

非线性 Poisson-Boltzmann 方程的改进无单元 Galerkin 法分析*

钟思瑶, 李小林

(重庆师范大学 数学科学学院, 重庆 401331)

摘要:【目的】利用改进无单元 Galerkin 法求解非线性 Poisson-Boltzmann 方程。【方法】将改进的移动最小二乘近似与非线性 Poisson-Boltzmann 方程的 Galerkin 弱形式耦合,建立了非线性 Poisson-Boltzmann 方程的改进无单元 Galerkin 法。基于改进移动最小二乘近似的误差结果下,推导了非线性 Poisson-Boltzmann 方程的改进无单元 Galerkin 法的误差估计。【结果】在 Sobolev 空间中获得了误差估计,并通过数值算例验证了理论结果。【结论】该方法具有较高的计算精度和较好的稳定性,误差随节点间距的减小而降低。

关键词:无网格方法;改进无单元 Galerkin 法;非线性 Poisson-Boltzmann 方程;误差估计

中图分类号:O241.82

文献标志码:A

文章编号:1672-6693(2019)04-0068-07

非线性 Poisson-Boltzmann 方程^[1]在物理、生物和化学领域中具有广泛的应用。许多传统的数值技术已被应用于求解非线性 Poisson-Boltzmann 方程,例如边界元法^[2]、有限差分法^[3-4]和有限元法^[5-6]。这些传统的数值求解的计算方法取决于网格的生成及划分,使计算过程艰巨而耗时。相较而言,无网格方法^[7]是一种仅仅基于节点的近似,形函数的构造是建立在一系列离散的局部节点上,从而摆脱了网格的束缚。该方法在处理网格畸变、大变形等问题时,与传统的数值方法相比,具有明显的优势。

1992年,Nayroles等人^[8]次将移动最小二乘近似和 Galerkin 弱形式耦合,提出了扩散单元法。由于扩散单元法的计算精度不高、边界条件不易施加。1994年,Belytschko等人^[9]对扩散单元法进行了改进,提出了无单元 Galerkin 法。在该方法中,构造形函数的移动最小二乘近似是由传统最小二乘方法发展而来的,故导致移动最小二乘近似形成病态的或奇异的代数方程组^[10-11]。此外,还要求移动最小二乘近似涉及矩阵的逆,这就会导致稳定性的降低和计算过程复杂,且增加了无单元 Galerkin 法误差。为了克服移动最小二乘近似的缺点,程玉民等人^[7]选取正交函数为基函数,得到了改进移动最小二乘近似。将改进移动最小二乘近似和 Galerkin 弱形式耦合,建立了改进无单元 Galerkin 法^[12-14]。改进无单元 Galerkin 方法的优点是改进移动最小二乘近似涉及的法矩阵是对角线化的,避免了求逆带来的计算效率降低。目前,改进无单元 Galerkin 方法具有更好的计算精度和数值稳定性,已经成为无网格方法中最重要的方法之一。

本文应用改进无单元 Galerkin 法分析非线性 Poisson-Boltzmann 方程边值问题。首先,借鉴已有文献^[10, 15]建立非线性 Poisson-Boltzmann 方程的改进单元 Galerkin 法,并推导了详细的计算公式。其次,借鉴文献^[15-16]的思想,给出了非线性方程的改进无单元 Galerkin 法理论误差分析。在文献^[12, 16]的改进移动最小二乘近似的误差基础上,利用文献^[15-17]的无单元 Galerkin 法误差计算过程,推导了 Sobolev 空间中非线性 Poisson-Boltzmann 方程边值问题的误差估计。最后,为了验证理论推导结果和说明改进无单元 Galerkin 法的性质,给出了相应的数值算例。

1 非线性 Poisson-Boltzmann 方程边值问题的改进无单元 Galerkin 法

1.1 变分公式

考虑在 (a, b) 内的边值问题

* 收稿日期:2018-11-08 修回日期:2019-03-06 网络出版时间:2019-07-15 12:30

资助项目:国家自然科学基金面上项目(No. 11471063);重庆市教育委员会科学技术研究重大项目(No. KJZDM201800501);重庆市自然科学基金(No. cstc2018jcyjAX0266;No. cstc2017jcyjAX0176)

第一作者简介:钟思瑶,女,研究方向为微分方程的数值解法,E-mail:1214140217@qq.com;通信作者:李小林,男,教授,E-mail:lxlmath@163.com

