

一种三维 Poisson-Nernst-Planck 方程的虚单元计算

丁聪¹, 刘杨², 阳莺¹, 沈瑞刚¹

- (1. 桂林电子科技大学 数学与计算科学学院, 广西应用数学中心(GUET),
广西高校数据分析与计算重点实验室, 广西 桂林 541004;
2. 湘潭大学 数学与计算科学学院, 湖南 湘潭 411105)

摘要: 利用虚单元方法在多面体网格上求解一种三维稳态 Poisson-Nernst-Planck (PNP) 方程, 并给出 PNP 方程的虚单元离散形式, 推导电势方程及离子浓度方程的刚度矩阵与荷载向量的矩阵表达式. 数值实验结果表明, 在 3 种不同的多面体网格下实现了 PNP 方程的虚单元计算, 数值解在 L^2 和 H^1 范数下均达到最优阶.

关键词: Poisson-Nernst-Planck 方程; 虚单元方法; 多面体网格; 三维

中图分类号: O241.82 **文献标志码:** A **文章编号:** 1671-5489(2024)02-0293-09

Virtual Element Computation for a Three-Dimensional Poisson-Nernst-Planck Equations

DING Cong¹, LIU Yang², YANG Ying¹, SHEN Ruigang¹

- (1. Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Data Analysis and Computation,
Guangxi Applied Mathematics Center (GUET), School of Mathematics and Computing Science,
Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, Guangxi Zhuang Autonomous Region, China;
2. School of Mathematics and Computational Science, Xiangtan University, Xiangtan 411105, Hunan Province, China)

Abstract: The virtual element method was used to solve a three-dimensional steady-state Poisson-Nernst-Planck (PNP) equations on polyhedral meshes. The virtual element discrete forms of the PNP equations were given, and the matrix expressions of the stiffness matrix and the load vector of the electric potential equation and ion concentration equation were derived. The numerical experimental results show that the virtual element computation of PNP equations is realized in three different polyhedral meshes, and the numerical solutions reach the optimal order in both L^2 and H^2 norms.

Keywords: Poisson-Nernst-Planck equation; virtual element method; polyhedral mesh; three-dimension

PNP(Poisson-Nernst-Planck)方程^[1]是由 Poisson 方程和 NP(Nernst-Planck)方程耦合而成的一类非线性偏微分方程系统, 常用于描述电扩散反应过程, 在半导体^[2]、电化学系统^[3]和生物膜通道^[4]等领域应用广泛.

PNP 方程因其自身的强耦合性和非线性性, 使得对该方程的求解较困难, 且在极少情况下有解析

收稿日期: 2023-06-27.

第一作者简介: 丁聪(1998—), 男, 汉族, 硕士研究生, 从事偏微分方程数值求解的研究, E-mail: dingcongup@qq.com. 通信

作者简介: 阳莺(1976—), 女, 汉族, 博士, 教授, 从事偏微分方程数值求解的研究, E-mail: yangying@lsec.cc.ac.cn.

基金项目: 广西科技基地和人才专项基金(批准号: 桂科 AD23026048)和国家自然科学基金(批准号: NSFC12161026; 12101595).

解. 早期求解 PNP 方程的主要方法为有限元^[5]、有限差分^[6]和有限体积^[7]等方法, 其中: 有限差分法易于编程实现, 但不适用于非规则区域; 有限体积法能处理非结构化网格和复杂的边界条件, 但由于高阶控制体设计困难, 因此很难达到较高的精度; 有限元方法因适用于处理不规则几何形状区域和复杂边界问题而被广泛应用, 在求解一些 PNP 方程中取得了很好的效果. 但经典的有限元方法精度依赖于网格质量, 对具有复杂界面的 PNP 方程效果不佳. Beirão 等^[8]提出的虚单元法具有更好的网格适应性, 对于多边形或多面体单元, 甚至包含非凸单元组成的网格剖分, 虚单元法都可以进行灵活计算; 文献^[9]阐述了虚单元方法的理论发展, 通过介绍虚单元方法在 Poisson 方程、线弹性、非线性等问题中的应用, 展现了虚单元方法在工程科学计算领域的巨大潜力; 刘杨^[10]对一类二维 PNP 方程设计了相应的虚单元格式, 并给出了其在 H^1 范数下的误差估计; Su 等^[11]在多面体网格上提出了 PNP 方程的保正和自由能耗散混合格式, 并给出了离子浓度的正性及自由能耗散等性质, 但仅对 Poisson 方程使用虚单元法, 而对 NP 方程采用有限体积法求解.

本文采用虚单元方法计算三维稳态 PNP 方程, 介绍了虚单元空间、自由度以及虚单元方法中三类投影算子的定义, 给出三维稳态 PNP 方程的虚单元离散形式, 并利用投影算子的张量形式对虚单元离散下 PNP 方程的刚度矩阵和荷载向量矩阵给出表达式. 将 PNP 耦合系统解耦成单个的子方程进行求解, 对 Poisson 方程的虚单元解 ϕ_h 的梯度利用虚单元投影算子做近似, 再代入 NP 方程的非线性项中形成耦合迭代. 进行三维 PNP 模型问题的数值实验结果表明, 虚单元解在 L^2 和 H^1 范数下都达到最优阶, 说明虚单元方法对于三维稳态 PNP 方程的计算有效.

1 预备知识

记 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ 是具有 Lipschitz 边界的有界空间区域. 采用标准的 Sobolev 空间记号 $W^{s,p}(\Omega)$ 以及相关的范数和半范数的定义 $\|\cdot\|_{W^{s,p}(\Omega)} = \|\cdot\|_{s,p,\Omega}$, $|\cdot|_{s,p,\Omega}$, 且 $W_0^{s,p} = H_0^s(\Omega) \cap W^{s,p}(\Omega)$. 当 $p=2$ 时, 记 $H^s(\Omega) = W^{s,2}(\Omega)$, $H_0^1(\Omega) = \{v \mid v \in H^1(\Omega); v|_{\partial\Omega} = 0\}$. 用 $(\cdot, \cdot)_\Omega$ 表示 $L^2(\Omega)$ 中标准的 L^2 内积.

