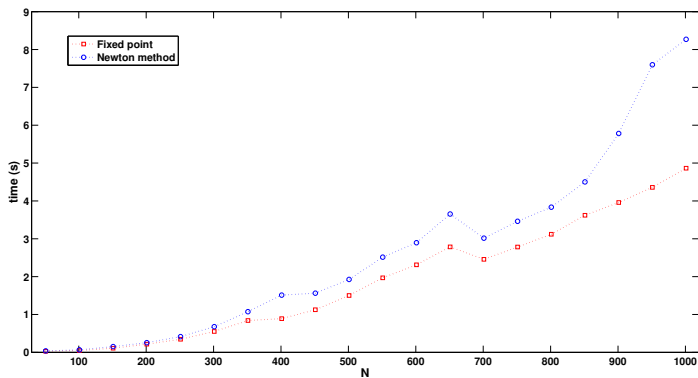
Figure: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、非線性、牛頓法

固定點與牛頓法運算時間比較

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
固定點	0.0532	0.2167	0.6340	0.8676	1.4719
牛頓法	0.0668	0.2559	0.6784	1.5125	1.9254
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
固定點	2.058992	2.3817	3.0976	4.043	4.7639
牛頓法	2.8953	3.0163	3.8346	5.7810	8.2694

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、非線性、運算時間

固定點與牛頓法運算時間比較



固定點與牛頓法運算時間比較

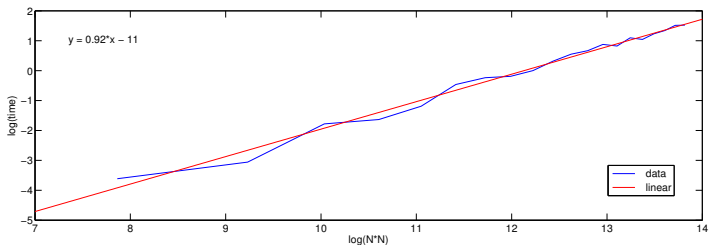


Figure: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、非線性、固定點

固定點與牛頓法運算時間比較

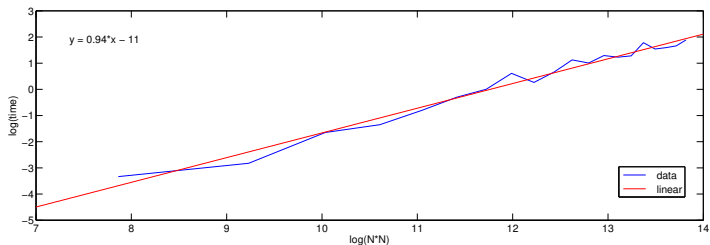


Figure: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、非線性、牛頓法

迭代次數

因為有運用到迭代的步驟，所以好奇迭代的次數會怎麼變化，因此實際測試過後結果如下：

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
固定點	5	4	4	4	4
牛頓法	2	2	1	1	1
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
固定點	4	3	3	3	3
牛頓法	1	2	1	1	1

Table: 測試函數 $u = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$ 、非線性、迭代次數

迭代次數

	N=101	N=201	N=301	N=401	N=501
固定點	8	7	6	5	5
牛頓法	1	1	1	2	1
	N=601	N=701	N=801	N=901	N=1001
固定點	5	4	4	4	4
牛頓法	1	1	1	1	1

Table: 測試函數 $u = x^2 + y^2$ 、非線性、迭代次數

Outline

1 介紹問題

2 數值方法

3 數值結果

4 結論

結論

在本篇論文，我們簡略說明了 CCPB 方程，但由於變數被定義在一橢圓中，要先透過橢圓座標轉換，且再利用有限差分法求出解，由於此求解過程需要求出反矩陣，會拖慢運算速度，因此我們透過快速傅立葉轉換加速求解的過程，數值結果顯示，不管是解線性或非線性的方程，兩種預設的誤差結果都非常的接近二階收斂，不只如此，結果中也可以看運算時間與總點數有著線性關係，比較特別的地方是，牛頓法雖然迭代次數比起固定點迭代少，卻不一定比較快；這個問題其實不只要考慮速度、誤差，對於一開始的輸入初始值、算出特徵值大小，如果輸入的切割點數太多，還要考慮記憶體空間配置問題，所以程式還利用了 Matlab 中的函式 Sparse 大幅減少記憶體空間，尤其稀疏矩陣。

感謝聆聽