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/50.1165.N.20190715.1230.032.html>

$$\begin{cases} -\lambda^2 \frac{d^2 u}{dx^2} = g(x) + e^{-u}, x \in (a, b) \\ u(a) = c_1, u(b) = c_2 \end{cases}, \quad (1)$$

其中 $\lambda > 0$ 为一个物理参数。

由于改进移动最小二乘近似的形函数不满足 Kronecker- δ 函数特性,求解该问题时 Dirichlet 边界条件不易施加。通常解决方法是使用拉格朗日乘子法和罚函数法,但拉格朗日乘子会使得系数矩阵不正定导致计算量加大,故采用罚函数法^[18]。

引入罚因子 α (充分大),将原问题(1)式可近似为:

$$\begin{cases} -\lambda^2 \frac{d^2 u_a}{dx^2} = g(x) + e^{-u_a}, x \in (a, b) \\ -\lambda^2 u'_a(a) + \alpha u_a(a) = \alpha c_1 \\ \lambda^2 u'_a(b) + \alpha u_a(b) = \alpha c_2 \end{cases}. \quad (2)$$

接下来,把近似问题(2)式转换为等价的变分问题。设 $v \in H^1(a, b)$,以 $v(x)$ 乘微分方程的两端,在 (a, b) 上积分得:

$$-\lambda^2 \int_a^b \frac{d^2 u_a}{dx^2} v dx = \int_a^b g(x) v dx + \int_a^b e^{-u_a} v dx.$$

由第一格林公式得:

$$-\lambda^2 \int_a^b v \frac{d^2 u}{dx^2} dx = \lambda^2 \int_a^b \frac{dv}{dx} \cdot \frac{du}{dx} dx - \lambda^2 v(b) u'(b) + \lambda^2 v(a) u'(a), \quad (3)$$

则

$$\lambda^2 \int_a^b \frac{du_a}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha (u_a(a) v(a) + u_a(b) v(b)) = \int_a^b g(x) v dx + \int_a^b e^{-u_a} v dx + \alpha (c_1 v(a) + c_2 v(b)). \quad (4)$$

令

$$a_\alpha(u_a, v) = \lambda^2 \int_a^b u'_a \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha (u_a(a) v(a) + u_a(b) v(b)), \quad (5)$$

于是由(4)式得到变分问题:求 $u_a \in H^1(a, b)$,使得 $\forall v \in H^1(a, b)$,且

$$a_\alpha(u_a, v) = \int_a^b g(x) v dx + \int_a^b e^{-u_a} v dx + \alpha (c_1 v(a) + c_2 v(b)). \quad (6)$$

1.2 数值离散

为了得到改进无单元 Galerkin 法的数值解,令 $V_h(a, b) = \text{span}\{\varphi_i, 1 \leq i \leq N\}$,其中 φ_i 为改进移动最小二乘近似构造的形函数^[9]。

在无网格近似解空间 $V_h(a, b)$ 中,变分问题(6)式可近似为:

$$a_\alpha(u_h, v) = \int_a^b g(x) v dx + \int_a^b e^{-u_h} v dx + \alpha (c_1 v(a) + c_2 v(b)), \forall v \in V_h(a, b). \quad (7)$$

其中 $u_h \in V_h(a, b)$,可表示为 $u_h(x) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(x) u_i$ 。

由 v 的任意性,将 v 依次取为 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$, (7)式可以离散为如下方程组

$$(\mathbf{K} + \alpha \mathbf{G}) \mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) + \alpha \mathbf{F}, \quad (8)$$

其中 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_N)^T$, $[\mathbf{K}]_{ij} = \lambda^2 \int_a^b \frac{d\varphi_i}{dx} \cdot \frac{d\varphi_j}{dx} dx$, $[\mathbf{G}]_{ij} = \varphi_i(a) \varphi_j(a) + \varphi_i(b) \varphi_j(b)$, $[\mathbf{f}(\mathbf{u})]_i =$

$$\int_a^b g(x) \varphi_i dx + \int_a^b e^{(-\sum_{k=1}^N \varphi_k u_k)} \varphi_i dx, [\mathbf{F}]_i = c_1 \varphi_i(a) + c_2 \varphi_i(b), i, j = 1, 2, \dots, N.$$