考虑如下形式的三维稳态 PNP 方程^[1]:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\nabla p^i + q^i p^i \nabla \phi) = F_i, & \text{在 } \Omega \text{ 内}, i=1,2, \\ -\nabla \cdot (\nabla \phi) - \sum_{i=1}^2 q^i p^i = F_3, & \text{在 } \Omega \text{ 内}, \end{cases} \quad (1)$$

及齐次 Dirichlet 边界条件

$$\begin{cases} p^i = 0, & \text{在 } \partial\Omega \text{ 上}, i=1,2, \\ \phi = 0, & \text{在 } \partial\Omega \text{ 上}, \end{cases} \quad (2)$$

其中未知函数 p^i 表示带电量为 q^i 的第 i 种离子的浓度, ϕ 表示静电势, $F_i (i=1,2,3)$ 为反应源项.

对 $\forall u, v, \phi, u_1, u_2 \in H_0^1(\Omega)$, 令

$$a(u, v) = (\nabla u, \nabla v), \quad b_i(u_i, \phi, v) = (q^i u_i \nabla \phi, \nabla v), \quad \tilde{b}_i(u_1, u_2, v) = \left(\sum_{i=1}^2 q^i u_i, v \right).$$

则方程(1)-(2)对应的连续变分问题为: 求 $p^i \in H_0^1(\Omega) (i=1,2)$ 和 $\phi \in H_0^1(\Omega)$, 满足

$$\begin{cases} a(p^i, v) + b_i(p^i, \phi, v) = (F_i, v), & \forall v \in H_0^1(\Omega), i=1,2, \\ a(\phi, w) + \tilde{b}_i(p^1, p^2, w) = (F_3, w), & \forall w \in H_0^1(\Omega). \end{cases} \quad (3)$$

2 PNP 方程的虚单元离散

2.1 虚单元空间

记 \mathcal{T}^h 是 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ 上的多面体网格剖分, P 表示 \mathcal{T}^h 中的任意单元. $\mathbf{V}_i := (x_i, y_i, z_i)$ 为单元 P 的顶点, N^V 为单元 P 的顶点个数, $|P|$ 为单元 P 的体积, h_P 为单元 P 的尺寸, $h := \max\{h_P; P \in \mathcal{T}^h\}$. 令 $\mathbf{x}_P := (x_P, y_P, z_P)$ 为单元 P 的重心. 对网格 \mathcal{T}^h 做如下假设: 存在常数 $C_{\mathcal{T}^h} > 0$, 使得对每个多面体单元

$\mathcal{P} \in \mathcal{T}^h$ 满足以下条件^[12]:

- 1) 任意多面体 $P \in \mathcal{T}^h$ 相对于半径 $\geq C_{\mathcal{T}^h} h_p$ 的球的每一点呈星形;
- 2) 对于任意一个面 $f \in \partial P$, 有 $h_f \geq C_{\mathcal{T}^h} h_p$ 且 f 对半径 $\geq C_{\mathcal{T}^h} h_p$ 的圆盘的每一点都呈星形;
- 3) 对于任意一个边 $e \in \partial f$, 有 $|e| \geq C_{\mathcal{T}^h} h_p$.

记 $\mathcal{P}_k(P)$ 是 P 上次数 $\leq k$ 的多项式空间, $n_k := \dim(\mathcal{P}_k(P)) = \frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{6}$ 是多项式空间的维数. 给定一个三重指标 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, 记 $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, 则单项式空间 $\mathcal{M}_k(P)$ 定义为

$$\mathcal{M}_k(P) := \left\{ m_\alpha \mid m_\alpha := \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_P}{h_P} \right)^\alpha, 0 \leq |\alpha| \leq k \right\}.$$

引入空间 $\tilde{\mathcal{Q}}_h^k(P)$, 由文献[13]知, 对 $\forall P \in \mathcal{T}^h$, 有

$$\tilde{\mathcal{Q}}_h^k(P) = \{ v \in H^1(P); v|_{\partial P} \in C^0(\partial P), v|_p \in \mathcal{P}_k(p), \forall p \in \partial P, \Delta v \in \mathcal{P}_k(P) \}.$$

在 $(\nabla \cdot, \nabla \cdot)_{0,P}$ 内积下定义椭圆投影算子 $\Pi_k^\nabla: H^1(P) \rightarrow \mathcal{P}_k(P)$, $\forall v \in H^1(P)$ 满足

$$\begin{cases} (\nabla(\Pi_k^\nabla v - v), \nabla q)_{0,P} = 0, & \forall q \in \mathcal{P}_k(P), \\ P_0(\Pi_k^\nabla v - v) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

其中

$$P_0(v) = \begin{cases} \frac{1}{N^V} \sum_{i=1}^{N^V} v(\mathbf{V}_i), & k=1, \\ \frac{1}{|P|} \int_P v \, d\mathbf{x}, & k \geq 2. \end{cases}$$

在 L^2 内积下定义 L^2 投影算子 $\Pi_k^0: L^2(P) \rightarrow \mathcal{P}_k(P)$, 对 $\forall v \in L^2(P)$ 满足

$$(v - \Pi_k^0 v, q)_{0,P} = 0, \quad \forall q \in \mathcal{P}_k(P). \quad (5)$$

定义局部虚单元空间为

$$\mathcal{Q}_h^k(P) = \{ v_h \in \tilde{\mathcal{Q}}_h^k(P); (v_h - \Pi_k^\nabla v_h, q)_P = 0, \forall q \in (\mathcal{P}_k / \mathcal{P}_{k-2}(P)) \},$$

其中 $\mathcal{P}_k / \mathcal{P}_{k-2}(P)$ 表示 $\mathcal{P}_k(P)$ 中与 $\mathcal{P}_{k-2}(P)$ L^2 正交的多项式集合.

