Міністерство освіти і науки України

Львівський національний університет імені Івана Франка

**ДРЕБОТІЙ РОМАН ГРИГОРОВИЧ**

**УДК 519.632.4**

# ПОБУДОВА ТА АНАЛІЗ *HP*-АДАПТИВНИХ СХЕМ МЕТОДУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ-КОНВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ

01.01.07 – обчислювальна математика

**Автореферат**

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2019

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
**Кутнів Мирослав Володимирович**,
Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України,
провідний науковий співробітник відділу числових методів математичної фізики;

кандидат фізико-математичних наук, доцент
**Вербіцький Віктор Васильович**,
Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова,
доцент кафедри обчислювальної математики;

Захист відбудеться 18 жовтня 2019р. о 15:00 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 3 вересня 2019 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
доцент Ю. Д. Головатий

# ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми дослідження.** Метод скінченних елементів (МСЕ, англ.: FEM – finite element method) є одним із найпоширеніших на сьогодні методів дискретизації крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь і для рівнянь у частинних похідних. Важливий внесок у розвиток методу таких вчених, як I. Babuška, O. Zienkiewicz, M. Ainsworth, J. Oden, Г. Шинкаренко, Я. Савула засвідчує, що його ключовою особливістю є можливість роботи з областю (в якій розв’язується задача) складної геометричної структури, а крім того, МСЕ, а саме його *адаптивні схеми*, які вперше розглянув у своїх роботах I. Babuška, можна успішно застосовувати до *сингулярно збурених* задач, тобто до задач із локально швидкозмінними розв’язками. Ці схеми застосовують з метою оптимізації використовування наявних обчислювальних ресурсів. Мета адаптивного МСЕ – побудова наближеного розв’язку із *заданою точністю* при *мінімальних обчислювальних затратах*. Її досягають за допомогою ітераційної перебудови (адаптування) використовуваного простору поліноміальних апроксимацій відповідно до структури невідомого розв’язку вихідної крайової задачі. Основа більшості схем адаптування – апостеріорні (на основі вже знайденого наближення) оцінки похибок на скінченних елементах. Процес знаходження розв’язку, оцінки похибок та перебудови сітки виконується циклічно, доки не буде досягнуто заданого рівня похибки та її рівномірного розподілу між скінченними елементами.

Можна виокремити такі основні підходи до адаптування простору апроксимацій:

- ***h**-адаптування*: степінь апроксимуючих поліномів на всіх елементах однаковий і незмінний в процесі роботи алгоритму. Змінюється лише поточна сітка елементів за допомогою додавання нових вузлів (поділ елементів). Це класичний підхід, який започаткував I. Babuška і в подальшому розвинули M. Ainsworth, J. Oden, Г. Шинкаренко за допомогою систематичного дослідження оцінок похибок та їх властивостей;
- ***r**-адаптування*: степені поліномів не змінюються. Перебудови сітки зі скінченних елементів досягаємо зміною положення вузлів. Варто зауважити, що топологічна структура сітки в процесі роботи алгоритму не змінюється. Загалом використання лише такої стратегії не є ефективним, оскільки при переміщенні вузлів поряд із покращенням локальної якості наближення у зонах згущення в іншій частині області якість апроксимації погіршується. Отож, додавання нових вузлів є неминучим, і ми одразу ж приходимо до *h*-адаптивних схем. Частково *r*-адаптивність можна використовувати у нестаціонарних задачах, де є можливість переміщати цілу множину вузлів згідно з напрямком протікання певного фізичного процесу (Flaherty J.E.);
- ***p**-адаптування*: сітка елементів незмінна, змінюються лише степені апроксимуючих поліномів на вибраних скінченних елементах. Схеми такого вигляду вивчалися в роботах E. Süli, P. Houston, Ch. Schwab.

Загалом вони є добрими до апроксимації гладких розв'язків, проте неможливість виділення певних локальних особливостей роз'вязку робить такі схеми в чистому вигляді неефективними;

- ***hp**-адаптування*: комбінування поділу елементів (***h***-) та зміни степенів поліномів (***p***-) на вибраних елементах, що має на меті усунути вищеописані недоліки чистих ***p***-адаптивних схем та максимально використати позитивні сторони обох вищеописаних стратегій адаптування: ефективну апроксимацію розв'язків і в зоні локальної високої гладкості, і в зоні примежевих чи внутрішніх шарів із великим градієнтом. Фундаментальні роботи в цьому напрямку належать E. Süli, P. Houston, Ch. Schwab, J. Melenk. Важливі практичні результати слід відзначити у L. Demkowicz та P. Sŏlín.

Схеми *hp*-адаптування дуже привабливі з точки зору ефективності, оскільки Ch. Schwab показав, що використання *hp*-апроксимацій потенційно дає змогу отримати послідовність наближень до розв'язку задачі, похибки яких спадають *експоненційно* стосовно кількості невідомих, тобто існують сталі $C, \alpha > 0, \beta \in (0,1)$ такі, що вибрана норма похибки наближення на сітці, яка породжує $N$ невідомих змінних, задовольняє наступну оцінку:

$$\left\| u - u_{hp} \right\| \le C e^{-\alpha N^{\beta}}.$$

Варто зауважити, що оцінки похибок такого типу свідчать про швидкість збіжності більшу ніж алгебраїчна із будь-яким порядком.

