

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка

**ВОВК ОЛЕКСАНДР ВОЛОДИМИРОВИЧ**

**УДК 519.624.2.**

**ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ  
ЕВОЛЮЦІЙНИХ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ-АДВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ**

01.01.07 – обчислювальна математика

**Автореферат**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі інформаційних систем у Львівському національному університеті імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук, професор  
**Шинкаренко Георгій Андрійович,**  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
завідувач кафедри інформаційних систем.

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Солодкий Сергій Григорович,**  
Інститут математики НАН України,  
провідний науковий співробітник  
відділу обчислювальної математики;

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Кутнів Мирослав Володимирович,**  
Національний університет «Львівська політехніка»,  
професор кафедри прикладної математики.

Захист відбудеться «1» липня 2016 р. о 15 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.051.07 Львівського національного університету імені Івана Франка за адресою: 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1, ауд. 377.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка (м. Львів, вул. Драгоманова, 5).

Автореферат розісланий «27» травня 2016 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради



Б. А. Остудін

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Попри значні досягнення сучасного числового аналізу в розвитку методів ефективного обчислення якісних апроксимацій розв'язків різноманітних наукових та інженерних задач клас сингулярно збурених та/чи нелінійних моделей у плані затрат обчислювальних ресурсів і далі залишається проблемним. Зокрема, така ситуація спостерігається при числовому аналізі задач дифузії-адвекції-реакції (ДАР), які, за висловом акад. А. А. Самарського, є базовими для фізики і механіки суцільного середовища.

У зв'язку з цим побудова та аналіз економних, надійних та ефективних проекційно-сіткових схем, в тому числі таких, що здатні обчислювати наближені розв'язки сингулярно збурених та нелінійних задач ДАР з наперед заданою точністю, є важливою та актуальною проблемою обчислювальної математики.

Важливим напрямком забезпечення надійності та ефективності обчислювальних схем МСЕ є  $h$ -адаптування з метою розв'язування задач ДАР з наперед гарантованою точністю. Актуальним завданням при цьому є удосконалення його інтелектуальної частини – апостеріорного оцінювача похибки (АОП).

Разом із потужністю комп'ютерної техніки зростає актуальність числового моделювання еволюційних задач ДАР. Поєднання у них динаміки та нелінійності вимагає розробки додаткових методик для узгодження числових схем їхнього аналізу.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Робота виконана в рамках держбюджетних науково-дослідних робіт кафедри інформаційних систем Львівського національного університету імені Івана Франка: Пі-68П “Побудова та аналіз чисельних методів для диференціальних та інтегральних рівнянь математичної фізики і механіки” (2010-2011 рр., № ДР 0110U001375); наукові керівники – д.ф.-м.н, проф. Шинкаренко Г. А., д.ф.-м.н., проф. Хапко Р. С.; Пі-120П “Чисельне розв'язування прямих і обернених задач математичної фізики і механіки проекційно-сітковими методами” (2012-2013 рр., № ДР 0112U001285); наукові керівники – д.ф.-м.н., проф. Шинкаренко Г. А., д.ф.-м.н., проф. Хапко Р. С.

**Мета і завдання дослідження.** Метою роботи є побудова ефективних та надійних проекційно-сіткових методів розв'язування сингулярно збурених та/або нелінійних задач ДАР, зокрема, моделювання перебігу реакції окиснення чадного газу на поверхні платини. У цьому напрямку передбачено виконання наступних завдань.

1) Реалізація та аналіз базових алгоритмів методу скінченних елементів (МСЕ) для розв'язування двовимірних крайових задач з використанням: кусково-лінійних, білінійних та серендипових квадратичних апроксимацій, методу бісекції, квадратур Дюнавана, ітерацій Ньютона та розв'язування систем лінійних алгебричних рівнянь ітераціями GMRES з передобумовленням.

2) Побудова надійних та ефективних апостеріорних оцінювачів похибок (АОП) Діріхле та Неймана, здатних обчислювати нижню та верхню межі похибок апроксимацій МСЕ.

3) Розробка стратегії локального згущення триангуляцій та збіжних  $h$ -адаптивних схем МСЕ для розв'язування сингулярно збурених та/або нелінійних крайових задач з наперед заданою точністю.

4) Побудова стійких та збіжних однокрокових рекурентних схем (ОРС) інтегрування задач Коші для систем звичайних диференціальних рівнянь великих порядків, які узгоджують порядки похибок дискретизації в часі та лінеаризації Ньютона.

5) Розробка та дослідження проєкційно-сіткової схеми для лінійних та/або нелінійних початково-крайових задач з системами рівнянь дифузії-адвекції-реакції.

6) Аналіз результатів обчислювальних експериментів із сингулярними та квазілінійними задачами стосовно властивостей ефективності, надійності та збіжності запропонованих схем.

7) Апробація одержаних числових схем розв'язуванням важливої для практики задачі про поширення спіральних автохвиль в реакції окиснення чадного газу на поверхні платини.

**Об'єктом дослідження** є двовимірні сингулярно збурені і/або нелінійні крайові та початково-крайові задачі ДАР та відповідні їм варіаційні задачі.

**Предметом дослідження** є високоточні, зокрема,  $h$ -адаптивні схеми МСЕ, проєкційно-сіткові схеми з узгодженням порядків похибок дискретизації у часі та лінеаризації, аналіз їхніх характеристик стосовно стійкості, збіжності, ефективності та надійності.

**Методами досліджень** є сучасні методи варіаційного числення, функціонального аналізу та обчислювальної математики, зокрема, метод Петрова-Гальоркіна з використанням просторів апроксимацій МСЕ.

#### **Наукова новизна одержаних результатів.**

1) Побудовано індикаторні функції залишкових АОП Діріхле та Неймана для кусково-лінійних апроксимацій МСЕ на трикутних сітках та кусково-білінійних і квадратичних серендипових апроксимацій на чотирикутних сітках.

2) Обґрунтовано надійність і ефективність цих АОП для апроксимацій лінійних крайових задач ДАР.

3) Встановлено умови, за яких АОП Діріхле та Неймана обчислюють двосторонні оцінки похибок апроксимацій МСЕ на рівномірно або локально згущуваних сітках.

4) Розроблено критерії і стратегії локального покращення триангуляцій для  $h$ -адаптивного МСЕ на основі запропонованих АОП Діріхле та Неймана.

5) Доведено збіжність  $h$ -адаптивного МСЕ.

6) Отримано результати багатостороннього аналізу числових характеристик апроксимацій МСЕ та їхніх АОП Діріхле і Неймана, зокрема, індексів ефективності, порядків збіжності, точності на рівномірно згущуваних або адаптованих сітках.

7) Побудовано та проаналізовано ОРС з узгодженням порядків похибки дискретизації в часі та похибки лінеаризації Ньютона для розв'язування напівдискретизованих МСЕ квазілінійних початково-крайових задач ДАР.

8) Проаналізовано результати числового моделювання зародження та поширення спіральних автохвиль у реакції окиснення чадного газу на поверхні платини.

**Достовірність** одержаних положень, результатів та висновків забезпечується строгими доведеннями оцінок похибок, стійкості та збіжності побудованих числових методів. Основні теоретичні результати підтверджуються низкою обчислювальних експериментів з модельними задачами, а також порівнянням з експериментальними даними.

**Практичне значення одержаних результатів.** Теоретичні та числові результати свідчать про ефективність і надійність запропонованих апостеріорних оцінювачів похибок і, отже, про придатність їхнього застосування в  $h$ -адаптивних схемах МСЕ для розв'язування нелінійних та/або сингулярно-збурених крайових задач з наперед гарантованою точністю.

Створений комплекс програм для розв'язування лінійних та/або нелінійних, крайових і початково-крайових задач для систем диференціальних рівнянь дифузії-адвекції-реакції з контролем точності апроксимацій МСЕ та адаптивними сітками є зручним багатофункціональним інструментом для проведення кваліфікованих обчислювальних експериментів і практичних досліджень, зокрема, для розв'язування та чисельного аналізу важливої на практиці задачі про реакцію чадного газу на поверхні платини.

#### **Особистий внесок здобувача.**

Основні результати дисертаційної роботи, які винесені на захист, отримані здобувачем самостійно. У спільних з науковим керівником роботах [1-9] проф. Г. А. Шинкаренку належить постановка задач, загальні підходи до побудови числових схем, передбачення одержаних результатів та їхній аналіз. Здобувачем тут спроектовано та проаналізовано числові схеми, які реалізовані в оригінальному програмному інструментарії для виконання обчислювальних експериментів, графічної і табличної обробки результатів. Ці числові схеми, зокрема, включають: апостеріорні оцінювачі похибок МСЕ, критерії адаптування, метод бісекції адаптування трикутних сіток, метод Ньютона, проекційний метод GMRES з перезапусками та передобумовленням, числове інтегрування квадратурами Гаусса та Дюнавана. У статтях [1-9] числові результати отримано, проаналізовано та оформлено здобувачем самостійно за винятками: у праці [5] Г. А. Квасниці належать числові результати розв'язування задачі еластостатики, в роботах [6, 8] О. Ю. Остапову – числові результати застосування алгоритму Рапперта.

Індикаторні функції АОП Діріхле для лінійних апроксимацій [5] і АОП Діріхле та Неймана для білінійних [4] та квадратичних серендипових апроксимацій [1] запропоновано автором дисертації. Здатність цих АОП обчислювати верхню та нижню межі істинної похибки апроксимацій МСЕ передбачена проф. Г. А. Шинкаренком [4] і була теоретично обґрунтована разом з їхньою надійністю й ефективністю, див. [1, 5, 7], спільно із автором дисертації, комп'ютерна імплементація та підтвердження числовими експериментами належить здобувачу.