下面介绍自由度 $\text{dof}_i(v_h)$ 的定义, 对 $\forall v_h \in \mathcal{Q}_h^k(P)$, 选择如下自由度^[14]:

1) v_h 为在单元 P 每个顶点处的函数值;

2) 当 $k > 1$ 时, v_h 在单元 P 的每条边 e 上与单项式空间 $\mathcal{M}_{k-2}(e)$ 中所有单项式 m 乘积的积分平均值, 即 $|e|^{-1} (m, v_h)_{0,e}$, $\forall m \in \mathcal{M}_{k-2}(e)$; v_h 在单元 P 的每个面 f 上与单项式空间 $\mathcal{M}_{k-2}(f)$ 中所有单项式 m 乘积的积分平均值, 即 $|f|^{-1} (m, v_h)_{0,f}$, $\forall m \in \mathcal{M}_{k-2}(f)$; v_h 在单元 P 的内部与单项式空间 $\mathcal{M}_{k-2}(P)$ 中所有单项式 m 乘积的积分平均值, 即 $|P|^{-1} (m, v_h)_{0,P}$, $\forall m \in \mathcal{M}_{k-2}(P)$.

对上述自由度引入相应的基函数系 $\Phi_k := (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}})$, 其中 N^{dof} 是单元 P 上的自由度数, 分别满足 $\text{dof}_i(\phi_j) = \delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, \dots, N^{\text{dof}}$), 易验证, $\forall v_h \in \mathcal{Q}_h^k(P)$ 均可写成如下形式: $v_h = \sum_{i=1}^{N^{\text{dof}}} \text{dof}_i(v_h) \phi_i$. 利用上述定义的局部虚单元空间可给出整体虚单元空间的定义为

$$\mathcal{Q}_h^k = \{ v_h \in H^1(\Omega); v_h|_P \in \mathcal{Q}_h^k(P), \forall P \in \mathcal{T}^h \}.$$

2.2 虚单元离散形式

首先, 对任意的 $u_h, v_h, \phi_h, u_1^h, u_2^h \in Q_h^k(P)$, 构造局部虚单元离散形式^[10]如下:

$$a_h^P(u_h, v_h) := \int_P [\Pi_{k-1}^0 \nabla u_h] \cdot [\Pi_{k-1}^0 \nabla v_h] dx + S^P((I - \Pi_k^\nabla) u_h, (I - \Pi_k^\nabla) v_h),$$

$$\tilde{a}_h^P(u_h, v_h) := \int_P [\nabla \Pi_k^\nabla u_h] \cdot [\nabla \Pi_k^\nabla v_h] dx + S^P((I - \Pi_k^\nabla) u_h, (I - \Pi_k^\nabla) v_h),$$

$$b_{i,h}^P(u_h, \phi_h, v_h) := \int_P q^i [\Pi_{k-1}^0 u_h] [\Pi_{k-1}^0 \nabla \phi_h] \cdot [\Pi_{k-1}^0 \nabla v_h] dx, \quad i = 1, 2,$$

$$\tilde{b}_h^P(u_1^h, u_2^h, v_h) := - \int_P [\Pi_{k-1}^0 \left(\sum_{i=1}^2 q^i u_i^h \right)] [\Pi_{k-1}^0 \nabla v_h] dx,$$

$$(F_{i,h}, v)_P := \int_P F_i \Pi_{k-1}^0 v_h dx, \quad (f_h, v)_P := \int_P f \Pi_{k-1}^0 v_h dx,$$

其中 $S^P(u_h, v_h)$ 是定义在 $\mathcal{Q}_h^k(P) \times \mathcal{Q}_h^k(P)$ 上的对称双线性型, 满足: 存在不依赖于网格剖分的 C_* 和 C^* [15], $0 < C_* \leq C^*$, 使得

$$C_* a^P(u_h, v_h) \leq S^P(u_h, v_h) \leq C^* a^P(u_h, v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{Q}_h^k(P) \text{ 且 } \Pi_k^\nabla v_h = 0,$$

$a^P(\cdot, \cdot)$ 是 $a(\cdot, \cdot)$ 在每个单元 P 上的局部形式. 下面定义全局虚单元离散形式:

$$a_h(u_h, v_h) := \sum_P a_h^P(u_h, v_h), \quad b_{i,h}(u_h, \phi_h, v_h) := \sum_P b_{i,h}^P(u_h, \phi_h, v_h), \quad i=1, 2,$$

$$(F_{i,h}, v_h) = \sum_P (F_{i,h}, v_h)_P, \quad (f_h, v_h) = \sum_P (f_h, v_h)_P,$$

$$\tilde{a}_h(u_h, v_h) := \sum_P \tilde{a}_h^P(u_h, v_h), \quad \tilde{b}_h(u_1^h, u_2^h, v_h) = \sum_P \tilde{b}_h^P(u_1^h, u_2^h, v_h).$$

方程(1)-(2)的虚单元离散形式为: 求解 $p^i \in \mathcal{Q}_h^k (i=1, 2)$ 和 $\phi_h \in \mathcal{Q}_h^k$, 使得

$$\begin{cases} a_h(p^i, v_h) + b_{i,h}(p^i, \phi_h, v_h) = (F_{i,h}, v_h), & \forall v_h \in \mathcal{Q}_h^k, \quad i=1, 2, \\ \tilde{a}_h(\phi_h, w_h) + \tilde{b}_h(p_1^h, p_2^h, w_h) = (F_{3,h}, w_h), & \forall w_h \in \mathcal{Q}_h^k. \end{cases} \quad (6)$$

文献[16]给出了方程(6)的虚单元解在二维情形下的误差估计结果, 可将该结果直接推广到三维情形(其证明过程完全类似).