Загалом можна стверджувати, що на сьогодні немає цілісної та завершеної теорії *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ. Також немає готових індустріальних продуктів (комерційних), що побудовані на їх основі. Оскільки розробка таких рішень є дуже перспективною задачею, то посилився інтерес до алгоритмів на основі так званого «контрольного розв'язку» (reference solution). Дослідження у цьому напрямку належать L. Demkowicz та P. Sŏlín. Такі алгоритми дуже загальні і дають можливість розв'язувати практично будь-які задачі. Саме з огляду на це було створено деякі opensource-проекти (наприклад, див. *http://hpfem.org/* ), що пропонують імплементацію алгоритмів згаданого типу. Загальність алгоритмів на основі reference solution породжує суттєвий недолік – важкість їх теоретичного дослідження та обґрунтування коректності. На цей час не здійснено доведень збіжності апроксимацій для таких алгоритмів. Варто також зауважити, що збіжність апроксимацій у алгоритмах на основі reference solution на практиці не завжди є монотонною. Якщо ж оглянути теоретичні дослідження алгоритмів *hp*-адаптування, то загалом вони проведені для доволі простих задач, і алгоритми, що є теоретично обґрунтованими, мають дуже вузьке застосування. Це приводить до того, що, з одного боку існує програмне забезпечення, яке вже можуть використовувати інженери, а з іншого – його застосування не гарантує ефективності. Можна вважати, що останній факт гальмує розробку комерційних продуктів на основі *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ.

Цю дисертацію присвячено дослідженню та розробці ефективних *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ для задач дифузії-конвекції-реакції.

**Зв'язок роботи з науковими програми, темами, планами.** Робота виконана в рамках держбюджетної науково-дослідної роботи кафедри інформаційних систем Львівського національного університету імені Івана Франка:
Пі-17П «Побудова, аналіз і програмна реалізація чисельних методів для прямих та обернених задач фізики та механіки» (2015-2016 рр., № ДР 0115U003259); науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Хапко Р.С.

**Мета і задачі дослідження.** Метою цієї роботи є розробка та дослідження *hp*-адаптивних алгоритмів методу скінченних елементів для задач дифузії-конвекції-реакції, зокрема:

1) дослідження умов коректності варіаційної задачі дифузії-конвекції-реакції;
2) побудова апостеріорних оцінювачів похибок (АОП) для поліноміальних апроксимацій МСЕ різних порядків;
3) розробка та обґрунтування критеріїв та стратегій *hp*-адаптування;
4) аналіз розроблених *hp*-адаптивних схем МСЕ;
5) побудова алгоритмів та програм ефективного обчислення значень базисних функцій Лобатто та вузлів квадратурних формул Гаусса довільного порядку;
6) побудова та програмна реалізація ефективних алгоритмів формування та розв'язування систем рівнянь МСЕ з використанням конденсації внутрішніх параметрів для поліноміальних апроксимацій різних порядків;
7) програмна реалізація *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ та аналіз результатів обчислювальних експериментів для сингулярно збурених задач.

**Об'єктом дослідження** є одновимірні сингулярно збурені задачі дифузії-конвекції-реакції.

**Предметом дослідження** є адаптивні схеми методу скінченних елементів для еліптичних задач.

**Методами досліджень** є методи теорії гільбертових просторів та обчислювальної математики, зокрема, метод скінченних елементів.

**Наукова новизна одержаних результатів** полягає у:

1) побудові явного АОП апроксимацій МСЕ з поліноміальними базисними функціями різних степенів для задач дифузії-конвекції-реакції;
2) побудові АОП з використанням фундаментальних розв'язків локальних крайових задач дифузії-конвекції-реакції зі сталими коефіцієнтами;
3) доведенні можливості поелементної декомпозиції АОП на основі контрольного розв'язку;
4) побудові алгоритму *hp*-адаптування, що ґрунтується на порівнянні норм поелементних апроксимацій похибок, які знайдені на різних сітках, та дослідженню його збіжності для симетричних задач;

5) проведенні обчислювальних експериментів з сингулярно збуреними крайовими задачами стосовно порівняння розробленого алгоритму *hp*-адаптування з алгоритмом на основі контрольного розв'язку та *h*-адаптивними схемами.

**Практичне значення одержаних результатів.** Розроблена стратегія адаптування та обґрунтовані властивості оцінювача на основі контрольного розв'язку можуть бути використанні при розробці і вдосконаленні *h*- та *hp*-адаптивних схем МСЕ.

Всі розглядувані алгоритми автор реалізував у вигляді програм, які можна використовувати і як базу для імплементації інших алгоритмів МСЕ, і самостійно, для проведення обчислювальних експериментів.