У [2, 3, 9] розглядається ОРС, яка автором дисертації у [2] детально співставляється та порівнюється з класичною схемою інтегрування за часом, в основі якої лежать дискретизація  $\theta$ -методом в часі та лінеаризація методом Ньютона. В результаті у [2] здобувачем запропоновано уточнення вихідної ОРС.

У статті [3] модель реакції окиснення чадного газу на поверхні платини належить Н. І. Павленко, і В. Д. Вовку – аналіз нелінійної динаміки проходження процесу цієї хімічної реакції.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати дисертації доповідались та обговорювались на *міжнародних наукових конференціях*: «Computer Methods in Mechanics» (Poznań, 2013; Gdańsk, 2015), «Optimization of The Structures of Manufacturing Processes» (Opole, 2013-2015), Ім. акад. М. Кравчука (Київ, 2015); «Обчислювальна та прикладна математика» (Київ, 2012, 2013, 2015), 3 нагоди 120-річчя з дня народження С. Банаха (Львів, 2012), «Сучасні проблеми механіки та математики» (Львів, 2013), «Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації» (Кам'янець-Подільський, 2014); *вітчизняних наукових конференціях*: «Конференція молодих науковців і спеціалістів» (Львів, 2013), «Підстригачівські читання» (Львів, 2014); «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2008, 2011-2015), «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів» (Рівне, 2013); *семінарах кафедр*: інформаційних систем, прикладної математики, дискретного аналізу та інтелектуальних систем, програмування; *аспірантських семінарах* факультету прикладної математики та інформатики Львівського національного університету імені Івана Франка 2010-2015 рр.

**Публікації.** Основні результати дисертації опубліковано у 9-ти наукових працях: [1-4] у наукових фахових виданнях з переліку, затвердженого МОН України, та [5-9] у закордонних виданнях. Статті [2, 6] входять до наукометричної бази даних Scopus, а [6, 7] – до CRCnetBASE, [5, 8, 9] складають розділи монографій. Крім того, переклад [2] опубліковано у журналі «Journal of Mathematical Sciences» з імпаکت-фактором 0.38. У матеріалах наукових конференцій опубліковано 21 тезу доповідей, серед яких 5 за кордоном.

**Структура і обсяг дисертації.** Дисертаційна робота складається із вступу, п'яти розділів, висновків, додатків на 44 сторінках і списку використаних джерел, який налічує 194 найменування на 20 сторінках. Дисертація містить 36 рисунків та 60 таблиць. Загальний обсяг дисертації становить 218 сторінок, основний текст роботи викладено на 148 сторінках.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступній частині** викладено обґрунтування актуальності дисертаційної роботи, висвітлено її наукову новизну, мету, практичне значення, основні результати, зв'язок з іншими науковими працями, дослідженнями, науковими програмами та темами, встановлено основні завдання та мету роботи, здійснено короткий огляд сучасного стану проблеми та методів її дослідження.

У **першому розділі** розглянуто фізичні явища та процеси, зокрема хімічні реакції, моделювання яких можна звести до розв'язування наступних задач ДАР.

1) *Крайова задача з лінійним еліптичним рівнянням дифузії-адвекції-реакції в обмеженій області  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d=1,2,3$ , з ліпшицевою межею  $\Gamma = \partial\Omega$  і заданими  $\mu = \mu(x) > 0$ ,  $\beta = \{\beta_i(x)\}_{i=1}^d$ ,  $\sigma = \sigma(x) \geq 0$ ,  $f = f(x)$  та  $g = g(x)$ ,  $\alpha = \alpha(x) > 0$ :*

$$\begin{cases} \text{знайти } u = u(x) \text{ таку, що } -\nabla \cdot (\mu \nabla u) + \beta \cdot \nabla u + \sigma u = f \text{ в } \Omega, \\ u = 0 \text{ на } \Gamma_u \subset \Gamma, \text{mes}(\Gamma_u) > 0, -(\mu \nabla u) \cdot \nu = \alpha u + g \text{ на } \Gamma_q := \Gamma / \Gamma_u, \end{cases} \quad (1)$$

де  $\nu$  – вектор одиничної зовнішньої нормалі до  $\Gamma$ . Часто такі задачі є *сингулярно збуреними* та стають базовими для конструювання числових схем, зокрема, МСЕ, здатних ефективно обчислювати апроксимації розв'язків.

2) *Квазілінійна крайова задача (1) з нелінійною функцією  $f = f[x, u(x)] \equiv f[u]$  вимагає доповнення схем МСЕ належною лінеаризацією.*

3) *Напівдискретизована МСЕ квазілінійна початково-крайова задача*

$$\begin{cases} \text{задано } \mathbf{u}^0 = \{u_i^0\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N; \text{ знайти } \mathbf{u}(t) = \{u_i(t)\}_{i=1}^N \text{ таке, що} \\ \mathbf{u}'(t) = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t)] \quad \forall t \in (0, T], \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0, \quad 0 < T < +\infty, \end{cases} \quad (2)$$

часто є моделлю багатокомпонентних реакцій і породжена напівдискретизацією еволюційних рівнянь за просторовими змінними. Жорсткість, велика розмірність та нелінійність задачі потребує стійких та ефективних числових схем її розв'язування.

4) *Початково-крайова задача для систем квазілінійних параболічних рівнянь*

$$\begin{cases} \text{задано матриці } \mu, \beta, \sigma, G, N \text{ та вектори } \mathbf{f}[\mathbf{u}], \mathbf{u}^0, \mathbf{g}; \\ \text{знайти вектор } \mathbf{u} = \{u_k(x)\}_{k=1}^p, \text{ такий, що задовільняє систему рівнянь} \\ \partial_t \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \beta \cdot \nabla \mathbf{u} + \sigma \mathbf{u} = \mathbf{f}[\mathbf{u}] \text{ в } \Omega \times (0, T], \quad \Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad d = 1, 2, 3, \\ \mathbf{u} = 0 \text{ на } \Gamma_u \times [0, T], \quad \Gamma_u \subset \Gamma, \quad \text{mes}(\Gamma_u) > 0, \\ -N(\mu \nabla \mathbf{u}) = G\mathbf{u} + \mathbf{g} \text{ на } \Gamma_q \times [0, T], \quad \Gamma_q := \Gamma / \Gamma_u, \quad \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}^0 \text{ в } \Omega. \end{cases} \quad (3)$$

є загальним випадком моделювання хімічних реакцій, який акумулює всі основні питання побудови та аналізу числових методів.

Необхідність уточнення моделей задач ДАР врахуванням: нелінійності, нестационарності, збільшення розмірності системи диференціальних рівнянь, ускладнення геометрії досліджуваних областей та сингулярної збуреності фізичних процесів, разом зі стрімким зростанням обчислювальних потужностей комп'ютерів, дала суттєвий поштовх розвитку важливих напрямків обчислювальної математики, у який, зокрема, значний внесок зробили Вабищевич П. Н., Кутнів М. В., Самарский А. А., Солодкий С. Г., Тихонов А. Н., Шайдуров В. В., Шинкаренко Г. А., Morton K., Nicaise S., Zienkiewicz O. С. Для підвищення надійності та точності схем МСЕ особлива увага останнім часом приділяється такому новітньому напрямку як апостеріорні оцінювачі похибок, які є інтелектуальною складовою високоефективного  $h$ -адаптивного МСЕ. Розпочавшись з праць Babuška I. та Rheinboldt W. С., розробка АОП була продовжена у роботах Дияка І. І., Козаревської Ю. С., Остапова О. Ю., Сінчука Ю. О., Чабана Ф. В., Шинкаренко Г. А., Ящука Ю. А., Ainsworth M., Bangerth W., Johnson C., Nochetto R. H., Oden J. T., Rannacher R., Strouboulis T., Verfurth R.

Основною метою дисертаційної роботи є побудова ефективних та надійних проекційно-сіткових схем розв'язування задач (1)-(3), здатних за допомогою АОП та  $h$ -адаптування обчислювати апроксимації МСЕ з наперед заданою точністю.

У **другому розділі** детально розглянуто сучасні підходи до побудови схем МСЕ та апріорні оцінки їхніх похибок для лінійних або квазілінійних крайових задач (1), які допускають наступне варіаційне формулювання

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } u \in V := \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ на } \Gamma_u\} \text{ такий, що} \\ a_\Omega(u, v) = \langle n_\Omega(u), v \rangle \quad \forall v \in V, \end{array} \right. \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_\Omega(u, v) := \int_\Omega \{(\mu \nabla u) \cdot \nabla v + v[\beta \cdot \nabla u + \sigma u]\} dx + \int_{\Gamma_q} \alpha uv d\gamma, \\ \langle n_\Omega(u), v \rangle := \int_\Omega f[u]v dx - \int_{\Gamma_q} gvd\gamma \quad \forall u, v \in V. \end{array} \right. \quad (5)$$

Варіаційна задача (4) дискретизується МСЕ з підпросторами апроксимацій  $V_h := \{v \in V \cap C(\Omega) : v \in P_m(K) \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h\} \subset V$ , де  $P_m(K)$  простір поліномів, до порядку  $m = 1, 2$  включно, на трикутних або чотирикутних скінченних елементах  $K$  триангуляції  $\mathfrak{T}_h = \{K\}$ ,  $h := \max_{K \in \mathfrak{T}_h} h_K$ ,  $h_K = \text{diam } K$ .

Відзначимо особливості побудованих та програмно реалізованих нами числових схем для варіаційної задачі (4)-(5): (i) системи лінійних алгебричних рівнянь розв'язуються ітераційним методом узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES) з перезапусками та передобумовленням; (ii) у комп'ютерній пам'яті зберігаються лише ненульові елементи матриці у спеціальному економному форматі CSIR; (iii) лінеаризація цих систем рівнянь здійснюється методом Ньютона; (iv) обчислення їхніх коефіцієнтів виконується відповідними квадратурами Гаусса на чотирикутних скінченних елементах і квадратурами Дюнавана на трикутниках.