定理 1 [16] 设 (ϕ, p^i) 和 $(\phi_h, p_h^i) (i=1, 2)$ 分别是方程(1)和方程(6)的解. 若 $p^i, \phi \in H^{k+1}(\Omega)$, $F_i \in H^{k+1}(\Omega)$, 对任意的单元 $P \in \mathcal{T}^h$, 有 $p^i|_P \in W^{0,\infty}(P)$, $\phi|_P \in W^{k+1,\infty}(P)$ 且 $\phi_h|_P \in W^{1,\infty}(P)$, 则

$$\|\phi - \phi_h\|_1 + \sum_{i=1}^2 \|p^i - p_h^i\|_1 \leq C(h^k + \sum_{i=1}^2 \|p^i - p_h^i\|_0).$$

当 $\|p^i - p_h^i\|_0 \leq Ch^k$ 时, 在满足定理 1 的假设下, 有 $\|\phi - \phi_h\|_1 + \sum_{i=1}^2 \|p^i - p_h^i\|_1 \leq Ch^k$.

文献[16-17]研究表明, 对于稳态 PNP 方程, 由于其具有特殊的非线性耦合项 $p^i \nabla \phi$, 因此对 L^2 模的误差估计很困难.

3 三维稳态 PNP 方程虚单元计算的矩阵形式

下面给出 PNP 方程的刚度矩阵和荷载向量矩阵形式的推导过程, 刚度矩阵和荷载向量用投影算子的张量表示. 先参考文献[13]给出投影算子 Π_k^∇ 和 Π_{k-1}^0 的定义及其张量形式, 并将文献[10]中投影算子 Π_{k-1}^0 的定义及张量形式推广到三维情形.

3.1 虚单元法投影算子及其张量形式

首先介绍投影算子 Π_k^∇ . 对每个虚单元基函数 ϕ_i , 设 α_{ij} 表示 $\Pi_k^\nabla \phi_i$ 在基 m_j 下的系数, 则有

$$\Pi_k^\nabla \phi_i = \sum_{j=1}^{n_k} \alpha_{ij} m_j = \mathcal{M}_k \boldsymbol{\alpha}_i,$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{in_k})^\top$, $\mathcal{M}_k = \{m_1, \dots, m_{n_k}\}$, 令 $\boldsymbol{\Pi}_k^\nabla := (\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_{N^{\text{dof}}})$ 表示 Π_k^∇ 的张量. 根据文献[13]可证明

$$\boldsymbol{\Pi}_k^\nabla = \mathbf{G}_k^{-1} \mathbf{B}_k, \quad (7)$$

其中 $n_k \times n_k$ 阶矩阵

$$\mathbf{G}_k = \begin{pmatrix} P_0 m_1 & \cdots & P_0 m_{n_k} \\ (\nabla m_2, \nabla m_1) & \cdots & (\nabla m_2, \nabla m_{n_k}) \\ \vdots & & \vdots \\ (\nabla m_{n_k}, \nabla m_1) & \cdots & (\nabla m_{n_k}, \nabla m_{n_k}) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$n_k \times N^{\text{dof}}$ 阶矩阵

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} P_0 \phi_1 & \cdots & P_0 \phi_{N^{\text{dof}}} \\ (\nabla m_2, \nabla \phi_1)_{0,P} & \cdots & (\nabla m_2, \nabla \phi_{N^{\text{dof}}})_{0,P} \\ \vdots & & \vdots \\ (\nabla m_{n_k}, \nabla \phi_1)_{0,P} & \cdots & (\nabla m_{n_k}, \nabla \phi_{N^{\text{dof}}})_{0,P} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

同理, 设 t_{ij} 表示 Π_{k-1}^0 在基 m_j 下的系数, 则有 $\Pi_{k-1}^0 \phi_i = \sum_{j=1}^{n_{k-1}} t_{ij} m_j = \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{T}_i$, 其中 $\mathbf{T}_i = (t_{i1}, \dots, t_{in_{k-1}})^\top$, \mathcal{M}_{k-1} 是 $(k-1)$ 次单项式集合. 令 $\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 := (\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_{N^{\text{dof}}})$ 表示 Π_{k-1}^0 的张量形式. 根据文献[13]可证明

$$\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 = \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{C}_{k-1}, \quad (10)$$

其中 $n_{k-1} \times n_{k-1}$ 阶矩阵

$$\mathbf{H}_{k-1} = (h_{ij}) = (m_i, m_j)_{0,P}, \quad i = 1, 2, \dots, n_{k-1}, \quad (11)$$

$n_{k-1} \times N^{\text{dof}}$ 阶矩阵

$$\mathbf{C}_{k-1} = (c_{ij}) = (m_i, \phi_j)_{0,P}, \quad i = 1, 2, \dots, N^{\text{dof}}. \quad (12)$$

其次考虑投影算子 $\Pi_{k-1}^0 \nabla$ 的张量形式 $\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla$. 设

$$\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \phi_i = \begin{pmatrix} \Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_i \\ \Pi_{k-1}^0 \partial_y \phi_i \\ \Pi_{k-1}^0 \partial_z \phi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n_{k-1}} L_j^x m_j \\ \sum_{j=1}^{n_{k-1}} L_j^y m_j \\ \sum_{j=1}^{n_{k-1}} L_j^z m_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{L}_i^x \\ \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{L}_i^y \\ \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{L}_i^z \end{pmatrix},$$

其中 $\mathbf{L}_i^x, \mathbf{L}_i^y, \mathbf{L}_i^z$ 是 n_{k-1} 维待定系数列向量. 令 $\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla := \begin{pmatrix} \mathbf{L}_1^x & \cdots & \mathbf{L}_{N^{\text{dof}}}^x \\ \mathbf{L}_1^y & \cdots & \mathbf{L}_{N^{\text{dof}}}^y \\ \mathbf{L}_1^z & \cdots & \mathbf{L}_{N^{\text{dof}}}^z \end{pmatrix}$. 根据文献[13]可证明

$$\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x \\ \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y \\ \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z \end{pmatrix}, \quad \text{其中 } n_{k-1} \times n_{k-1} \text{ 阶矩阵 } \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \text{ 由式(11)给出, } n_{k-1} \times N^{\text{dof}} \text{ 阶矩阵}$$

$$\mathbf{R}_{k-1}^x = (r_{ij}^x) = (m_i, \partial_x \phi_j)_{0,P}, \quad i = 1, 2, \dots, N^{\text{dof}}, \quad (13)$$

$\mathbf{R}_{k-1}^y, \mathbf{R}_{k-1}^z$ 与 \mathbf{R}_{k-1}^x 类似.