**Особистий внесок автора.** Основні результати, що винесено на захист, автор одержав самостійно. У роботах опублікованих у співавторстві [1 – 5] проф. Г. А. Шинкаренку належить постановка задач, загальні підходи до побудови числових схем, передбачення одержаних результатів та їхній аналіз, загальний огляд праць. У роботі [1] здобувачу належить побудова оцінювачів похибок та алгоритму адаптування, розробка програм, проведення обчислювальних експериментів з порівнянням різних оцінювачів та критеріїв адаптування та їх аналіз. Проф. Г. А. Шинкаренку належить постановка задачі дифузії-конвекції-реакції та формулювання її дискретного аналогу за схемою Петрова-Гальоркіна, а також ідея проведення порівняльного аналізу розроблених оцінювачів. У праці [4] автору дисертації належить доведення теорем про можливість поелементної декомпозиції оцінювача на основі контрольного розв'язку, отримання формул для рекурентного обчислення значень базисних функцій для побудови оператора проекції. Проф. Г. А. Шинкаренку належить вступ і постановка задачі дифузії-конвекції-реакції. У статті [3] автору дисертації належить алгоритм адаптування та його обґрунтування, розробка програм та проведення обчислювальних експериментів із несиметричними сингулярно збуреними задачами, доведення теореми про можливість подання несиметричної варіаційної задачі у вигляді послідовності симетричних задач. Проф. Г. А. Шинкаренку належить вступ і постановка крайової задачі та її дискретизація, метод алгебраїчного зведення несиметричної задачі до симетричної. У роботі [2] здобувачеві належить доведення коректності задачі дифузії-конвекції-реакції, побудова алгоритму адаптування, доведення твердження про залежність між похибками апроксимацій на послідовних ітераціях розробленого алгоритму, проведення та аналіз обчислювальних експериментів. Проф. Г. А. Шинкаренку належить формулювання крайової задачі, порівняння її дискретизацій Рітца та Петрова-Гальоркіна, отримання умов, що забезпечують коректність варіаційної задачі, та схема доведення коректності. У праці [5] здобувачеві належить доведення коректності варіаційної задачі, доведення твердження та допоміжних лем про явний оцінювач похибки для апроксимацій високих порядків та його надійність, побудова алгоритму адаптування та теоретичне обґрунтування критерію зміни скінченного елемента, проведення обчислювальних експериментів. Проф. Г. А. Шинкаренку належить вступ, постановка задачі дифузії-конвекції-реакції, схема доведення коректності та формулювання умов для коефіцієнтів задачі, аналіз числових результатів.

**Апробація результатів дисертації.** Результати дисертації апробовані у виступах та обговореннях на міжнародних наукових конференціях: «Наукова студентська конференція з прикладної математики та інформатики» (Львів, 2011, 2016), «Обчислювальна та прикладна математика» (Київ, 2012–2014), «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2014); «Ukrainian Conference on Applied Mathematics» (Львів, 2017); вітчизняних наукових конференціях: «Підстригачівські читання» (Львів, 2014, 2017), «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2015, 2016, 2018); семінарах кафедри інформаційних систем Львівського національного університету імені Івана Франка 2013–2019 рр. і на міжкафедральному семінарі факультету прикладної математики та інформатики Львівського національного університету імені Івана Франка, 2019 р.

**Публікації.** Основні результати дисертації опубліковано у 5-ох наукових працях: [1-4] у наукових фахових виданнях з переліку, затвердженого МОН України, та [5] у закордонному виданні. Стаття [3] входить до наукометричної бази даних Web of Science, [5] складає розділ монографії. У матеріалах наукових конференцій опубліковано 12 тез та матеріалів доповідей.

**Структура і обсяг дисертації.** Текст дисертації містить вступ, чотири розділи, висновки, список використаних джерел, який налічує 56 найменувань на 6 сторінках та два додатки. Дисертація містить 24 рисунки та 14 таблиць. Загальний обсяг дисертації становить 147 сторінок.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступній частині** проаналізовано актуальність теми дослідження, наведено перелік держбюджетних науково-дослідних робіт, в межах яких виконано цю роботу, сформульовано мету та подано перелік основних поставлених завдань, висвітлено наукову новизну та практичне значення результатів роботи.

У **першому розділі** детально розглянуто модель дифузії-конвекції-реакції (ДКР). Висвітлено основні фізичні співвідношення, що описують процеси дифузії, конвекції та реакції у суцільному середовищі. На їх основі продемонстровано отримання відповідних диференціальних рівнянь та отримано крайову задачу КДР. Всесторонньо проаналізовано арсенал наявних числових та аналітичних методів розв’язування одержаної крайової задачі.

Розглянуто таку задачу:

$$\begin{cases} \text{Задано коефіцієнт дифузії } \bar{\mu} = \bar{\mu}(x), \\ \text{«вектор» конвективного перенесення } \bar{\beta} = \bar{\beta}(x), \\ \text{коефіцієнт біохімічного розпаду } \bar{\sigma} = \bar{\sigma}(x), \\ \text{інтенсивність джерел домішки } \bar{f} = \bar{f}(x) \text{ та} \\ \text{сталі } \bar{\alpha}, \bar{\gamma}, \bar{g}_0, \bar{g}_L \in \mathbb{R}; \\ \text{Знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ -\left(\bar{\mu}u'\right)' + \bar{\beta}u' + \bar{\sigma}u = \bar{f} \quad \text{на } G = (0, L), \\ \bar{\mu}u'\big|_{x=0} = \bar{\alpha}[u(0) - \bar{g}_0], \quad -\bar{\mu}u'\big|_{x=L} = \bar{\gamma}[u(L) - \bar{g}_L]. \end{cases} \tag{1}$$

Задача (1) допускає наступне варіаційне формулювання:

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u \in V := H^1(G) \text{ таку, що} \\ \bar{c}_G(u,v) = \left\langle \bar{l}_G, v \right\rangle \quad \forall v \in V, \end{cases} \tag{2}$$

де

$$\bar{c}_G(u,v) := (\bar{\mu}u', v')_G + (\bar{\beta}u', v)_G + (\bar{\sigma}u, v)_G + \bar{\alpha}uv|_{x=0} + \bar{\gamma}uv|_{x=L} \quad \forall u,v \in V, \tag{3}$$

$$\left\langle \bar{l}_G, v \right\rangle := (\bar{f}, v)_G + \bar{\alpha}\bar{g}_0 v(0) + \bar{\gamma}\bar{g}_L v(L) \qquad \forall v \in V. \tag{4}$$

Тут $(u,v)_G = \int_G uv\,\mathrm{dx}$ – скалярний добуток в просторі $L^2(G)$. У випадку, коли форма $\bar{c}_G$ $V$-еліптична і обмежена, можемо ввести енергетичну норму $\|u\|_{E,G} = \sqrt{\bar{c}_G(u,u)}$.