显然 $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ 是非线性项,方程(8)式是非线性方程组,不能直接求解。本研究调用 MATLAB 的子程序 fslove 对它进行求解。该算法是牛顿方法的一种变体,它使用了对雅可比矩阵的有限差分近似,并采用预防措施以避免大步长或增加残差。

2 误差估计

定理 1 设 $u \in H^{r+1}(a, b)$ 为非线性 Poisson-Boltzmann 方程(1)式的解析解, u_h 为它的改进无单元 Galerkin

法式的数值解,则有如下误差:

$$\|u - u_h\|_{H^1(a,b)} \leq C(h^{\tilde{p}-1} + \alpha^{-1} + \alpha^{1/2}h^{\tilde{p}}). \quad (9)$$

其中 $\tilde{p} = \min(r, \hat{m}) + 1$, \hat{m} 为改进移动最小二乘近似中基函数的最大次数, C 是一个与 h 无关的常数.

证明 对于式定义的双线性形式,令:

$$\begin{aligned} \|v\|_a &\triangleq \sqrt{a_a(v,v)} = \sqrt{\lambda^2 \int_a^b \frac{dv}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha(v^2(a) + v^2(b))} = \\ &\sqrt{\lambda^2 \|v\|_{H^1(a,b)}^2 + \alpha(v^2(a) + v^2(b))} \leq \sqrt{C_\# \|v\|_{H^1(a,b)}^2 + \alpha(v^2(a) + v^2(b))}, \end{aligned} \quad (10)$$

因此,

$$C_* \|v\|_{H^1(a,b)} \leq \|v\|_a \leq C_\# \|v\|_{H^1(a,b)} + \alpha^{\frac{1}{2}} \sqrt{v^2(a) + v^2(b)}. \quad (11)$$

(6)式减去(7)式得

$$a_a(u_a - u_h, v) = 0, \forall v \in V_h(a,b),$$

令 Su_a 为 u_a 的移动最小二乘近似,则 $Su_a - u_h \in V_h(a,b)$ 有 $a_a(u_a - u_h, Su_a - u_h) = 0$. 所以,

$$\begin{aligned} \|u_a - u_h\|_a^2 &= a_a(u_a - u_h, u_a - u_h) = a_a(u_a - u_h, u_a - Su_a + Su_a - u_h) = \\ &a_a(u_a - u_h, u_a - Su_a) \leq C_a \|u_a - u_h\|_a \|u_a - Su_a\|_a. \end{aligned} \quad (12)$$

因此,由(11)~(12)式得:

$$\begin{aligned} \|u_a - u_h\|_{H^1(a,b)} &\leq C_*^{-1} \|u_a - u_h\|_a \leq C_*^{-1} C_a \|u_a - Su_a\|_a \leq \\ &C_*^{-1} C_a (C_\# \|u_a - Su_a\|_{H^1(a,b)} + \alpha^{\frac{1}{2}} \sqrt{(u_a(a) - Su_a(a))^2 + (u_a(b) - Su_a(b))^2}). \end{aligned} \quad (13)$$

由文献[15]得

$$\|u_a - Su_a\|_{H^1(a,b)} \leq Ch^{\tilde{p}-1}, |u_a(a) - Su_a(a)| \leq Ch^{\tilde{p}}, |u_a(b) - Su_a(b)| \leq Ch^{\tilde{p}}. \quad (14)$$

将(14)式代入(13)式得

$$\|u_a - u_h\|_{H^1(a,b)} \leq C_1 (h^{\tilde{p}-1} + \alpha^{\frac{1}{2}} h^{\tilde{p}}), \quad (15)$$

设 $\omega \in H^1(a,b)$ 是下列问题的解:

$$\begin{cases} -\lambda^2 \frac{d^2 \omega}{dx^2} = 0, x \in (a,b) \\ \omega(a) = -\lambda^2 u'(a), \omega(b) = \lambda^2 u'(b) \end{cases}. \quad (16)$$

令

$$u(x) = u_a(x) + \alpha^{-1} \omega(x) + \zeta(x), \quad (17)$$

则

$$\|u - u_h\|_{H^1(a,b)} \leq \|u_a - u_h\|_{H^1(a,b)} + \alpha^{-1} \|\omega\|_{H^1(a,b)} + \|\zeta\|_{H^1(a,b)}, \quad (18)$$

$$a_a(\zeta, v) = a_a(u, v) - a_a(u_a, v) - \alpha^{-1} a_a(\omega, v), v \in H^1(a,b). \quad (19)$$