由上述对三类投影的张量表示可知, 对于单元 P 上的基函数系 $\Phi_k := (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}})$, 如下等式成立:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}_k^\nabla \Phi_k &= \mathbf{\Pi}_k^\nabla (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}}) = \mathcal{M}_k \mathbf{\Pi}_k^\nabla = \mathcal{M}_k \mathbf{G}_k^{-1} \mathbf{B}_k, \\ \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \Phi_k &= \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}}) = \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 = \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{C}_{k-1}, \\ \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k &= \begin{pmatrix} \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \partial_x (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}}) \\ \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \partial_y (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}}) \\ \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \partial_z (\phi_1 \cdots \phi_{N^{\text{dof}}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x \\ \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y \\ \mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

3.2 刚度矩阵与荷载向量的矩阵形式

下面利用上述三类投影算子的张量表示, 推导 PNP 系统中离子浓度方程与电势方程刚度矩阵和荷载向量的矩阵表达式. 由于 NP 方程中具有一个耦合的非线性项, 因此其刚度矩阵的形式与一般的椭圆方程不同. 离子浓度方程是方程(1)的第一式, 其最终的单元刚度矩阵 \mathbf{K}_h^P 可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_h^P &= ((\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)^\top, \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)_{0,P} + q^i ((\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)^\top, \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \Phi_k [\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \phi_h])_{0,P} + \\ & S^p (((I - \mathbf{\Pi}_k^\nabla) \Phi_k)^\top, (I - \mathbf{\Pi}_k^\nabla) \Phi_k). \end{aligned} \quad (15)$$

下面分别推导出 \mathbf{K}_h^P 三部分的计算公式. 首先对第一部分, 由式(14)可知

$$((\mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)^\top, \mathbf{\Pi}_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)_{0,P} = (\mathbf{R}_{k-1}^x)^\top \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x + (\mathbf{R}_{k-1}^y)^\top \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y + (\mathbf{R}_{k-1}^z)^\top \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z.$$

其次给出第二部分的矩阵形式:

$$((\Pi_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)^T, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k [\Pi_{k-1}^0 \nabla \phi_h])_{0,P} = ((\Pi_{k-1}^0 \partial_x \Phi_k)^T, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k [\Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_h^i])_{0,P} + ((\Pi_{k-1}^0 \partial_y \Phi_k)^T, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k [\Pi_{k-1}^0 \partial_y \phi_h^i])_{0,P} + ((\Pi_{k-1}^0 \partial_z \Phi_k)^T, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k [\Pi_{k-1}^0 \partial_z \phi_h^i])_{0,P},$$

其中

$$\begin{aligned} \Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_h^i &= (\Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_1, \dots, \Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_1^{N^{\text{dof}}}) \begin{pmatrix} \text{dof}_1(\phi_h) \\ \vdots \\ \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(\phi_h) \end{pmatrix} = \\ &= (m_1, \dots, m_{n_{k-1}}) \begin{pmatrix} (m_1, m_1)_{0,P} & \cdots & (m_1, m_{n_{k-1}})_{0,P} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (m_{n_{k-1}}, m_1)_{0,P} & \cdots & (m_{n_{k-1}}, m_{n_{k-1}})_{0,P} \end{pmatrix}^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} (m_1, \partial_x \phi_1)_{0,P} & \cdots & (m_1, \partial_x \phi_1^{N^{\text{dof}}})_{0,P} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (m_{n_{k-1}}, \partial_x \phi_1)_{0,P} & \cdots & (m_{n_{k-1}}, \partial_x \phi_1^{N^{\text{dof}}})_{0,P} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{dof}_1(\phi_h) \\ \vdots \\ \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(\phi_h) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$\Pi_{k-1}^0 \partial_y \phi_h^i, \Pi_{k-1}^0 \partial_z \phi_h^i$ 与 $\Pi_{k-1}^0 \partial_x \phi_h^i$ 类似, 结合式(14)有

$$\begin{aligned} ((\Pi_{k-1}^0 \nabla \Phi_k)^T, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k [\Pi_{k-1}^0 \nabla \phi_h])_{0,P} &= ((\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x)^T, \mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} + \\ &+ ((\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y)^T, \mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} + \\ &+ ((\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z)^T, \mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} = \\ &= (\mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x)^T (\mathcal{M}_{k-1}^T, \mathcal{M}_{k-1} [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^x \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} \Pi_{k-1}^0 + \\ &+ (\mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y)^T (\mathcal{M}_{k-1}^T, \mathcal{M}_{k-1} [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^y \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} \Pi_{k-1}^0 + \\ &+ (\mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z)^T (\mathcal{M}_{k-1}^T, \mathcal{M}_{k-1} [\mathcal{M}_{k-1} \mathbf{H}_{k-1}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}^z \mathbf{Dof}(\phi_h)])_{0,P} \Pi_{k-1}^0. \end{aligned}$$