У [2] визначено набір обмежень для даних задачі (1), при виконанні яких можна гарантувати коректність побудованої варіаційної задачі (2):

**Теорема 1.** (Про коректність варіаційної задачі)

*Розглянемо додаткову змінну $t \in \Omega = [0,1]$, що визначена згідно з правилом: $x = Lt$. Визначимо безрозмірні коефіцієнти задачі*

$$\begin{cases} \mu := \bar{\mu} \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}^{-1}, \ \beta := \bar{\beta} \| \bar{\beta} \|_{\infty,G}^{-1}, \ \sigma := \bar{\sigma} \| \bar{\sigma} \|_{\infty,G}^{-1}, \ f := L^2 \|\bar{\mu}\|_{\infty,G}^{-1} f, \\ \alpha := \bar{\alpha} L \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}^{-1}, \ \gamma := \bar{\gamma} L \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}^{-1}, \ g_0 := L \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}^{-1} \bar{g}_0, \ g_1 := L \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}^{-1} \bar{g}_L. \end{cases} \tag{5}$$

*Позначимо* $\mathrm{Pe} := \| \bar{\beta} \|_{\infty,G} L / \| \bar{\mu} \|_{\infty,G}$, $\mathrm{St} := \| \bar{\sigma} \|_{\infty,G} L / \| \bar{\beta} \|_{\infty,G}$ *– критерії подібності Пекле та Струхаля відповідно (тут $\| \bullet \|_{\infty,G}$ є нормою в просторі Лебега $L^\infty(G)$: $\| v \|_{\infty,G} = \operatorname*{ess\,sup}_{x \in G} |v(x)|$). Якщо виконуються умови:*

$$\begin{cases} \mu \in L^\infty(\Omega), \\ \mu(t) \ge \mu_0 = \mathrm{const} > 0 \quad \textit{майже скрізь у } \Omega, \\ \beta, \sigma \in L^\infty(\Omega) \\ \sigma(t) - \tfrac{1}{2}\mathrm{Pe}\,\beta'(t) \ge c_0 = \mathrm{const} > 0 \quad \textit{майже скрізь у } \Omega, \\ \alpha - \tfrac{1}{2}\mathrm{Pe}\,\beta(0) > 0, \ \gamma + \tfrac{1}{2}\mathrm{Pe}\,\beta(1) > 0, \\ f \in L^2(\Omega), \end{cases} \tag{6}$$

*тоді задача* (2) *коректно поставлена.*

З урахуванням виразів для критеріїв подібності виокремлено цікавий нам клас так званих *сингулярно збурених* задач, у яких конвективна та реактивна складові значно переважають над дифузійною складовою процесу перенесення домішки. Варто зазначити, що застосування МСЕ з рівномірними сітками до сингулярно збурених задач не є ефективним внаслідок наявності у розв'язках таких задач внутрішніх чи примежевих шарів із великим значенням похідної, що приводить до дуже нерівномірного розподілу похибки на скінченних елементах і, як наслідок, до надлишкового згущення рівномірних сіток у тих зонах області визначення розв'язку, де похибка насправді не є великою.

Для варіаційної задачі (2) побудовано дискретизовану задачу з використанням методу Гальоркіна та МСЕ. Наведено низку основних властивостей цих методів і теореми про апроксимативність просторів кусково-поліноміальних функцій довільних степенів.

Побудовано глобальну варіаційну задачу про похибку. Якщо маємо деяку апроксимацію МСЕ $u_h$, можемо записати задачу для похибки в такий спосіб:

$$\begin{cases} \text{знайти функцію похибки } e \in V \text{ таку, що} \\ \overline{c}_G(e,v) = \langle \rho_G(u_h), v \rangle \quad \forall v \in V, \end{cases} \tag{7}$$

де $e = u - u_h$ , а функціонал джерел похибки визначається так:

$$\langle \rho_G(u_h), v \rangle := \langle \overline{l}_G, v \rangle - \overline{c}_G(u_h, v). \tag{8}$$

Визначено поняття апостеріорного оцінювача, та показано, що норму функціонала (8) можна використовувати як АОП.

На завершення першого розділу подано класифікацію алгоритмів адаптування. Виділено 4 типи схем: *h*-, *r*-, *p*-, *hp*-адаптивні. Детально проведено огляд та порівняння відомих *hp*-адаптивних алгоритмів.

**Другий розділ** присвячено побудові АОП для алгоритмів адаптування, що будуть запропоновані у розділі 3. На початку розділу 2 розглянуто різні типи АОП: явні, неявні, ієрархічні, на основі усереднення градієнту. Проаналізовано низку властивостей, які повинен мати АОП для того, щоб можна було використовувати його на практиці.