应用第一格林公式(3)式得

$$\begin{aligned} a_a(u, v) &= \lambda^2 \int_a^b \frac{du}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha(u(a)v(a) + u(b)v(b)) = \\ &-\lambda^2 \int_a^b v \frac{d^2 u}{dx^2} dx + \lambda^2 v(b)u'(b) - \lambda^2 v(a)u'(a) + \alpha(u(a)v(a) + u(b)v(b)), \end{aligned}$$

再调用问题(1)式得

$$a_a(u, v) = \int_a^b g(x)v dx + \int_a^b e^{-u} v dx + \lambda^2 v(b)u'(b) - \lambda^2 v(a)u'(a) + \alpha(c_1 v(a) + c_2 v(b)), \quad (20)$$

又由(16)式有 $\omega(a) = -\lambda^2 u'(a)$, $\omega(b) = \lambda^2 u'(b)$, 所以:

$$\begin{aligned} a_a(\omega, v) &= \lambda^2 \int_a^b \frac{d\omega}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha(\omega(a)v(a) + \omega(b)v(b)) = \\ &\lambda^2 \int_a^b \frac{d\omega}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx + \alpha(\lambda^2 u'(b)v(b) - \lambda^2 u'(a)v(a)). \end{aligned} \quad (21)$$

将(20)~(21)和(5)式代入(19)式得:

$$a_\alpha(\zeta, v) = \int_a^b (e^{-u} - e^{-u_\alpha}) v dx - \alpha^{-1} \lambda^2 \int_a^b \frac{d\omega}{dx} \cdot \frac{dv}{dx} dx, v \in H^1(a, b). \quad (22)$$

令 $v = \zeta$ 有:

$$\|\zeta\|_\alpha^2 \leq C_2 \|u - u_\alpha\|_{L^2(a, b)} \|\zeta\|_{L^2(a, b)} + C_3 \alpha^{-1} (\|\nabla \omega\|_{L^2(a, b)} \|\nabla \zeta\|_{L^2(a, b)}), \quad (23)$$

由(17)式得:

$$\|u - u_\alpha\|_{L^2(a, b)} = \|\alpha^{-1} \omega + \zeta\|_{L^2(a, b)} \leq \alpha^{-1} \|\omega\|_{L^2(a, b)} + \|\zeta\|_{L^2(a, b)}, \quad (24)$$

将(24)式代入(23)式得:

$$\begin{aligned} \|\zeta\|_\alpha^2 \leq C_2 (\alpha^{-1} \|\omega\|_{L^2(a, b)} + \|\zeta\|_{L^2(\Omega)}) \|\zeta\|_{L^2(a, b)} + C_3 \alpha^{-1} (\|\nabla \omega\|_{L^2(a, b)} \|\nabla \zeta\|_{L^2(a, b)}) \leq \\ C_2 \|\zeta\|_{L^2(a, b)}^2 + C_4 \alpha^{-1} \|\omega\|_{H^1(a, b)} \|\zeta\|_{H^1(a, b)}. \end{aligned}$$

结合双线性形式 $a_\alpha(\cdot, \cdot)$ 的定义(10)式得:

$$\|\zeta\|_\alpha^2 = C_\zeta \|\nabla \zeta\|_{L^2(a, b)} + \alpha (\zeta^2(a) + \zeta^2(b)),$$

则

$$C_\zeta \|\nabla \zeta\|_{L^2(a, b)} - C_2 \|\zeta\|_{L^2(a, b)} + \alpha (\zeta^2(a) + \zeta^2(b)) \leq C_4 \alpha^{-1} \|\omega\|_{H^1(a, b)} \|\zeta\|_{H^1(a, b)},$$

因此

$$\|\zeta\|_{H^1(a, b)} \leq C \alpha^{-1} \|\omega\|_{H^1(a, b)}. \quad (25)$$

最后将(15)、(25)式代入(18)式整理可得到(9)式。

证毕

定理 1 的误差是由处理 Dirichlet 边界使用罚函数法中罚因子 α 带来的。从(9)式可看出,罚因子过大或过小会导致误差增加。故取罚因子 $\alpha = C_a h^{-\frac{2(\min(r, \hat{m})+1)}{3}}$, 其中 C_a 是一个常数,使误差达到最佳的收敛速度。当 $\hat{m} = 1$ 且 $r \geq 1$ 时,有 $\alpha = C_a h^{-\frac{4}{3}}$,改进无单元 Galerkin 法的解以 h 的最优收敛速度在 $H^1(a, b)$ 空间中收敛于数值解;当 $\hat{m} = 2$ 且 $r \geq 2$ 时,有 $\alpha = C_a h^{-2}$,改进无单元 Galerkin 法的解以 h^2 的最优收敛速度在 $H^1(a, b)$ 空间中收敛于数值解。下面的算例在没有说明的情况下,改进移动最小二乘近似的基函数选择 $\hat{m} = 2$,则 $\alpha = C_a h^{-2}$ 。