最后对第三部分 $S^P(((I - \Pi_k^\nabla) \Phi_k)^T, (I - \Pi_k^\nabla) \Phi_k)$, 在实际计算中可用如下矩阵近似代替^[13]:

$$(I - \Pi_*^\nabla)^T (I - \Pi_*^\nabla), \tag{16}$$

其中 $\Pi_*^\nabla = \mathbf{D} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{B}$, 矩阵 \mathbf{G}, \mathbf{B} 分别由式(8), (9)给出, $N^{\text{dof}} \times n_k$ 矩阵 \mathbf{D} 定义为

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \text{dof}_1(m_1) & \text{dof}_1(m_2) & \cdots & \text{dof}_1(m_{n_k}) \\ \text{dof}_2(m_1) & \text{dof}_2(m_2) & \cdots & \text{dof}_2(m_{n_k}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(m_1) & \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(m_2) & \cdots & \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(m_{n_k}) \end{pmatrix}.$$

电势方程是方程(1)的第二式, 其最终的单元刚度矩阵 \mathbf{K}_h^ϕ 由以下两部分组成:

$$\mathbf{K}_h^\phi = ((\nabla \Pi_k^\nabla \Phi_k)^T, \nabla \Pi_k^\nabla \Phi_k)_{0,P} + S^P(((I - \Pi_{k-1}^\nabla) \Phi_k)^T, (I - \Pi_{k-1}^\nabla) \Phi_k). \tag{17}$$

对于 \mathbf{K}_h^ϕ 的第一部分, 有

$$((\nabla \Pi_k^\nabla \Phi_k)^T, \nabla \Pi_k^\nabla \Phi_k)_{0,P} = (\nabla (\mathcal{M}_k \Pi_k^\nabla))^T, \nabla \mathcal{M}_k \Pi_k^\nabla)_{0,P} = (\Pi_k^\nabla)^T \hat{\mathbf{G}}_k \Pi_k^\nabla.$$

对于 \mathbf{K}_h^ϕ 的第二部分 $S^P(((I - \Pi_{k-1}^\nabla) \Phi_k)^T, (I - \Pi_{k-1}^\nabla) \Phi_k)$, 在计算中可用式(16)代替, 从而完成了电势方程刚度矩阵的计算.

在 PNP 方程离子浓度方程单元刚度矩阵(15)和电势方程刚度矩阵(17)的计算中, $\Pi_k^\nabla, \Pi_{k-1}^0, \mathbf{H}_{k-1}, \mathbf{R}_{k-1}^x$ 分别由式(7), (10), (11), (13)给出 $\mathbf{R}_{k-1}^y, \mathbf{R}_{k-1}^z$ 与 \mathbf{R}_{k-1}^x 类似, \mathbf{I} 为 $N^V \times N^V$ 阶单位矩阵, $\Pi_*^\nabla = \mathbf{D}_k \Pi_k^\nabla, \mathbf{D}_k$ 是 k 次单项式 \mathcal{M}_k 的自由度矩阵, \mathcal{M}_{k-1} 为 $(k-1)$ 次单项式集合, $\mathbf{Dof}(\phi_h) = (\text{dof}_1(\phi_h), \dots, \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(\phi_h))^T, \{\text{dof}_i(\phi_h), i=1, 2, \dots, N^{\text{dof}}\}$ 是电势方程虚单元解 ϕ_h 在单元 P 上的自由度, $\hat{\mathbf{G}}_k$ 为将 \mathbf{G}_k 的第一行元素取为零得到的矩阵, 而 \mathbf{G}_k 由式(8)给出.

下面给出 PNP 方程中荷载向量矩阵形式的推导. 离子浓度方程所对应的单元荷载向量为

$$(F_i, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k)_{0,P} = (F_i, (\mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0)^T)_{0,P} = (\Pi_{k-1}^0)^T \begin{pmatrix} (F_i, m_1)_{0,P} \\ \vdots \\ (F_i, m_{n_{k-1}})_{0,P} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

将方程(6)中第二式的 $\tilde{b}_h(p_h^1, p_h^2, \omega_h)$ 移到等号右边即得到电势方程对应的单元荷载向量为

$$\begin{aligned}
 & (\Pi_{k-1}^0 \sum_{i=1}^2 q^i p_h^i, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k)_{0,P} + (F_3, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k)_{0,P} = \left(\Pi_{k-1}^0 \sum_{i=1}^2 q^i p_h^i + F_3, \Pi_{k-1}^0 \Phi_k \right)_{0,P} = \\
 & \left(\mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^2 q^i \text{dof}_1(p_h^i) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^2 q^i \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(p_h^i) \end{pmatrix} + F_3, (\mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0)^\top \right) = \\
 & (\Pi_{k-1}^0)^\top \begin{pmatrix} (\mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 (q^1 \text{Dof}(p_h^1) + q^2 \text{Dof}(p_h^2)) + F_3, m_1)_{0,P} \\ \vdots \\ (\mathcal{M}_{k-1} \Pi_{k-1}^0 (q^1 \text{Dof}(p_h^1) + q^2 \text{Dof}(p_h^2)) + F_3, m_{n_{k-1}})_{0,P} \end{pmatrix}. \quad (19)
 \end{aligned}$$

在离子浓度方程荷载向量(18)和电势方程荷载向量(19)的计算中, Π_{k-1}^0 由式(10)给出, $\mathcal{M}_{k-1} = \{m_1, \dots, m_{n_{k-1}}\}$ 为 $(k-1)$ 次单项式集合, $\text{Dof}(p_h^i) = (\text{dof}_1(p_h^i), \dots, \text{dof}_{N^{\text{dof}}}(p_h^i))^\top$, 其中 $\text{dof}_i(p_h)$ ($i=1, 2, \dots, N^{\text{dof}}$) 为 p_h 在单元 P 上的自由度.