Реалізований у середовищі Visual Studio C# комплекс програм для розв'язування задач ДАР (1)-(3) є багатофункціональним інструментом для кваліфікованого проведення та аналізу результатів обчислювальних експериментів, частина з яких проілюстрована як в тексті дисертації, так і нижче.

Розглянемо сингулярно збурену крайову задачу ДАР з внутрішнім шаром

$$-\mu \Delta u - (\beta_1, \beta_2) \cdot \nabla u = 0 \text{ в } \Omega = (0, 1)^2, \quad u = u_{ext} \text{ на } \Gamma = \partial\Omega, \quad (6)$$

де  $\mu = 10^{-3}$ ,  $\beta_1(x) = x_1 - 0.6$ ,  $\beta_2(x) = x_2 - 0.3$ ,  $m = \cos(\pi/6)$ ,  $v = \sin(\pi/6)$ , з розв'язком

$u_{ext}(x) = G[m\beta_1(x_1) + v\beta_2(x_2)]G[m\beta_2(x_2) - v\beta_1(x_1)]$ ,  $G(z) = \frac{1}{2}[1 + \text{erf}(z/\sqrt{2\mu})]$ , див. рис. 1

та числом Пекле  $Pe = \mu^{-1} \max_{x \in \Omega} \sqrt{\beta_1^2(x) + \beta_2^2(x)} \cong 0.8062 \mu^{-1} = 806.2$ . Деякі важливі результати розв'язування задачі (6) з використанням лінійних апроксимацій МСЕ на рівномірних сітках продемонстровано на рис. 1 та зібрано у таблиці 1. В них і всюди далі допустима точність у GMRES  $\delta = 10^{-8}$ , а розмірність базису  $m = 200$ . На рис. 1 видно, що похибки апроксимацій МСЕ зосереджені у внутрішньому шарі, де точний розв'язок має найбільші градієнти.

У таблиці 1 спостерігається стабільний перший порядок збіжності числових схем, як це апріорно встановлено для лінійних апроксимацій. Крім того, таблиця 1

демонструє високу ефективність реалізованих числових схем при проведенні обчислень з процесором Intel i5-2450 з частотою 2.8 ГГц із затратами пам'яті до 9 Гб. Такого результату вдалось досягнути, зокрема, за рахунок обчислення початкового наближення для GMRES з попереднього кроку згущення триангуляції.

Основною трудностю описаного числового розв'язування сингулярно збурених задач, таких як (6), див. також [1, 4-7], є необхідність великої кількості вузлів на рівномірних сітках, щоб зменшити похибки апроксимацій до прийняттого рівня, див. таблиця 1. Одним із способів вирішення цієї проблеми є локальне згущення триангуляцій МСЕ, яке детальніше розглянуто в третьому розділі.

Для побудованих числових схем як теоретично, так і з використанням числових експериментів, встановлено стійкість та збіжність, продемонстровано ефективність застосування GMRES та інших особливостей побудованих  $h$ -адаптивних схем МСЕ.

**Третій розділ** присвячено побудові апостеріорних оцінювачів похибок, які розглядаються як наближення до розв'язку лінеаризованої задачі про похибку вже знайденої апроксимації  $u_h \in V_h$  розв'язку  $u \in V$  задачі (4):

$$\begin{cases} \text{задано } u_h \in V_h; \text{ знайти } e := u - u_h \in E, V = E \oplus V_h, \text{ таку, що} \\ b_\Omega(u_h; e, v) = \rho_\Omega(u_h; v) \quad \forall v \in E, \end{cases} \quad (7)$$

$$\rho_\Omega(w; v) := \langle n_\Omega(w), v \rangle - a_\Omega(w, v), \quad b_\Omega(w; z, v) := a_\Omega(z, v) - \int_\Omega f_u[w] z v dx \quad \forall w, z, v \in V. \quad (8)$$

Розв'язок дискретизованої задачі (7)  $e_h$  шукаємо у підпросторі  $E_h \subset E$ ,  $\dim E_h < +\infty$ , з базисом  $\{\phi_K\}_{K \in \mathfrak{T}_h}$ ,  $\text{supp } \phi_K := \bar{K}$ ,  $\phi_K \in E_h(K) := \{v \in H^1(K), v(A_i) = 0 \quad \forall A_i \in K\}$ , де  $A_i$  – вузли скінченного елемента  $K$ . Внаслідок ортогональності цього базису АОП обчислюється на кожному  $K$  незалежно від сусідніх елементів триангуляції  $\mathfrak{T}_h$

$$e_K(x) := e_h|_K = \lambda_K \phi_K(x) = \rho_K(u_h; \phi_K) b_K^{-1}(u_h; \phi_K, \phi_K) \phi_K(x), \quad x \in K \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h. \quad (9)$$

Описана вище загальна схема побудови АОП реалізована двома способами:

- (i)  $E_h(K) \equiv E_h^{Dir}(K) := \{v \in H^1(K) : v = 0 \text{ на } \partial K\}$  – простір індикаторів Діріхле;
- (ii)  $E_h(K) \equiv E_h^{Neu}(K) := \{v \in H^1(K) : v(A_i) = 0 \quad \forall A_i \in K\}$  – простір індикаторів Неймана.

За базиси просторів індикаторних функцій оцінювачів похибок вибрано наступні:

$$(i) \quad \phi_T^{Dir} := 27L_1L_2L_3, \quad \phi_T^{Neu} := 3(L_1L_2 + L_2L_3 + L_3L_1) \quad \forall K = T \in \mathfrak{T}_h \quad (10)$$

для лінійних апроксимацій,  $\{L_i\}_{i=1}^3$  – барицентричні координати трикутника  $K = T$ ;

$$(ii) \quad \phi_Q^{Dir}(\alpha, \beta) := (1 - \alpha^2)(1 - \beta^2), \quad \phi_Q^{Neu}(\alpha, \beta) := 1 - \frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^2) \quad \forall K = Q \in \mathfrak{T}_h \quad (11)$$

для білінійних апроксимацій на  $K = Q$  з локальними координатами  $(\alpha, \beta) \in [-1, 1]^2$ ;

$$(iii) \quad \phi_Q^{Dir}(\alpha, \beta) := (1 - \alpha^2)(1 - \beta^2)(\alpha + \beta), \quad \phi_Q^{Neu}(\alpha, \beta) := \alpha + \beta - \alpha^3 - \beta^3 \quad \forall K = Q \in \mathfrak{T}_h \quad (12)$$

для квадратичних серендипових апроксимацій на чотирикутнику  $K = Q$ .

Розглядаючи випадок лінійних варіаційних задач визначимо поповнений підпростір  $W_h := V_h \oplus E_h \subset V$  і розглянемо варіаційну задачу

$$\text{знайти } \bar{u}_h \in W_h \text{ такий, що } a_\Omega(\bar{u}_h, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in W_h. \quad (13)$$

**Теорема 3.1.** (Про двосторонні оцінки похибок апроксимації Гальоркіна [1])

Нехай  $u \in V$  розв'язок лінійного варіанту задачі (4),  $u_h \in V_h$  її апроксимація та  $\bar{u}_h \in W_h = V_h \oplus E_h$  розв'язок задачі (13). Нехай виконується умова насиченості

$$\|u - \bar{u}_h\|_V \leq \chi \|u - u_h\|_V \quad \forall h > 0, \quad 0 < \chi < 1, \quad \|w\|_V^2 := a_\Omega(w, w). \quad (14)$$

Тоді існують наступні двосторонні оцінки похибки  $e := u - u_h \in V$

$$(1 + \chi)^{-1} \|\bar{u}_h - u_h\|_V \leq \|u - u_h\|_V \leq (1 - \chi)^{-1} \|\bar{u}_h - u_h\|_V.$$

**Теорема 3.2.** (Про надійність та ефективність АОП Діріхле [1])

Нехай умови теореми 3.1 доповнено підсиленою нерівністю Коши

$$|a_\Omega(v, w)| \leq \gamma \|v\|_V \|w\|_V \quad \forall v, w \in V, \quad 0 < \gamma < 1.$$

Тоді АОП  $e_h \in E_h$  визначає двосторонні оцінки похибки  $e \in V$  такого татунку:

$$\|e_h\|_V \leq \|u - u_h\|_V \leq C \|e_h\|_V, \quad \text{де стала } C = (1 - \chi)^{-1} (1 - \gamma^2)^{-1/2}. \quad (15)$$

**Теорема 3.3.** (Про розв'язки задач Діріхле та Неймана [5])

Нехай  $e_K^{Dir}$  та  $e_K^{Neu}$  є розв'язками локальних задач Діріхле та Неймана:

$$\text{знайти } e_K^{Dir} \in E_h^{Dir}(K) \subset H_0^1(K), \text{ такий, що } a_\Omega(e_K^{Dir}, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in H_0^1(K),$$

$$\text{знайти } e_K^{Neu} \in E_h^{Neu}(K) \subset H^1(K), \text{ такий, що } a_\Omega(e_K^{Neu}, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in H^1(K),$$

для будь-яких  $K \in \mathfrak{T}_h$  і лінійного неперервного функціоналу  $l \in L(H^1(K), \mathbb{R})$ .