3 数值算例

算例 1 考虑如下边值问题^[1]:

$$\begin{cases} -\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\pi^2 \sin(\pi x) - e^{\sin(\pi x)+x} + e^{-u(x)}, x \in (0, 1) \\ u(0) = 0, u(1) = -1 \end{cases}.$$

该问题的解析解为 $u(x) = -\sin(\pi x) - x$ 。

图 1 给出了 u 及它的导数 $\frac{du}{dx}$ 的改进无单元 Galerkin 法数值解和解析解。在计算过程中,使用了 21 个等距节点。从图 1 中可看出,数值解和解析解具有很好的一致性。

为了研究罚因子 α 对误差的影响,图 2 展示了罚因子 α 与误差之间的关系。在计算过程中,分别采用了 21、41、81 和 161 个等距节点。从图中可以观察到,一个太小或太大的罚因子 α 会使误差增大。在罚因子太小的情况下,定理 1 表明了误差由(9)式的右端第二项支配,理论收敛速度为 α^{-1} ,误差与罚因子成反比。显然,图 2 展示了误差随着惩罚因子的增加而减小($\log_{10} \alpha \leq 5$),且实验收敛速度与理论基本吻合。反之,当罚因子太大的情况下,定理 1 指出误差由(9)式的右端第三项支配,误差与罚因子成正比。同时图 2 也展示了误差随着惩罚因子的增加而增加($\log_{10} \alpha \geq 9$),证实了理论结果。

通过图 2 也可以观察出节点间距 h 和罚因子 α 有关, $\hat{m} = 1$ 时罚因子取 $\alpha = C_a h^{-\frac{4}{3}}$ 或 $\hat{m} = 2$ 时罚因子取 $C_a h^{-2}$ 。为了研究参数 C_a 对收敛性的影响,图 3 展示了不同的 C_a 情形下的误差。当实验收敛速度接近 1 或 2 时,收敛性很少受到参数 C_a 的影响。这些数值结果也与理论结果一致。

由图 4 给出了 $\hat{m} = 1$ 和 $\hat{m} = 2$ 时,文献[1]中的间断 Galerkin 方法和改进无单元 Galerkin 法在 H^1 范数下的误差。从图中可以看出改进无单元 Galerkin 法比文献[1]中的间断 Galerkin 的方法所产生的误差要小。

算例 2 考虑如下边值问题:

$$\begin{cases} -\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\frac{63}{4}|x|^{2.5} - e^{-|x|^{4.5}} + e^{-u(x)}, x \in (-1, 1) \\ u(-1) = 1, u(1) = 1 \end{cases}.$$