Побудовано спеціальний оцінювач на основі лишку диференціального рівняння. Він є узагальненням оцінювача, який розглянув Dorfler, на випадок задач дифузії-конвекції-реакції. Цей оцінювач враховує безпосередньо те, що апроксимації на елементах є поліноміальними функціями довільних порядків. Індикатор похибки на скінченному елементі має вигляд:

$$\tilde{\eta}_K = \frac{2}{\alpha\sqrt{p_K(p_K+1)}} \left\| \sqrt{\omega_K}\, R[u_h] \right\|_{L^2(K)}, \tag{9}$$

де $\alpha$ – константа *V*-еліптичності білінійної форми задачі, $u_h$ – наближення МСЕ, $p_K$ – степінь полінома $u_h$ на елементі $K = [x_{k-1}, x_k]$, $\omega_K(x) := (x_k - x)(x - x_{k-1})$, $R[u_h] := f + (\mu\, u_h')' - \beta\, u_h' - \sigma\, u_h$. – лишок диференціального рівняння. Показано, що, внаслідок безпосереднього включення інформації про степінь апроксимації, оцінювач (9) є більш точним порівняно з явними АОП, що сконструйовано із застосуванням стандартних інтерполяційних оцінок (див. роботи Ainsworth), що використовуються в *h*-адаптивних схемах.

На основі задачі (7) побудовано відповідну локальну задачу для похибки на кожному скінченному елементі та подано дещо більш точне обґрунтування при отриманні цієї задачі порівняно із тим, яке вміщено у роботах Ainsworth.

Виходячи з варіаційного рівняння для похибки (7), локалізованого на окремому скінченному елементі, побудовано спеціальний одновимірний індикатор похибки на основі фундаментальних розв'язків [1] певних допоміжних рівнянь зі сталими коефіцієнтами. Розглянемо детальніше побудову цього індикатора на скінченному елементі $K=[x_{k-1},x_k]$. Розглянемо однорідне диференціальне рівняння, що відповідає задачі про похибку, побудовану для (1) окремо на кожному з проміжків $T_1=[x_{k-1},(x_{k-1}+x_k)/2], T_2=[(x_{k-1}+x_k)/2,\, x_k]$. Усереднивши коефіцієнти рівнянь на кожному з проміжків ($\tilde{\mu}_i=\frac{1}{|T_i|}\int_{T_i}\overline{\mu}\,\mathrm{dx}$, $\tilde{\beta}_i=\frac{1}{|T_i|}\int_{T_i}\overline{\beta}\,\mathrm{dx}$, $\tilde{\sigma}_i=\frac{1}{|T_i|}\int_{T_i}\overline{\sigma}\,\mathrm{dx}$), отримаємо пару лінійних рівнянь зі сталими коефіцієнтами: $-(\tilde{\mu}_i e_i')'+\tilde{\beta}_i e_i'+\tilde{\sigma}_i e_i=0$. Для знаходження $e_i,\ i=1,2$ знайдемо пари фундаментальних розв'язків $\{\varphi_{11}(t),\varphi_{12}(t)\},\{\varphi_{21}(t),\varphi_{22}(t)\}$ для одержаних рівнянь на проміжках $T_1$ та $T_2$. Тепер $e_i=c_{i1}\varphi_{i1}+c_{i2}\varphi_{i2}$, де константи $c_{i1}$ та $c_{i2}$ підібрано так, щоб $e_i((x_{k-1}+x_k)/2)=1,\ i=1,2,\ e_1(x_{k-1})=e_2(x_k)=0$. Визначимо базисну бабл-функцію оцінювача в наступний спосіб:

$$\psi^K(x)=\begin{cases} e_1(x), & x\in T_1,\\ e_2(x), & x\in T_2.\end{cases} \tag{10}$$

Тепер можна обчислити класичний неявний оцінювач, як апроксимацію МСЕ для рівняння похибки (7) з використанням на кожному скінченному елементі одновимірного простору апроксимацій для похибки із отриманою базисною функцію (10).

На основі робіт L. Demkowicz та P. Sŏlín побудовано та досліджено АОП на основі контрольного розв'язку (reference solution), що є однією з універсальних стратегій оцінки похибки у методі скінченних елементів. В його основі лежить спосіб обчислення похибки як норми різниці між поточною апроксимацією та іншою апроксимацією, яку побудовано на рівномірно згущеній сітці, відносно поточної – контрольним розв'язком. Для уможливлення локального обчислення похибки поточну апроксимацію замінюють на специфічну проекцію контрольного розв'язку на поточну сітку. Індикатор глобальної похибки має вигляд:

$$\eta=\left|u_{h/2,p+1}-\prod\nolimits_{h,p}^{G}u_{h/2,p+1}\right|_{H^1(G)}, \tag{11}$$

де $\prod_{h,p}^{G}$ – оператор ортогонального проектуваня на простір апроксимацій, який побудовано на поточній сітці (відносно напівнорми $|u|^2_{H^1(G)}=\int_G (u')^2\,\mathrm{dx}$), $u_{h/2,p+1}$ – контрольний розв'язок. Звернімо увагу, що аналогічно визначений індикатор $\eta_K$ можна розглянути на конкретному скінченному елементі $K$. Доведено, що:

**Теорема 2.** (Про декомпозицію оцінювача на основі контрольного розв'язку) *Нехай задано сітку скінченних елементів* $\Im_h = \{ (x_{i-1}, x_i) \}_{i=1}^{N}$, $0 = x_0 < x_1 < ... < x_N = L$. *Для довільної функції* $w \in H^1(G)$ *виконується рівність:*

$$\left| w - \prod_{h,p}^{G} w \right|_{H^1(G)}^2 = \sum_{K \in \Im_h} \left| w - \prod_{h,p}^{K} w \right|_{H^1(K)}^2, \tag{12}$$

*і, відповідно,*

$$\eta^2 = \sum_{K \in \Im_h} \eta_K^2 \tag{13}$$

На основі останньої теореми показано можливість ефективного обчислення апроксимацій МСЕ у алгоритмі на основі контрольного розв'язку через локальні перебудови сітки з використанням індикаторів похибки вигляду (11).