Тоді справджуються наступні твердження:

$$(i) \text{ про ортогональність } a(e_K^{Dir} - e_K^{Neu}, v) = 0 \quad \forall v \in E_h^{Dir}(K) \subset H_0^1(K),$$

(ii) про підпорядкованість розв'язків задач Діріхле та Неймана

$$\|e_K^{Dir}\|_K \leq \|e_K^{Neu}\|_K, \quad \|w\|_K^2 := a_K(w, w) \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h,$$

$$\|e_h^{Dir}\|_\Omega \leq \|e_h^{Neu}\|_\Omega, \quad \|w\|_\Omega^2 := \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \|w\|_K^2.$$

**Теорема 3.4** (Про двосторонні оцінки АОП Діріхле та Неймана [7])

Нехай  $e := u - u_h \in V$ , а  $\tilde{e}_K^{Dir}$  і  $\tilde{e}_K^{Neu}$  є розв'язками задач Діріхле

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Задано } u_h \in V_h; \text{ знайти } \tilde{e}_K^{Dir} \in H_0^1(K) \text{ такий, що} \\ a_K(\tilde{e}_K^{Dir}, v) = \langle \rho_K(u_h), v \rangle \quad \forall v \in H_0^1(K) \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h, \end{array} \right.$$

та Неймана

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Задано } u_h \in V_h; \text{ знайти } \tilde{e}_K^{Neu} \in H^1(K) \text{ такий, що} \\ a_K(\tilde{e}_K^{Neu}, v) = \langle \rho_K(u_h), v \rangle \quad \forall v \in H^1(K) \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h. \end{array} \right.$$

Тоді будуть правильними наступні двосторонні оцінки

$$\|\tilde{e}_K^{Dir}\|_K \leq \|e\|_K \leq \|\tilde{e}_K^{Neu}\|_K \quad \forall K \in \mathfrak{T}_h, \quad (16)$$

$$\eta_\Omega^{Dir} := \sqrt{\sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \|\tilde{e}_K^{Dir}\|_K^2} \leq \|e\|_\Omega \leq \eta_\Omega^{Neu} := \sqrt{\sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \|\tilde{e}_K^{Neu}\|_K^2}. \quad (17)$$

Серією обчислювальних експериментів з використанням програм автора одержані АОП з індикаторами (10)-(12) апробовано низкою модельних задач [1, 4-7] на рівномірних сітках. Деякі результати цих експериментів подані на рис. 2 та у таблиці 2. Отримані результати показують, що АОП Діріхле та Неймана стабільно обчислюють двосторонні межі істинних похибок вжитих апроксимацій МСЕ з

індексами ефективності близькими до 1.0. Побудовані АОП збігаються до істинної похибки з порядком збіжності відповідних їм апроксимацій МСЕ.

Обчислення апроксимацій із наперед заданою точністю здійснюється  $h$ -адаптивним МСЕ, який базується на знаходженні поелементно визначеної апостеріорної оцінки похибки (9) і відшуканні множини  $S_k \subset \mathfrak{T}_k$  трикутників  $K \in \mathfrak{T}_h$ , для яких величина індикатора

$$\eta_K := \sqrt{N} \|e_K\|_{1,K} \|u_h + e_h\|_{1,\Omega}^{-1} 100\% \quad (18)$$

перевищує заданий допустимий рівень  $TOL$ . Критерій адаптування (18) націлено на досягнення рівномірного розподілу похибки по скінченних елементах  $\mathfrak{T}_h$ .

Поділ трикутників  $K \in S_k$  виконується методом бісекції, який генерує вкладені триангуляції з мінімально можливим кутом, що не менший за половину мінімального кута стартової триангуляції. Надлишковість локального поділу, що спричинена поділом деяких сусідніх трикутників, незначно впливає на обсяг обчислень, при цьому вкладеність сіток гарантує збіжність  $h$ -адаптування, встановлену теоремою 3.5.

**Лема 3.1.** (Про квазі-ортогональність<sup>1</sup>)

Нехай послідовність вкладених триангуляцій  $\mathfrak{T}_0 \subset \mathfrak{T}_1 \subset \dots \subset \mathfrak{T}_k$  скінченних елементів задовольняє умову

$$Ch_0^s \|\beta\|_{L^\infty(\Omega)} < 1, \quad C > 0, \quad s \in (0,1],$$

і апроксимації  $u_k \in V_k$  та  $u_{k+1} \in V_{k+1}$  обчислено у підпросторах  $V_k \subset V_{k+1} \subset V$ , тоді

$$\|u - u_{k+1}\|_V^2 \leq C_0 \|u - u_k\|_V^2 - \|u_{k+1} - u_k\|_V^2, \quad C_0 := (1 - Ch_0^s \|\beta\|_{L^\infty(\Omega)})^{-1}.$$

**Теорема 3.5.** (Про збіжність  $h$ -адаптивного МСЕ)

Нехай послідовність апроксимацій МСЕ  $\{u_k\}_{k \in \mathbb{N}_0}$  генерується описаним у дисертаційній роботі  $h$ -адаптивним алгоритмом і виконуються умови Лема 3.1.

Тоді за умови насиченості (14) послідовність похибок таких апроксимацій збігається до нуля згідно оцінки

$$\|u - u_{k+1}\|_V^2 \leq \xi^k \|u - u_0\|_V^2, \quad \xi := (1 - C_\gamma h_0^s \|\beta\|_{L^\infty(\Omega)})^{-1} - (1 - \chi)^2 \in (0,1).$$

Рис. 3 і таблиця 3 демонструють значну перевагу застосування  $h$ -адаптивних схем МСЕ до розв'язування задачі (6): отримано майже вдвічі менші похибки, ніж у випадку використання рівномірних сіток (див. рис. 2, таблиці 1-2). Неважко бачити, що АОП Діріхле та Неймана обчислюють нижню та верхню межі істинної похибки на локально згущуваних сітках, а критерій адаптування (18) з АОП Діріхле є більш економним. В таблиці 3 видно, що  $h$ -адаптивний МСЕ збігається, як це встановлено в теоремі 3.5, та забезпечує вищі порядки збіжності, див. таблиця 3, лінійних апроксимацій та їхніх АОП.

Таблиці 2 та 3 чисельно підтверджують нерівності (16), (17) Теорема 3.4.

<sup>1</sup> Mekchay K. Convergence of adaptive finite element methods for general second order linear elliptic PDE / K. Mekchay, R. Nochetto // SIAM J. Numer. Analysis. – 2002. – № 43. – P. 1803–1827.

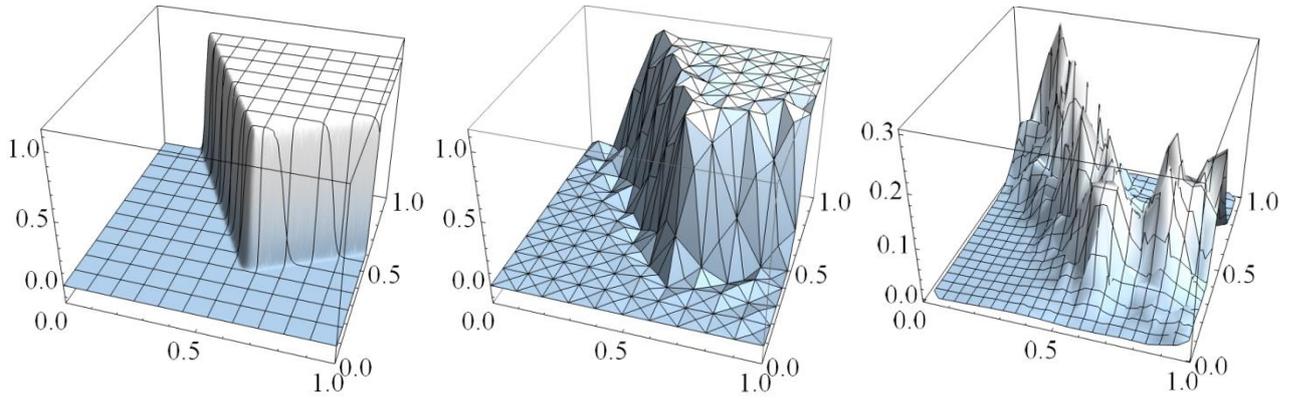


Рис. 1. Точний розв'язок задачі (6) (зліва), його кусково-лінійна апроксимація на рівномірній сітці з  $Nod \mathfrak{S}_h = 221$ ,  $\varepsilon^{Ext} = 50\%$  (посередині) та розподіл похибки  $\|u - u_h\|_{1,K}$  (справа).

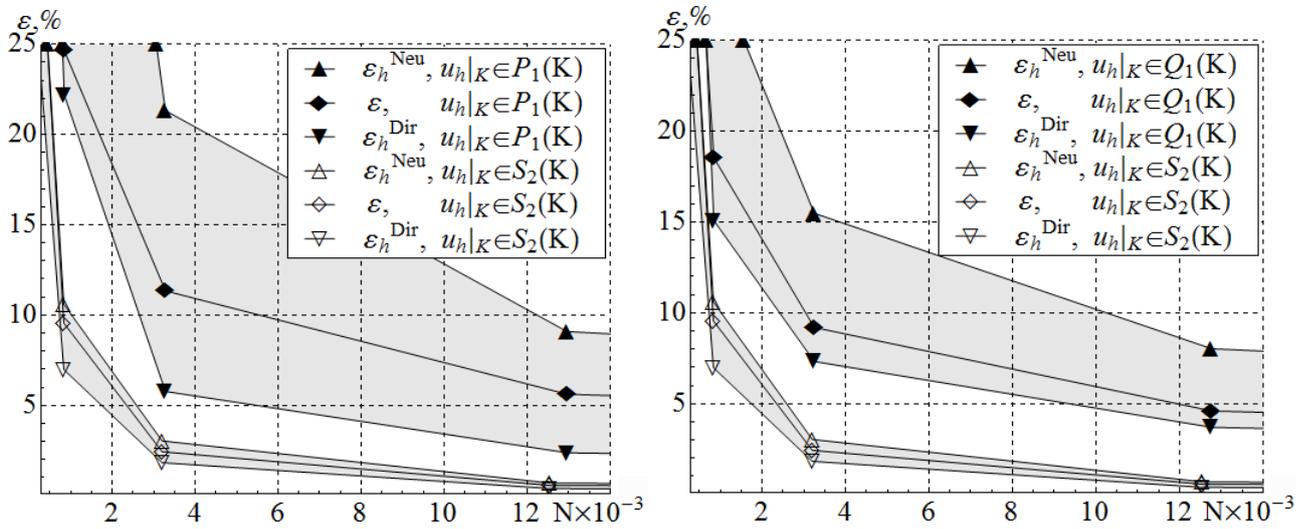


Рис. 2. Збіжність кусково-квадратичних серендипових  $S_2(K)$ , лінійних  $P_1(K)$  та білінійних  $Q_1(K)$  апроксимацій MSE на рівномірних сітках.

