Poisson-Boltzmann方程有限元计算的若干研究

阳 莺

摘 要

本文研究的是 Poisson-Boltzmann 方程的有限元数值求解. 一是针对一类三维非线性二阶椭圆问题, 构造并分析了一种局部平均型后验误差估计子. 基于这种后验误差估计子, 设计了一类自适应算法, 并成功地将之应用到 Poisson-Boltzmann 方程的求解. 二是为了处理 Poisson-Boltzmann 方程中的点源奇性, 对三维二阶线性椭圆问题的 Green 函数有限元逼近解进行了双尺度误差分析 – 为自适应计算提供了另类分析, 建立并分析了一种提高 Green 函数奇点附近精度的有限元校正格式. 一系列的数值试验表明, 无论是我们的自适应算法还是我们的校正格式都大大提高了 Poisson-Boltzmann 方程及其相关问题的数值求解效率.

关键词: Poisson-Boltzmann 方程, Green 函数, 后验误差估计, 自适应算法, 校正格式, 双尺度.