4 3DPNP 模型数值实验

为验证虚单元方法在三维稳态 PNP 模型计算中的有效性, 进行 3DPNP 模型问题的数值实验, 考虑 $k=1$ 的情形, 即线性虚单元. 实验环境为桂林电子科技大学超算平台(Linux), 内存为 3.58 TB, 采用 Fortran90 语言编写计算程序, 所有计算结果均来自同一平台. 求解对象为方程(1)-(2)组成的 PNP 方程组, 右端由以下真解决定:

$$\begin{cases} \phi = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\pi z), \\ p_1 = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z), \\ p_2 = \sin(3\pi x) \sin(3\pi y) \sin(3\pi z). \end{cases} \quad (20)$$

定义 L^2 范数和 H^1 范数误差分别为 $e_{L^2} = \sqrt{\sum_{P \in \mathcal{T}^h} \|u - \Pi_k^\nabla u_h\|_{0,P}^2}$, $e_{H^1} = \sqrt{\sum_{P \in \mathcal{T}^h} \|\nabla(u - \Pi_k^\nabla u_h)\|_{0,P}^2}$, 其中 u 表示式(20)中 ϕ, p_1 和 p_2 的精确解, u_h 为虚单元解. 选取如下收敛阶计算公式:

$$\text{order} = \frac{\log(e_{i+1}/e_i)}{\log(h_{i+1}/h_i)}, \quad i = 1, 2, \dots.$$

记 N_P 是网格单元总数, 网格尺寸 h 选用如下公式定义: $h = (|\Omega|/N_P)^{1/3}$.

下面介绍数值实验中的网格划分, 并分别给出线性虚单元解在 3 种网格下 L^2 范数和 H^1 范数的误差收敛曲线. 计算区域为 $\Omega = [0, 1]^3$ 的正方体区域, 为研究虚单元方法在不同网格上的效果, 本文数值实验考虑如图 1 所示的 3 种网格划分.

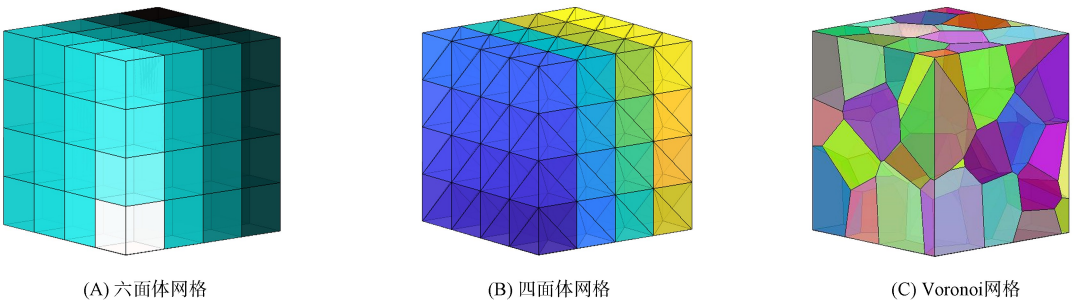


图 1 六面体(A)、四面体(B)和 Voronoi(C) 网格划分

Fig. 1 Hexahedron (A), tetrahedron (B) and Voronoi meshes (C) division

在 3 种不同网格划分下, 虚单元解与真解的 L^2 模和 H^1 模误差收敛曲线分别如图 2~图 4 所示. 由图 2~图 4 可见, 虚单元解在 3 种网格上的 L^2 模和 H^1 模误差均达到最优阶.