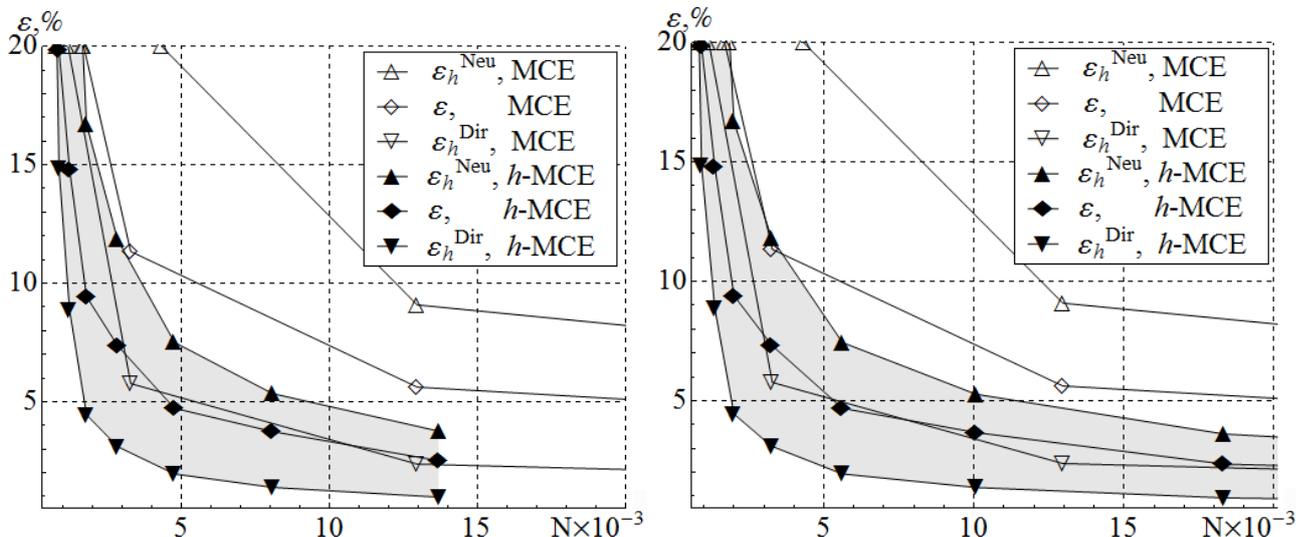


Рис. 3. Збіжність лінійних апроксимацій MSE на рівномірних та локально згущуваних трикутних сітках. У критерії адаптування (18) використано АОП Діріхле (зліва) та АОП Неймана (справа).

Таблиця 1.

Збіжність лінійних апроксимацій МСЕ для (6) на рівномірних трикутних сітках.  
 $Nod \mathfrak{T}_h$  – кількість вузлів, а  $Card \mathfrak{T}_h$  – кількість скінченних елементів  $\mathfrak{T}_h$ ,  
 $\kappa^a := \|e_h^a\|_{1,\Omega} \|e_h^{Ext}\|_{1,\Omega}^{-1}$  – індекси ефективності АОП;  $\varepsilon_h^a := \|e_h^a\|_{1,\Omega} \|u\|_{1,\Omega}^{-1} 100\%$  –  
відповідні відносні похибки та  $p^a := 2 \ln(\|e_{h,k}^a\|_{1,\Omega} \|e_{h,k+1}^a\|_{1,\Omega}^{-1}) (\ln(N_{k+1} N_k^{-1}))^{-1}$  – порядки  
збіжності,  $a = Dir, Ext$  або  $Neu$ ,  $e_h^{Ext} := u - u_h$ ,  $N_k := Nod \mathfrak{T}_h$  на  $k$ -тому кроці  
згущення сітки,  $T_C, T_S$  – час в секундах на формування та розв'язування СЛАР.

$k$	$Nod \mathfrak{T}_h$	$Card \mathfrak{T}_h$	$\ e_h^{Ext}\ _{1,\Omega}$	$\varepsilon_h^{Ext}$	$\ u_h\ _{1,\Omega}$	$p^{Ext}$	$T_C$	$T_S$
1	841	1 600	0.831	24.658	3.336	1.0	1	1
2	3281	6 400	0.382	11.344	3.361	1.1	1	1
3	12 961	25 600	0.189	5.620	3.368	1.0	1	1
4	51 521	102 400	0.095	2.809	3.371	1.0	8	2
5	205 441	409 600	0.047	1.404	3.371	1.0	60	5
6	820 481	1 638 400	0.024	0.702	3.371	1.0	300	30
7	3 279 361	6 553 600	0.012	0.351	3.371	1.0	700	200

Таблиця 2.

Збіжність квадратичних серендипових апроксимацій МСЕ для задачі (6) та їхніх апостеріорних оцінювачів похибок на рівномірно згущуваних сітках

$k$	$Nod \mathfrak{T}_h$	$Card \mathfrak{T}_h$	$\varepsilon_h^{Dir}$	$\varepsilon_h^{Ext}$	$\varepsilon_h^{Neu}$	$\kappa^{Dir}$	$\kappa^{Neu}$	$p^{Dir}$	$p^{Ext}$	$p^{Neu}$
1	225	64	24.824	33.182	33.019	0.8	1.0	-	-	-
2	833	256	6.983	9.558	10.606	0.7	1.1	1.8	1.8	1.7
3	3 201	1 024	1.824	2.430	3.033	0.8	1.2	1.9	2.0	1.8
4	12 545	4 096	0.390	0.569	0.701	0.7	1.2	2.2	2.1	2.1
5	49 665	16 384	0.085	0.135	0.160	0.6	1.2	2.2	2.1	2.1
6	197 633	65 536	0.020	0.033	0.039	0.6	1.2	2.1	2.0	2.0
7	788 481	262 144	0.005	0.008	0.010	0.6	1.2	2.0	2.0	2.0
8	3 149 825	1 048 576	0.001	0.002	0.002	0.5	1.1	2.0	2.0	1.9

Таблиця 3.

Збіжність лінійних апроксимацій  $h$ -адаптивного МСЕ для задачі (6) та їхніх АОП, критерій адаптування (18) з АОП Діріхле,  $\delta = 1\%$ .

$k$	$Nod \mathfrak{T}_h$	$Card \mathfrak{T}_h$	$\varepsilon_h^{Dir}$	$\varepsilon_h^{Ext}$	$\varepsilon_h^{Neu}$	$\kappa^{Dir}$	$\kappa^{Neu}$	$p^{Dir}$	$p^{Ext}$	$p^{Neu}$
1	1 301	2 500	13.603	18.938	44.679	0.7	2.6	-	-	-
2	1 678	3 240	8.251	14.202	29.653	0.6	2.2	3.9	2.2	3.6
3	2 296	4 476	4.211	9.032	15.856	0.5	1.8	4.2	2.8	4.1
4	3 443	6 754	2.946	7.054	11.249	0.4	1.6	1.7	1.2	1.7
5	5 504	10 870	1.862	4.534	7.164	0.4	1.6	1.9	1.9	1.9
6	9 071	17 978	1.326	3.598	5.118	0.4	1.4	1.4	0.9	1.3
7	15 057	29 946	0.936	2.419	3.616	0.4	1.5	1.4	1.6	1.4

У четвертому розділі побудовано ОРС інтегрування за часом напівдискретизованих МСЕ квазілінійних початково-крайових задач (2). Застосовано у роботі специфікою побудови цієї схеми є урівноваження порядків похибок кусково-лінійної апроксимації в часі та лінеаризації. Така особливість дала змогу сконструювати числову схему ґатунку предиктор-коректор з ваговим параметром.