У **третьому розділі** побудовано нові та досліджено існуючі *hp*-адаптивні схеми МСЕ. Детально досліджено алгоритм адаптування на основі контрольного розв'язку та аспекти його оптимальної програмної реалізації. Розроблено алгоритм адаптування на основі порівняння норм наближень до похибки.

Базовий алгоритм адаптування у двох схемах є таким:

**Алгоритм 1:**

**Крок 1.** Розв'язується глобальна СЛАР МСЕ;

**Крок 2.** Перевіряється умова завершення вигляду $\eta < TOL$ – якщо вона істинна, то **вихід**;

**Крок 3.** На основі розподілу поелементних індикаторів $\eta_K$ як і у *h*-адаптивних схемах визначають ті скінченні елементи, які підлягають зміні;

**Крок 4.** Для кожного елемента, який вибрано на кроці 3, на основі певного критерію вибирають спосіб його перебудови із множини заданих;

**Крок 5.** Перебудовується сітка;

**Крок 6.** Перехід на крок 1.

Щоб відібрати елементи для зміни на кроці 3 алгоритму, використано такі два критерії:

1) («максимум») елемент $K$ вибирається для зміни, якщо

$$\eta_K > (1-\theta)\eta_{\max} \ , \tag{14}$$

де $\eta_{\max} = \max_K \eta_K$ і $\theta \in (0,1)$ є фіксованим значенням;

2) («середнє») елемент $K$ вибирається для зміни, якщо

$$\frac{\sqrt{N}\,\eta_K}{\sqrt{\|u_h\|_{E,\Omega}^2 + \sum_{K'} \eta_{K'}^2}} \cdot 100\% > \varepsilon \tag{15}$$

де $\varepsilon$ є допустимою середньою відносною похибкою у % на скінченному елементі, $N$ є кількістю елементів на поточній сітці.

Зважаючи на на загальну схему, реалізовано та досліджено алгоритм на основі контрольного розв'язку. Тут варто відзначити дві важливі фази кожної ітерації. Перша – *отримання контрольного розв'язку*. У одновимірному випадку при наявності поточної апроксимації контрольним розв’язком виступатиме апроксимація МСЕ, обчислена на сітці, утвореній за допомогою рівномірного поділу навпіл всіх елементів поточної сітки та збільшенням порядків новоутворених елементів на 1 порівняно з порядками батьківських елементів (див. рис.1).

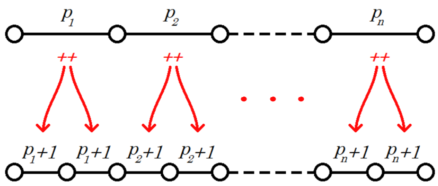


Рис. 1.

У цьому випадку враховуючи те, що у побудованій схемі для знаходження апроксимації потрібно розв’язувати тридіагональну систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР), можна безпосередньо обчислити контрольний розв’язок. При реалізації аналогічного алгоритму для двовимірних задач, складність обчислень істотно зростає. Внаслідок складнішої структури матриці, істотно більшій розмірності системи та наявності пари апроксимацій на кожній ітерації алгоритму, для обчислення контрольного розв’язку доцільно застосовувати двосіткові алгоритми. Друга фаза алгоритму полягає у *виборі оптимальної сітки* для наступної ітерації. Тут ідея полягає у виборі такої сітки, яка дасть змогу максимально зменшити похибку при мінімальному прирості кількості невідомих параметрів. Більш формально, позначивши $u = u_{h/2,p+1}$ (контрольний розв’язок), питання вибору нової сітки $hp_{opt}$ зводиться до наступної задачі: *знайти сітку* $hp_{opt}$ *, таку, що:*

$$\frac{\left|u-\Pi_{hp}^{G}u\right|_{H^1(G)}^2-\left|u-\Pi_{hp_{opt}}^{G}u\right|_{H^1(G)}^2}{N_{hp_{opt}}-N_{hp}}\to\max. \qquad (16)$$

Тут $\Pi_{\bullet}^{G}$ – *оператор ортогонального проектування (інтерполювання)* на простір апроксимацій, заданий відповідною сіткою, $N_{\bullet}$ – кількість невідомих змінних на відповідній сіті. Зауважимо, що для побудови нової сітки на кожній ітерації використовується специфічний набір способів перебудови кожного скінченного елемента, що складається із набору поділів елемента навпіл із різними розподілами порядків дочірніх елементів, або підвищення порядку елемента на 1.

Розроблено схему $hp$-адаптування, яка вписується у схему адаптування, задану *алгоритмом 1*, у якій на кроці 3 використовується індикатор похибки (9) (або визначений функцією (10) неявний індикатор) та на кроці 4 використано локальну варіаційну задачу про похибку для вибору оптимального способу зміни кожного елемента. У цьому алгоритмі для кожного вибраного елемента $K=[x_{k-1},x_k]$ ( $p_K := \deg(u_h^K)$ – степінь апроксимуючого полінома на елементі $K$ ) розглядається два способи перебудови: поділ навпіл без зміни порядків новоутворених елементів та збільшенням степеня полінома на одиницю.