该问题的解析解为 $u(x) = |x|^{4.5}$ 。

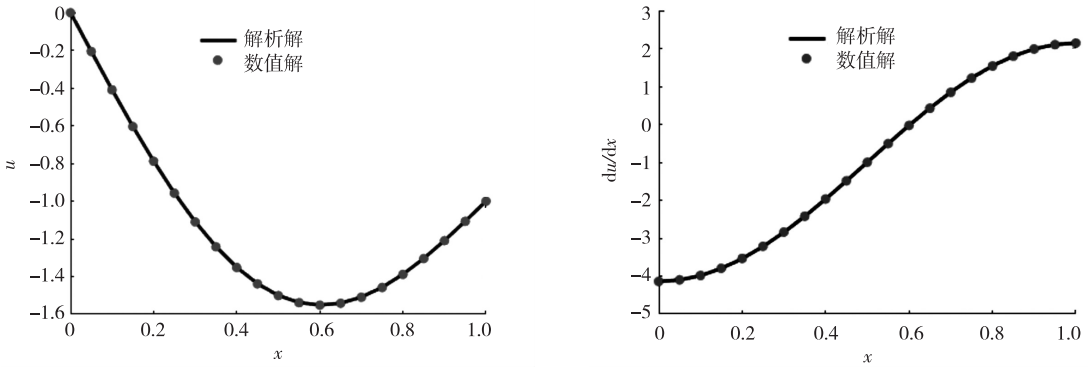


图 1 算例 1 中 u 和 $\frac{du}{dx}$ 的数值解和解析解

Fig. 1 Numerical and analytical solutions of u and $\frac{du}{dx}$ for example 1

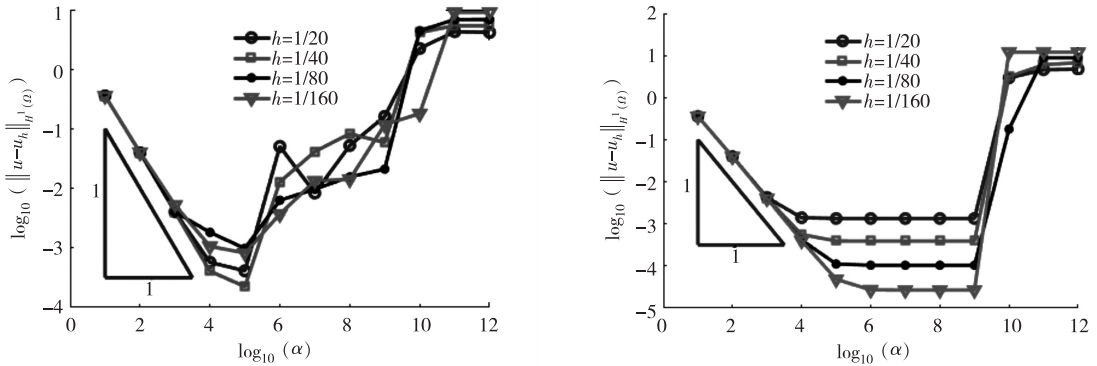


图 2 $\hat{m}=1$ 和 $\hat{m}=2$ 时, 罚因子 α 的影响

Fig. 2 Influence of the penalty factor α for $\hat{m}=1$ and $\hat{m}=2$

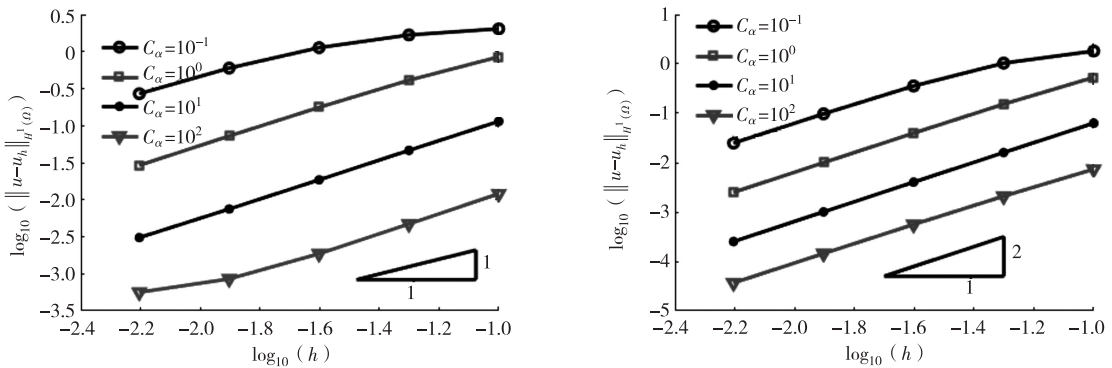


图 3 $\hat{m}=1$ 和 $\hat{m}=2$ 时, 变化的罚因子对收敛性的影响

Fig. 3 Convergence for variable penalty factors for $\hat{m}=1$ and $\hat{m}=2$

图 5 给出了 u 及它的导数 $\frac{du}{dx}$ 的改进无单元 Galerkin 法数值解和解析解。在计算过程中, 使用了 21 个等距节点。从图 5 中可看出, 数值解和解析解具有很好的一致性。