Підставляючи до задачі (2) лінійну апроксимацію

$$\mathbf{u}(t) \approx \mathbf{u}_{\Delta}(t) = \mathbf{u}^j + (t - t_j)\mathbf{v}^{j+1/2}, \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 0, \dots, M-1, \quad (19)$$

отримуємо дискретизовану задачу вигляду

$$\begin{cases} \text{задано } \mathbf{u}^0 \in \mathbb{R}^N, \Delta t > 0; \text{ знайти } \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ \mathbf{v}^{j+1/2} = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}^j + (t - t_j)\mathbf{v}^{j+1/2}], \quad \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2} \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 0, \dots, M-1, \end{cases} \quad (20)$$

для якої, на підставі принципу стискаючих відображень, встановлено достатні умови коректності. Зважаючи на порядок похибки наближення (19), знехтуємо величинами порядку  $O(\Delta t^2)$  у розвиненні функції  $\mathbf{f}$  за формулою Тейлора в околі  $(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2})$ , де  $\bar{\mathbf{u}}^{j+1/2} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^j$ . Позначивши  $\mathbf{v}^j := \mathbf{f}[t_j, \mathbf{u}^j]$ ,  $\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} := \mathbf{f}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]$ , одержимо таку схему розв'язування задачі (20):

$$\begin{cases} \text{задано } \mathbf{u}^j, \mathbf{v}^j, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} \in \mathbb{R}^N, \Delta t > 0, \theta \in [0, 1]; \\ \text{знайти вектори } \mathbf{v}^{j+1/2}, \mathbf{u}^{j+1} := \mathbf{u}^j + \Delta t \mathbf{v}^{j+1/2} \in \mathbb{R}^N \text{ такі, що} \\ \{\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\}(\mathbf{v}^{j+1/2} - \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}) = \Delta t(\theta - \frac{1}{2})\mathbf{f}_t[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}] \\ \quad + \Delta t \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}](\theta \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} - \frac{1}{2} \mathbf{v}^j), \quad j = 0, \dots, M-1. \end{cases} \quad (21)$$

**Теорема 4.2** (Про коректність системи рівнянь ОРС [2])

Нехай на кожному кроці інтегрування ОРС (21) задачі (2) виконується

$$\frac{1}{2} \Delta t \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t, \mathbf{v})\| < 1 \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad \forall \mathbf{v} \in S := \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N : \|\mathbf{w}\| < +\infty\}.$$

Тоді система рівнянь ОРС (21) має єдиний розв'язок

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{j+1/2} &= \bar{\mathbf{v}}^{j+1/2} + \{\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\}^{-1} \\ &\quad \times \Delta t \{(\theta - \frac{1}{2})\mathbf{f}_t[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}] - \frac{1}{2} \mathbf{f}_{\mathbf{u}}(t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}) \mathbf{v}^j\}, \end{aligned} \quad (22)$$

де

$$\{\mathbf{I} - \Delta t \theta \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\}^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \{\frac{1}{2} \Delta t \mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\}^k.$$

Більше цього,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{v}^{j+1/2}\| &\leq \|\bar{\mathbf{v}}^{j+1/2}\| + \{1 - \Delta t \theta \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\| \}^{-1} \\ &\quad \times \Delta t \{|\theta - \frac{1}{2}| \|\mathbf{f}_t[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\| + \frac{1}{2} \|\mathbf{f}_{\mathbf{u}}[t_{j+1/2}, \bar{\mathbf{u}}^{j+1/2}]\| \|\mathbf{v}^j\|\}. \end{aligned} \quad (23)$$

У розділі доведено, що за достатньої регулярності шуканого розв'язку задачі Коші, запропонована ОРС (21) здатна досягати квадратичної швидкості збіжності апроксимацій. ОРС (21) є безітераційною, оскільки на кожному кроці інтегрування за часом вимагає одноразового розв'язування лінеаризованої системи рівнянь відносно вектора  $\mathbf{v}^{j+1/2} \in \mathbb{R}^N$ . Іноді для контролю (та підвищення) точності

обчислення цього вектора варто скористатися декількома додатковими ітераціями методу Ньютона, див. [2].

У п'ятому розділі описано проекційно-сіткові схеми розв'язування квазілінійної початково-крайової задачі (3) у такій варіаційній постановці:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти вектор } \mathbf{u} \in \mathbf{W} := L^\infty(0, T; [L^2(\Omega)]^p) \cap L^2(0, T; V^p) \text{ такий, що} \\ m(\mathbf{u}'(t), \mathbf{v}) + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = \langle n[\mathbf{u}(t)], \mathbf{v} \rangle \quad \forall t \in (0, T], \\ m(\mathbf{u}(0) - \mathbf{u}^0, \mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{W}, \end{array} \right. \quad (24)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} b(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \left[ \sum_{r=1}^p \mu_r (\nabla v_r)^T \nabla u_r + \mathbf{v}^T (\beta \nabla \mathbf{u} + \sigma \mathbf{u}) \right] dx + \int_{\Gamma_q} \mathbf{v}^T (G \mathbf{u}) d\gamma, \\ m(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \rho \mathbf{u} dx, \quad \langle n[\mathbf{u}], \mathbf{v} \rangle := \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{f}[\mathbf{u}] dx - \int_{\Gamma_q} \mathbf{v}^T \mathbf{g} d\gamma \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbf{W}. \end{array} \right. \quad (25)$$

Спочатку задача (3) напівдискретизацією МСЕ за просторовими змінними зводиться до жорсткої нелінійної задачі Коші вигляду:

$$\mathbf{u}'(t) = \mathbf{f}[t, \mathbf{u}(t)] := \mathbf{M}^{-1} \{ \mathbf{N}[t, \mathbf{u}(t)] - \mathbf{B}\mathbf{u}(t) \}, \quad \mathbf{u}^0 = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{w}^0. \quad (26)$$

Далі задача (26) інтегрується ОРС (21) з ітераціями Ньютона. Дана проекційно-сіткова схема досліджується на стійкість, збіжність та застосовується до розв'язування задачі про окиснення чадного газу на поверхні платини<sup>2</sup>: задано параметри  $a, b, \omega, T$  та область  $\Omega = (0, 50)^2$ ; знайти ступені покриття молекулами СО  $u = u(x, t)$  і реконструкції  $w = w(x, t)$  поверхні платини такі, що

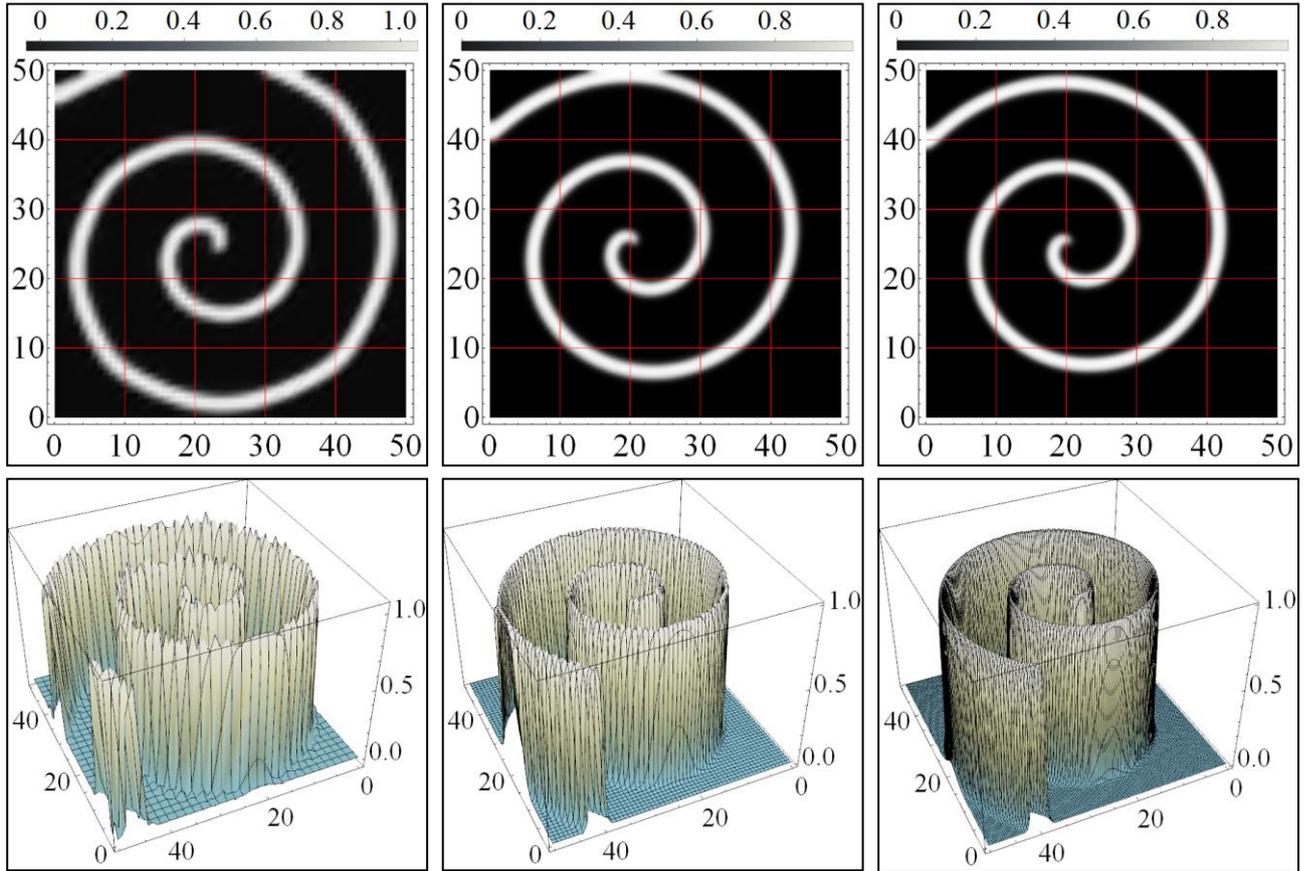
$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t u - \nabla \cdot (\nabla u) = \omega^{-1} u(u-1)[u - (w+b)a^{-1}], \\ \partial_t w = -w + \begin{cases} 1 - 6.75u(u-1)^2, & u \in (\frac{1}{3}, 1), \\ 0, & u \notin (\frac{1}{3}, 1), \end{cases} \quad \text{в } \Omega \times (0, T], \\ -(\nabla u) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ на } \partial\Omega \times [0, T], \quad u|_{t=0} = 0.02x_1, \quad w|_{t=0} = 0.02x_2(a-2b) \text{ в } \Omega. \end{array} \right. \quad (27)$$

Тут  $a = 0.84$ ,  $b = 0.19$ ,  $\omega = 0.025$ ,  $T = 14$ , початкові розподіли інгредієнтів вибрано методом перехресних градієнтів, що створює передумови зародження спіральних хвиль в процесі реакції окиснення.