Розглянемо детальніше крок 4 розробленого алгоритму. Нехай $X^p(a,b)$ - простір поліномів степеня $p$ на відрізку$[a,b]$. Для вищезгаданих способів перебудови визначимо відповідні простори бабл-функцій $V^m_{hp}(K), m=1,2$ у такий спосіб:

$$V^1_{hp}(K)=\{v\in C(K)\,|\,v\in X^{p_K}(x_{k-1},[x_{k-1}+x_k]/2), v\in X^{p_K}([x_{k-1}+x_k]/2, x_k), v|_{\partial K}=0\}$$

$$V^2_{hp}(K)=\{v\in X^{p_K+1}(K)\,|\,v|_{\partial K}=0\}$$

Далі, для $m=1,2$ розв'язуються такі задачі (тут $R[u_h]:=\bar f+(\bar\mu\, u'_h)' -\bar\beta\, u'_h -\bar\sigma\, u_h$):

$$\begin{cases}\text{знайти } e^m_h\in V^m_{hp}(K) \text{ такий, що}\\ \bar c_K(e^m_h, v_h)=\int\limits_K R[u^K_h]v_h\,\mathrm{dx}, \quad \forall v_h\in V^m_{hp}(K).\end{cases} \tag{17}$$

Обчислимо тепер $r_m=\left\|e^m_h\right\|_{E,\Omega}$, $m=1,2$. Розглянемо величину $\Delta=r_2-r_1$ .

Якщо $\Delta>\delta$, де $\delta$ – задане число, то на елементі збільшуємо порядок апроксимаційного полінома на одиницю, інакше виконуємо поділ елемента на два з порядками $(p_K, p_K)$.

У роботі наведено теоретичне обґрунтування побудованої стратегії.

Комбінуючи розроблений алгоритм із різними оцінювачами, що використовуються на кроці 3, та різними критеріями адаптування, проведено порівняльний аналіз числових результатів. Також проведено порівняння розробленого алгоритму із анонсованим алгоритмом на основі контрольного розв'язку. Побудований алгоритм показав кращу ефективність на тестових задачах. Числові результати будуть наведені далі.

Також у третьому розділі детально вивчено низку допоміжних задач, як-от: ефективне розв'язування глобальної СЛАР, автоматизоване отримання квадратурних формул Гаусса довільного порядку, ефективне обчислення проекцій та вибір базису, обчислення порядків збіжності.

Варто зауважити, що теоретично обґрунтовано отриману стратегію адаптування лише для симетричних варіаційних задач.

У **четвертому розділі** описано програмну реалізацію побудованих алгоритмів та подано серію обчислювальних експериментів. Мета розділу – порівняти розроблений алгоритм із алгоритмом на основі контрольного розв'язку, а також порівняти різні варіанти розробленого алгоритму при різних оцінювачах похибки та різних критеріях перебудови сітки. Для прикладу розглянемо тестову сингулярно збурену задачу вигляду (1) з такими даними ($\mathrm{Pe}=0,\ \mathrm{St}:=+\infty$):

$$\bar\mu=1, \bar\beta=0, \bar\sigma=10^5e^x,\ \bar f=10^5, \bar\alpha=\bar\gamma=10^8, \bar g_0=\bar g_L=0, L=1. \tag{18}$$

Параметри розробленого алгоритму: $\delta=2, \theta=0.6$ (використано оцінювач (9) і критерій (14)).

Наближення до розв'язку знайдено з точністю 5%. Максимальний порядок поліномів – 9. Початкова сітка містить 2 елементи. Отримані апроксимації показано на рисунку 2. Процес послідовного уточнення апроксимацій деталізовано у таблиці 1.

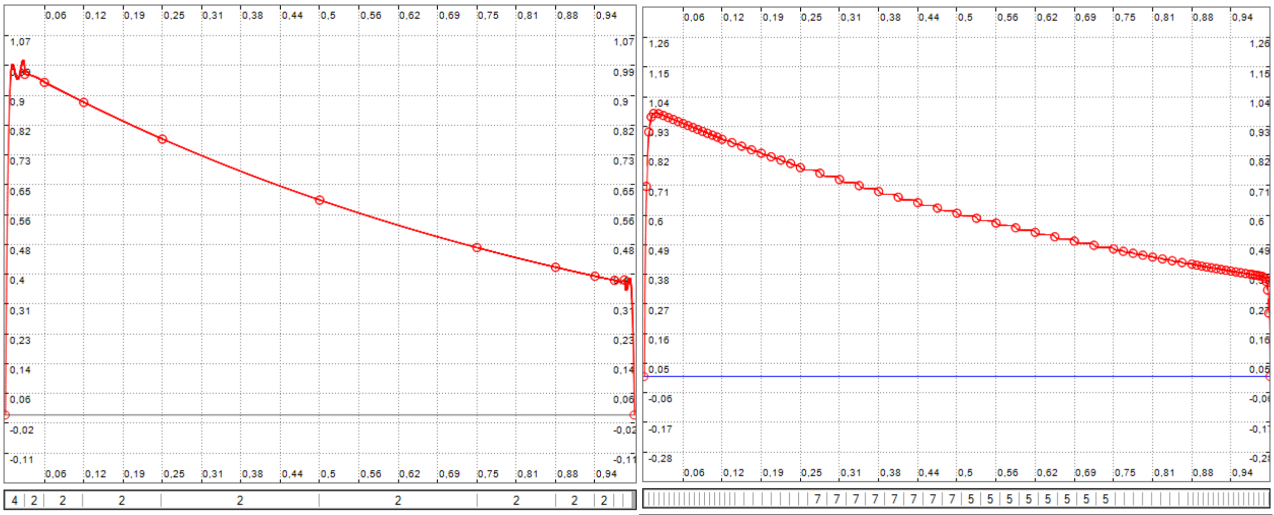

Рис. 2. Остаточне наближення МСЕ, знайдене за допомогою алгоритмів на основі порівняння норм наближень до похибки (зліва) та алгоритму на основі reference solution (справа) (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 1