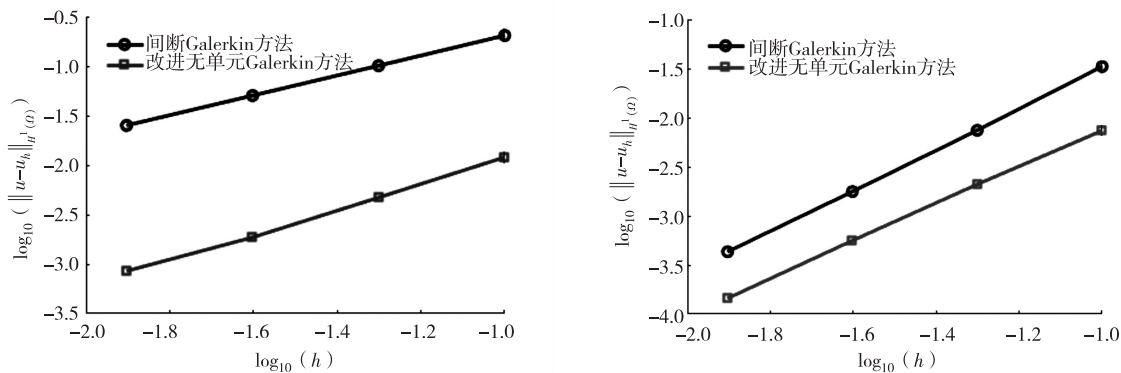


图 4 $\hat{m}=1$ 和 $\hat{m}=2$ 时,间断 Galerkin 方法和改进无单元 Galerkin 法误差

Fig. 4 Error of the discontinuous Galerkin and improving free-element Galerkin methods for $\hat{m}=1$ and $\hat{m}=2$

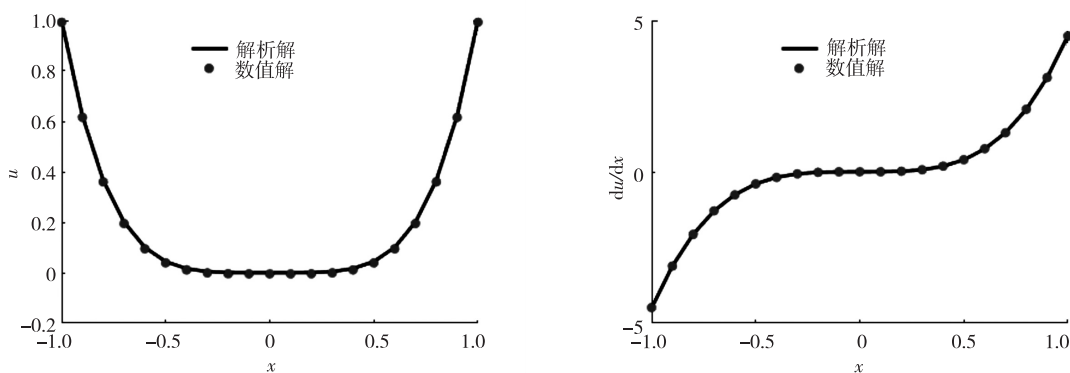


图 5 算例 2 中 u 和 $\frac{du}{dx}$ 的数值解和解析解

Fig. 5 Numerical and analytical solutions of u and $\frac{du}{dx}$ for example 2

图 6 给出了节点间距 h 和误差的 log-log 图像。从图 6 可以看出,实验收敛速度接近 2,与理论相吻合。

4 结论

用改进无单元 Galerkin 法求解了非线性 Poisson-Boltzmann 方程边值问题,给出了详细的数值计算公式,在 Sobolev 空间中建立并推导了该方法的误差估计公式。数值解的误差展现了较高的计算精度和稳定的数值结果,从误差分析的过程中可以看出,误差随节点间距的减小而降低。数值算例验证了理论分析结果。

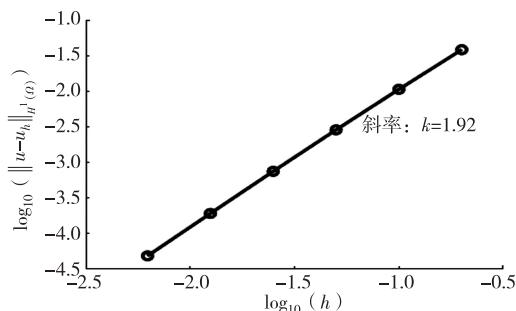


图 6 算例 2 的误差和收敛性

Fig. 6 Error and convergence for example 2

参考文献:

[1] MENG Y P, HUANG Y Q, LIU H L. An iterative discontinuous Galerkin method for solving the nonlinear Poisson Boltzmann equation[J]. Communications in Computational Physics, 2014, 16(2): 491-515.