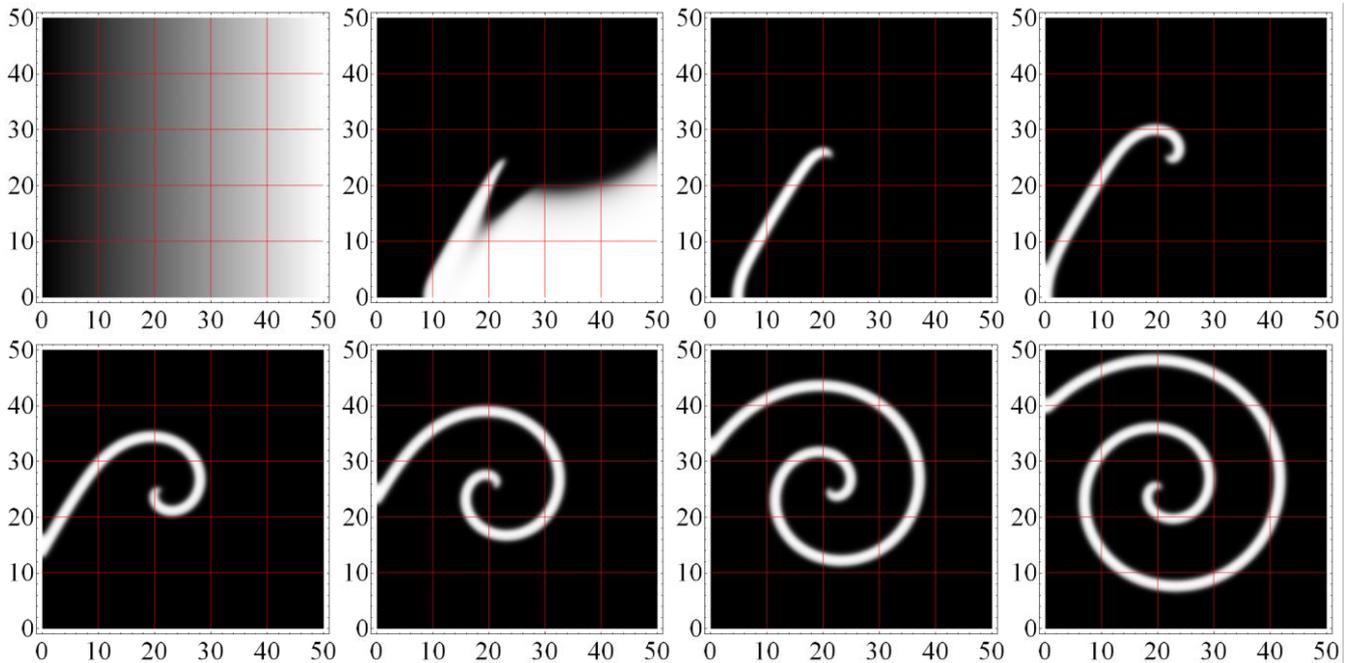
Рис. 5 демонструє уточнення структури обчислених апроксимацій розробленої схеми з квадратичними серендиповими елементами при послідовному згущенні розрахункових сіток, всі наближення добре узгоджуються з результатами авторів цієї моделі. Рис. 6 показує етапи еволюції структури спіральної хвилі через кожні дві одиниці часу протягом перших 18-ти секунд цього процесу.

В роботі числовими експериментами підтверджено, що для задачі (27) порядки збіжності за просторовою та часовою змінними побудованих числових схем для кусково-лінійних, білінійних та квадратичних серендипових апроксимацій МСЕ відповідають апріорно встановленим для цих апроксимацій та схеми Кранка-Ніколсон.

<sup>2</sup> Bar M. Spiral waves in a surface reaction: Model calculations / M. Bar, N. Gottschalk, M. Eiswirth, G. Ertl // J. Chem. Phys. – 1994. – № 100. – P. 1202–1214.



**Рис. 5.** Апроксимація ступеня покриття СО поверхні платини для моделі (27) на рівномірних чотирикутних сітках, зліва направо:  $30 \times 30$ ,  $60 \times 60$  і  $120 \times 120$  відповідно,  $T = 14$ ,  $\Delta t = 0.01$ .



**Рис. 6.** Зародження спіральної хвилі ступеня покриття молекулами СО поверхні платини.

## ВИСНОВКИ

У даній дисертаційній роботі на основі методу скінченних елементів розроблено та досліджено наступні числові методи, які дають змогу підвищити ефективність розв'язування задач ДАР:

- i)*  $h$ -адаптивний МСЕ для розв'язування сингулярно-збурених та/або квазілінійних крайових задач ДАР;
- ii)* однокрокова рекурентна схема для розв'язування напівдискретизованих МСЕ квазілінійних початково-крайових задач специфічної структури;
- iii)* проекційно-сіткова схема для розв'язування початково-крайових задач ДАР для системи квазілінійних параболічних рівнянь.

Побудовані в роботі апостеріорні оцінювачі похибок дають змогу швидко, надійно та ефективно обчислювати наближення двосторонніх оцінок похибок кусково-лінійних, білінійних та квадратичних серендипових скінченно-елементних апроксимацій як на рівномірних, так і на локально згущуваних триангуляціях  $\mathfrak{T}_h$ . Дані характеристики доведенням відповідних теорем теоретично обґрунтовано та реалізовано з використанням наступних особливостей побудованих АОП:

- i)* проста структура, яка легко імплементується у числові схеми та дає змогу замінити числове інтегрування аналітичним;
- ii)* послідовне та незалежне від сусідніх скінченних елементів (поелементне) обчислення АОП, яке не потребує розв'язування СЛАР;
- iii)* апостеріорні оцінювачі Діріхле та Неймана апроксимують розв'язок задачі про похибку в просторах  $H_0^1(K)$  та  $H^1(K) \forall K \in \mathfrak{T}_h$  відповідно, звідки впливає їхня здатність обчислювати двосторонні оцінки похибок.

Корисними особливостями цих АОП є їхня придатність для контролю похибок у процесі обчислень методом скінченних елементів й можливість використання останніх для супутньої модифікації просторів апроксимацій. В обчислювальний алгоритм це втілюється критерієм адаптування сітки, який зорієнтований на рівномірний розподіл похибки та досягнення апроксимаціями заданого рівня точності. Для згущення трикутних сіток нами використовується метод бісекцій, який гарантує збіжність  $h$ -адаптивного процесу внаслідок вкладеності адаптованих ним триангуляцій та є простим в реалізації, що приводить до мізерної на практиці надлишковості згущення сітки. Низка числових досліджень сингулярно збурених задач підтвердили суттєву перевагу  $h$ -адаптивного над класичним МСЕ.

Запроваджена у роботі однокрокова рекурентна схема інтегрування напівдискретизованої МСЕ квазілінійної початково-крайової задачі з урівноваженням порядків похибок дискретизації за часом та лінеаризації у виконаних числових експериментах продемонструвала, порівняно з класичним застосуванням методу Ньютона, суттєве зменшення трудомісткості обчислень.

Збіжність, стійкість, апроксимативність побудованих числових схем МСЕ були теоретично обґрунтовані та підтверджені результатами числових експериментів: розв'язуванням модельних, тестових задач та моделюванням реакції окиснення чадного газу в різних випадках.

Всі запропоновані в роботі числові схеми втілено в оригінальному та гнучкому програмному забезпеченні з широким вибором параметрів обчислення. Одним із завдань його розробки було максимальне врахування конструктивних переваг запропонованих у роботі алгоритмів дослідження задач дифузії-адвекції-реакції. Зокрема ітераційна природа застосованих рекурентних та адаптивних схем стала підставою для вибору методу узагальнених мінімальних нев'язок GMRES для розв'язування СЛАР великих порядків. Розрідженість результуючих матриць враховано використанням CSIR – ефективного формату зберігання ненульових коефіцієнтів. Останній, крім істотної економії пам'яті комп'ютера в просторових ітераціях  $h$ -адаптивного МСЕ дає змогу уникнути перенумерації вузлів сітки з метою підтримки стрічкової структури матриці СЛАР. У проекційно-сіткових схемах, де проводиться багаторазове обчислення СЛАР великих порядків з однаковою структурою формату зберігання CSIR, запропонована в дисертації оптимізація доступу до елементів матриці привела до значного приросту швидкості обчислень.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ НАУКОВИХ ПРАЦЬ

### *Наукові статті у вітчизняних фахових виданнях:*

1. Вовк О. В. Апостеріорні оцінювачі похибки серендипових квадратичних апроксимацій МСЕ для еліптичних крайових задач / О. В. Вовк, Г. Квасниця, О. Ю. Остапов, Г. А. Шинкаренко // Вісн. Львів. ун-ту. Серія прикл. мат. та інф. – 2014. – Вип. 21. – С. 67–78.
2. Вовк О. В. Інтеграція ньютонівської лінеаризації у часову дискретизацію початково-крайових задач / О. В. Вовк, Г. А. Шинкаренко // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2013. – Вип. 56, № 2. – С. 60–71. *Te same:* Vovk O. V. Integration of Newton linearization into the time discretization of initial-boundary-value problems / O. V. Vovk, H. A. Shynkarenko // J. Math. Sciences. – 2014. – V. 203, № 1. – С. 70–86.
3. Вовк О. В. Проекційно-сіткова схема розв'язування еволюційних задач окиснення чадного газу на поверхні платини / О. В. Вовк, Н. І. Павленко, Г. А. Шинкаренко, В. Д. Вовк // Вісн. Львів. ун-ту. Серія прикл. мат. та інф. – 2012. Вип. 18. – С. 54–69.
4. Shynkarenko H. A. A posteriori error estimations for finite element approximations on quadrilateral meshes / H. A. Shynkarenko, O. V. Vovk // J. Comput. Appl. Math. – 2013. – N. 3 (113). – P. 107–118.