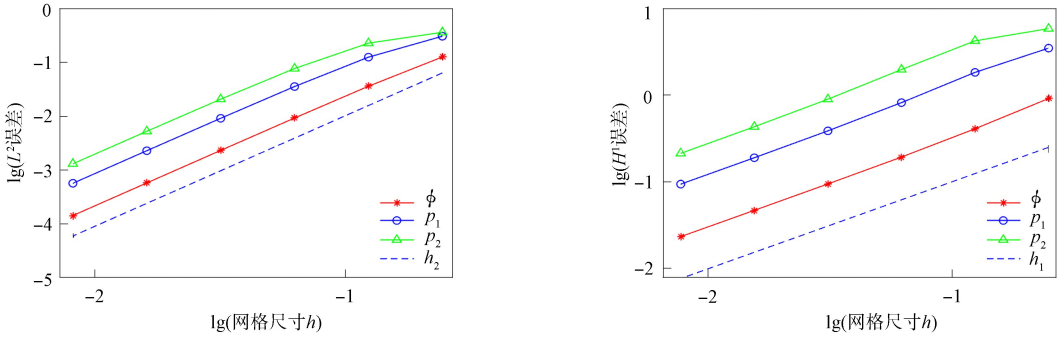


图 2 六面体网格误差收敛曲线

Fig. 2 Error convergence curves of hexahedral mesh

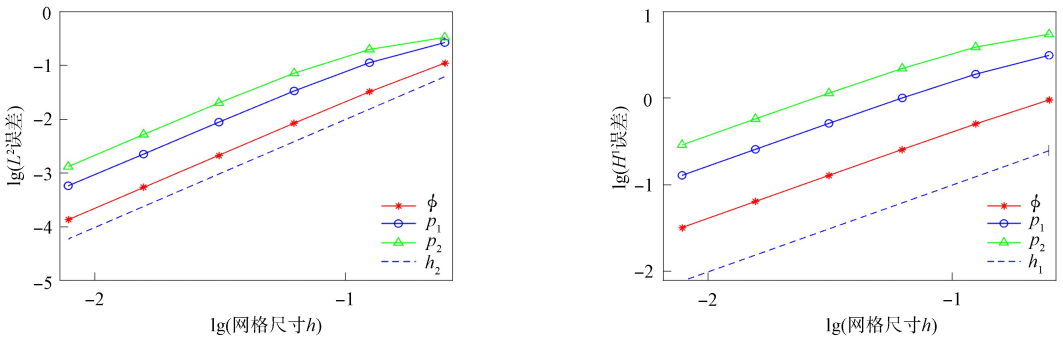


图 3 四面体网格误差收敛曲线

Fig. 3 Error convergence curves of tetrahedral mesh

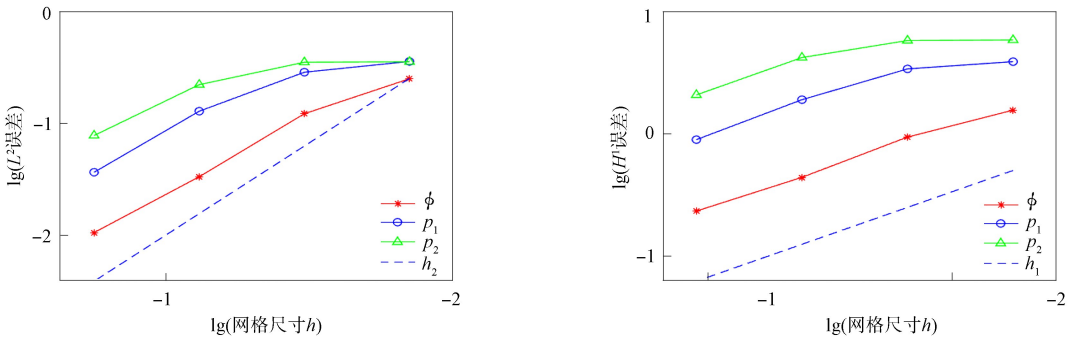


图 4 Voronoi 网格误差收敛曲线

Fig. 4 Error convergence curves of Voronoi mesh

综上所述, 本文将虚单元方法应用于三维稳态 PNP 方程的计算, 给出了 PNP 方程的虚单元离散格式, 以及电势方程与离子浓度方程的刚度矩阵和荷载矩阵的形式. 数值实验结果表明, 六面体网格、四面体网格和 Voronoi 网格下的虚单元解的 L^2 模误差达到 2 阶收敛阶, H^1 模误差的收敛阶达到 1 阶收敛阶. 实验结果表明了虚单元法在多面体网格下求解三维稳态 PNP 方程的有效性. 此外, 该方法还可以应用到时间相关的 PNP 方程以及更复杂的离子通道 PNP 方程^[1]中.

参 考 文 献

[1] YANG Y, TANG M, LIU C, et al. Superonvergent Gradient Recovery for Nonlinear Poisson-Nernst-Planck Equations with Applications to the Ion Channel Problem [J]. Advances in Computational Mathematics, 2020, 46(6): 78-1-78-35.
 [2] GAJEWSKI H, JEROME J W. Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices [M]. New York: Springer-Verlag, 1996: 14-18.
 [3] MARCICKI J, CONLISK A T, RIZZONI G. Comparison of Limiting Descriptions of the Electrical Double Layer

- Using a Simplified Lithium-Ion Battery Model [J]. *ECS Transactions*, 2012, 41(14): 9-21.
- [4] EISENBERG B, HYON Y, LIU C. Energy Variational Analysis of Ions in Water and Channels: Field Theory for Primitive Models of Complex Ionic Fluids [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, 133(10): 104104-1-104104-23.
- [5] LU B Z, HOLST M J, McCAMMON J A, et al. Poisson-Nernst-Planck Equations for Simulating Biomolecular Diffusion-Reaction Processes I: Finite Element Solutions [J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(19): 6979-6994.
- [6] FLAVELL A, MACHEN M, EISENBERG B, et al. A Conservative Finite Difference Scheme for Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. *Journal of Computational Electronics*, 2014, 13: 235-249.
- [7] FUHRMANN J. Activity Based Finite Volume Methods for Generalised Nernst-Planck-Poisson Systems [M]. [S. l.]: Springer, 2014: 597-605.
- [8] BEIRÃO DA VEIGA L, BREZZI F, CANGIANI A, et al. Basic Principles of Virtual Element Methods [J]. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2013, 23(1): 199-214.
- [9] 刘传奇, 许广涛, 魏宇杰. 虚单元计算方法的最新理论与应用进展 [J]. *力学进展*, 2022, 52(4): 874-913. (LIU C Q, XU G T, WEI Y J. Virtual Element Method: Theory and Applications [J]. *Advances in Mechanics*, 2022, 52(4): 874-913.)
- [10] 刘杨. 二维稳态 Poisson-Nernst-Planck 方程的一种虚单元方法 [D]. 湘潭: 湘潭大学, 2020. (LIU Y. A Virtual Element Method for Two-Dimensional Steady-State Poisson-Nernst-Planck Equations [D]. Xiangtan: Xiangtan University, 2020.)
- [11] SU S, TANG H Z. A Positivity-Preserving and Free Energy Dissipative Hybrid Scheme for the Poisson-Nernst-Planck Equations on Polygonal and Polyhedral Meshes [J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2022, 108: 33-48.
- [12] BEIRÃO DA VEIGA L, BREZZI F, MARINI L D, et al. Virtual Element Method for General Second-Order Elliptic Problems on Polygonal Meshes [J]. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2016, 26(4): 729-750.
- [13] BEIRÃO DA VEIGA L, BREZZI F, MARINI L D, et al. The Hitchhiker's Guide to the Virtual Element Method [J]. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2014, 24(8): 1541-1573.
- [14] AHMAD B, ALSAEDI A, BREZZI F, et al. Equivalent Projectors for Virtual Element Methods [J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2013, 66(3): 376-391.
- [15] BEIRÃO DA VEIGA L, LOVADINA C, RUSSO A. Stability Analysis for the Virtual Element Method [J]. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2017, 27(13): 2557-2594.
- [16] LIU Y, SHU S, WEI H Y, et al. A Virtual Element Method for the Steady-State Poisson-Nernst-Planck Equations on Polygonal Meshes [J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2021, 102: 95-112.
- [17] YANG Y, LU B Z, XIE Y. A Decoupling Two-Grid Method for the Steady-State Poisson-Nernst-Planck Equations [J]. *Journal of Computational Mathematics*, 2019, 37(4): 556-578.

(责任编辑: 赵立芹)