[2] LU B Z, CHENG X L, HUANG J F. AFMPB: An adaptive fast multipole Poisson-Boltzmann solver for calculating electrostatics in biomolecular systems[J]. Computer Physics Communications, 2010, 181(6): 1150-1160.

[3] BOSCHITSCH A H, FENLEY M O. Hybrid boundary element and finite difference method for solving the nonlinear Poisson-Boltzmann equation[J]. Journal of Computational Chemistry, 2004, 25(7): 935-955.

[4] QIAO Z H, LI Z L, TANG T. A finite difference scheme for solving the nonlinear Poisson-Boltzmann equation modeling charged spheres[J]. Comput Math, 2006, 24(3): 252-264.

[5] CHEN L, HOST M J, XU J C. The finite element approximation of the nonlinear Poisson-Boltzmann equation[J]. SI-

- AM Journal on Numerical Analysis, 2007, 45(6): 2298-2320.
- [6] HOLST M, Mc CAMMOM J A, YU Z, et al. Adaptive finite element modeling techniques for the Poisson-Boltzmann equation[J]. Communications in Computational Physics. 2012, 11(1): 179-214.
- [7] 程玉民. 无网格方法[M]. 北京: 科学出版社, 2015.
CHENG Y M. Meshless method[M]. Beijing: Science Press, 2015.
- [8] NAYROLES B, TOUZOT G, VILLON P. Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements[J]. Computational Mechanics. 1992, 10(5): 307-318.
- [9] BELYTSCHKO T, LU Y Y, GU L. Element-free Galerkin methods[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1994, 37(2): 229-256.
- [10] LI X L, LI S L. On the stability of the moving least squares approximation and element-free Galerkin method[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2016, 72(6): 1515-1531.
- [11] LI X L, WANG Q Q. Analysis of the inherent instability of the interpolating moving least squares method when using improper polynomial bases[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2016, 73: 21-34.
- [12] LI X L, ZHANG S. Meshless analysis and applications of a symmetric improved Galerkin boundary node method using the improved moving least square approximation[J]. Applied Mathematical Modelling, 2016, 40(4): 2875-2896.
- [13] ZHANG Z, WANG J F, CHENG Y M, et al. The improved element-free Galerkin method for three-dimensional transient heat conduction problems[J]. Science China (Physics Mechanics & Astronomy) 2013, 56(8): 1568-1580.
- [14] ZHANG L W, DENG Y J, LIEW K M. An improved element-free Galerkin method for numerical modeling of the biological population problems[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2014, 40(40): 181-188.
- [15] TANG Y Z, LI X L. Meshless analysis of an improved element-free Galerkin method for linear and nonlinear elliptic problems[J]. Chinese Physics B, 2017, 26(3): 215-225.
- [16] LI X L, CHEN H, WANG Y. Error analysis in sobolev spaces for the improved moving least-square approximation and the improved element-free Galerkin method[J]. Applied Mathematics and Computation, 2015, 262: 56-78.
- [17] LI X L. Error estimates for the moving least-square approximation and the element-free Galerkin method in n-dimensional spaces [J]. Applied Numerical Mathematics, 2016, 99: 77-97.
- [18] ZHU T, ATLURI S N. A modified collocation method and a penalty formulation for enforcing the essential boundary conditions in the element free Galerkin method[J]. Computational Mechanics, 1998, 21(3): 211-222.

Analysis of the Improved Element-Free Galerkin Method for Nonlinear Poisson-Boltzmann Equation

ZHONG Siyao, LI Xiaolin

(School of Mathematical Sciences, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

Abstract: [Purposes] The nonlinear Poisson-Boltzmann equation is solved and analyzed by the improved element-free Galerkin method. [Methods] Combining the improved moving least square approximation with Galerkin weak form, the improved element-free Galerkin method is established for the nonlinear Poisson-Boltzmann equation. Based on the error results of the improved moving least square approximation, the error of the improved element-free Galerkin method for nonlinear Poisson-Boltzmann equation is derived theoretically. [Findings] Error estimation is obtained in the Sobolev space. Numerical examples verify the theoretical analysis. [Conclusions] The method has higher calculation accuracy and better stability. The errors decrease as the nodal spacing reduces.

Keywords: meshless method; improved element-free Galerkin method; nonlinear Poisson-Boltzmann equation; error estimation

(责任编辑 许 甲)