### *Наукові статті у закордонних виданнях:*

5. Kvasnytsia H. A. Computable double-sided a posteriori error estimates and  $h$ -adaptive finite element approximations / H. A. Kvasnytsia, O. Yu. Ostapov, H. A. Shynkarenko, O. V. Vovk // Manufacturing Process. Actual Problems-2014. – Opole : Politechnika Opolska. – 2014. – Vol. 1. – P. 87–102.
6. Ostapov O. Yu. A posteriori error estimator and  $h$ -adaptive finite element method for diffusion-advection-reaction problems / O. Yu. Ostapov, H. A. Shynkarenko, O. V. Vovk // Recent Advances in Comput. Mech., Taylor & Francis Group, London. – 2014. – P. 329–337.
7. Ostapov O. Yu. Computable two-sided a posteriori error estimates for  $h$ -adaptive finite element method / O. Yu. Ostapov, O. V. Vovk, H. A. Shynkarenko // Advances in Mechanics: Theoretical, Computational and Interdisciplinary Issues. – Taylor & Francis Group, 2016. – P. 449–453.
8. Ostapov O. Yu. Finite element adaptive refinement techniques for diffusion-advection-reaction problems / O. Yu. Ostapov, H. A. Shynkarenko, O. V. Vovk // Manufacturing Processes. Actual Problems-2013. – Opole : Politechnika Opolska. – 2013. – Vol. 1. – P. 31–46.
9. Shynkarenko H. A. Numerical modeling of spiral waves on surface carbon monoxide oxidation reaction / H. A. Shynkarenko, O. V. Vovk // Manufacturing Process. Actual Problems-2015. – Opole : Politechnika Opolska. – 2015. – Vol. 1. – P. 91–112.

## АНОТАЦІЯ

**Вовк О. В.** *Числове моделювання нелінійних еволюційних задач дифузії-адвекції-реакції.* – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.01.07 – обчислювальна математика. – Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2016.

Дисертаційна робота присвячена розвитку та дослідженню проекційно-сіткових схем для розв'язування задач з рівняннями дифузії-адвекції-реакції, зокрема, сингулярно збурених та/або квазілінійних. В основу запропонованих числових схем покладено процедуру Гальоркіна з вибором просторів апроксимацій методу скінченних елементів (МСЕ), в тому числі, із застосуванням апостеріорних оцінок похибок і концепції  $h$ -адаптивності, та однокрокові рекурентні схеми інтегрування за часом. Дискретизовані системи рівнянь в разі необхідності попередньо лінеаризуються за Ньютоном і розв'язуються ітераціями методу узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES) з перезапусками та передобумовленням. Для обчислень апроксимацій МСЕ із наперед гарантованою точністю в розроблене програмне забезпечення імплементовано кусково-лінійні, білінійні і квадратичні серендипові базисні функції, оригінальні апостеріорні оцінювачі похибок та стратегії керування локальним згущенням вкладених триангуляцій методу бісекції. Якість, ефективність і надійність числових схем встановлено теоретично та проілюстровано детальним аналізом результатів обчислювальних експериментів з низкою тестових і модельних задач, зокрема, зародження та еволюції спіральних хвиль в реакції окиснення чадного газу на поверхні платини.

Серед одержаних в дисертації результатів і методів слід відзначити такі:

- (i) економні поелементно визначені апостеріорні оцінювачі Діріхле і Неймана залишкового гатунку, здатні обчислювати нижню і верхню межі похибки апроксимацій МСЕ, теоретичний та числовий аналіз щодо їхніх властивостей ефективності і надійності;
- (ii) ефективні  $h$ -адаптивні схеми з контролем двосторонніх меж похибки для лінійних і квазілінійних задач таких, які обчислюють збіжні послідовності кусково-лінійних апроксимацій МСЕ на локально згущуваних триангуляціях, конструйованих методом бісекції;
- (iii) економні однокрокові рекурентні схеми інтегрування задач Коші для напівдискретних систем рівнянь з узгодженням порядків похибок дискретизації в часі та похибок лінеаризації, обґрунтування їхньої стійкості та збіжності.

**Ключові слова:** задача дифузії-адвекції-реакції, сингулярна збуреність, нелінійність, метод скінченних елементів, однокрокова рекурентна схема, лінеаризація, апостеріорний оцінювач похибки, двосторонні оцінки похибки,  $h$ -адаптивна схема методу скінченних елементів, критерії адаптування, метод бісекції, GMRES, передобумовлення.

## АННОТАЦИЯ

**Вовк О. В.** *Численное моделирование нелинейных эволюционных задач диффузии-адвекции-реакции.* – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика. – Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2016.

Диссертационная работа посвящена развитию и исследованию проекционно-сеточных схем для решения задач с уравнениями диффузии-адвекции-реакции, в частности, сингулярно возмущённых и/или квазилинейных. В основу предложенных численных схем положено процедуру Галёркина с выбором пространств аппроксимаций метода конечных элементов (МКЭ), в т. ч. с применением апостериорных оценок погрешностей и концепции  $h$ -адаптивности, а также одношаговые рекуррентные схемы интегрирования. Дискретизированные системы уравнений в случае необходимости линеаризуются по Ньютону и решаются методом обобщенных минимальных невязок (GMRES) с перезапусками и предобуславливанием. Для определения аппроксимаций МКЭ с заранее гарантированной точностью в разработанное программное обеспечение имплементированы кусочно-линейные, билинейные и серендиповы квадратические базисные функции, оригинальные апостериорные оцениватели погрешностей и стратегии управления локальным сгущением вложенных триангуляций метода бисекции. Качество, эффективность и надежность численных схем установлены теоретически и проиллюстрированы детальным анализом результатов вычислительных экспериментов с рядом тестовых и модельных задач, в частности, зарождения и эволюции спиральных волн в реакции окисления угарного газа на поверхности платины.

Среди полученных в диссертации результатов и методов отметим следующие:

- (i) экономные поэлементно определенные апостериорные оцениватели погрешностей Дирихле и Неймана остаточного типа, способные вычислять нижний и верхний пределы погрешности аппроксимаций МКЭ, теоретический и численный анализ характеристик их эффективности и надежности;
- (ii) эффективные  $h$ -адаптивные схемы с контролем двусторонних пределов погрешности для линейных и квазилинейных задач таких, которые вычисляют сходящиеся последовательности кусочно-линейных аппроксимаций МКЭ на локально сгущаемых триангуляциях, сконструированных методом бисекции;
- (iii) экономные одношаговые рекуррентные схемы интегрирования задач Коши для полудискретных систем уравнений с согласованием порядков погрешности дискретизации по времени и погрешностей линеаризации, обоснование их устойчивости и сходимости.

**Ключевые слова:** задача диффузии-адвекции-реакции, сингулярная возмущённость, нелинейность, метод конечных элементов, одношаговая рекуррентная схема, линеаризация, апостериорный оцениватель погрешности, двусторонние оценки погрешности,  $h$ -адаптивная схема метода конечных элементов, критерии адаптивного метода бисекции, GMRES, предобуславливание.

## ABSTRACT

**Vovk O. V.** *Numerical modeling of the nonlinear evolution diffusion-advection-reaction problems.* – On the rights of manuscript.

The thesis for obtaining the Candidate of Physical and Mathematical Sciences degree on the speciality 01.01.07 – Computational mathematics. – Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, 2016.

The thesis is devoted to development and investigation of projection-mesh schemes to solve the problems with diffusion-advection-reaction equations, in particular singularly perturbed and/or semilinear ones.

The basis of the proposed numerical schemes is formed by both Galerkin procedure, which permits selection of finite element method (FEM) approximation space by using, in particular, a posteriori error estimations and  $h$ -adaptivity concept, and one step recurrent schemes for integration with respect to time. The discretized systems of equations, if necessary, are previously linearized by Newton method, and then solved by the generalized minimal residual (GMRES) method that is restarted and preconditioned. To compute guaranteed-accuracy FEM approximations the developed software is supplemented by linear, bilinear and serendipity quadratic basic functions and by proposed a posteriori error estimators and strategies to control the local refinement of nested triangulations that are generated by the bisection method. The quality, efficiency and robustness of the numerical schemes are proved and represented in details by the analysis of numerical results over a lot of the test and model problems, in particular nucleation and evolution of spiral waves in the reaction of carbon monoxide oxidation on platinum surface.

Among the results and methods that are gained in thesis, we draw attention to the following ones:

- (i) economical, element-wise and residual-type Dirichlet and Neumann a posteriori error estimators, that are able to calculate the lower and upper bounds of FEM approximations error, theoretical and numerical analyses of their efficiency and robustness properties;
- (ii) the efficient  $h$ -adaptive schemes that are supplemented by double sided error control for linear and semilinear problems that calculate the convergent sequences of piecewise linear FEM approximations on locally refined triangulations that are generated by the bisection method;
- (iii) economical one-step recurrent schemes for an integration of Cauchy problems for semidiscrete systems of equations, where the error orders of both the time discretization and the linearization are balanced.

**Key words:** diffusion-advection-reaction problem, singularly perturbation, nonlinearity, finite element method, one-step recurrent scheme, linearization, a posteriori error estimator, two-sided error estimation,  $h$ -adaptive finite element scheme, criterion of adaptivity, bisection method, GMRES, preconditioning.

Підписано до друку 26.05.2016 р.  
Формат 60×84/16. Папір друкарський.  
Друк на різнографі. Умовн. друк. арк. 0.9.  
Наклад 100 пр. Зам. № 101

Видавництво «ПАІС»  
Реєстраційне свідоцтво ДК № 3173 від 23 квітня 2008 р.  
вул. Гребінки 5, оф. 1, м. Львів, 79007  
тел. (032) 225-60-14, (032) 261-24-15  
e-mail: pais@mail.lviv.ua; <http://www.pais.com.ua>