Збіжність апроксимацій МСЕ (зліва – алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки, справа – алгоритм на основі reference solution): $n$ – номер ітерації, $N_{dof}$ – кількість невідомих, $\varepsilon_n^\Omega = \eta$ – індикатор абсолютної похибки, $r_n^\Omega = \dfrac{\eta}{\|u_h\|_{E,\Omega}} \times 100\%$ – відносна похибка.

| $n$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ | $n$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 3 | 12502,19 | 5898,52 | … … … | | | |
| 1 | 5 | 3961,25 | 1686,32 | 12 | 3 | 3,60 | 28,08 |
| 2 | 9 | 1450,78 | 596,85 | 13 | 3 | 3,14 | 23,81 |
| … … … | | | | … … … | | | |
| 5 | 21 | 63,15 | 25,24 | 30 | 3 | 0,77 | 5,52 |
| 6 | 24 | 23,60 | 9,42 | 31 | 3 | 0,70 | 5,04 |
| 7 | 26 | 9,44 | 3,77 | 32 | 4 | 0,58 | 4,19 |

Можна спостерігати у 4 рази меншу кількість ітерацій для побудованого алгоритму та у 16 разів меншу розмірність фінальної СЛАР ( $N_{dof}$ ).

Розглянемо тепер порівняльний аналіз для задачі (18) у разі використання оцінювачів на основі фундаментального розв’язку і явного оцінювача (9) та комбінуючи їх із критеріями «максимум» (14) та «середнє» (15). Початкова сітка містить 7 елементів у всіх подальших прикладах.

Рисунок 3 і таблиця 2 демонструють поведінку алгоритму для задачі (18) при використанні оцінювача на основі фундаментального розв’язку та явного оцінювача (9) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (14).

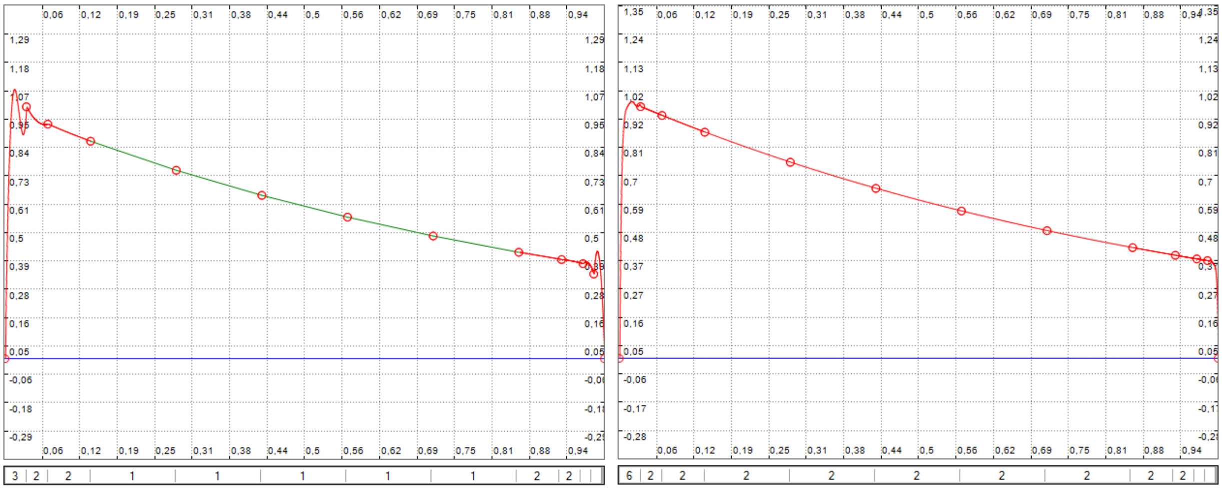

Рис. 3 Остаточні апроксимації МСЕ для задачі (18) при використанні оцінювача на основі фундаментального розв’язку (зліва) та явного оцінювача (9) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (14). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 2

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі (18) із критерієм адаптування «максимум» (14).

| Оцінювач на основі фундаментального розв’язку | | | | | | Явний оцінювач (9) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $n$ | $N$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ | $p_n$ | $n$ | $N$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ | $p_n$ |
| 0 | 7 | 8 | 20,5 | 8,58 | | 0 | 7 | 8 | 2124,36 | 886,20 | |
| 1 | 7 | 10 | 7,51 | 3,04 | 4,51 | 1 | 7 | 10 | 669,04 | 271,33 | 5,17 |
| 2 | 9 | 14 | 3,00 | 1,39 | 2,29 | 2 | 9 | 14 | 221,91 | 89,12 | 3,27 |
| 3 | 10 | 16 | 2,92 | 1,17 | 1,29 | 3 | 11 | 18 | 77,71 | 31,07 | 4,17 |
| 4 | 12 | 20 | 3,42 | 1,37 | -0,71 | 4 | 12 | 21 | 29,82 | 11,90 | 6,21 |
| 5 | 12 | 21 | 1,92 | 0,76 | 11,84 | 5 | 12 | 23 | 12,94 | 5,16 | 9,17 |
| | | | | | | 6 | 12 | 25 | 6,10 | 2,68 | 7,84 |
| | | | | | | 7 | 12 | 32 | 1,77 | 0,70 | 5,39 |
| усереднений порядок збіжності 2,37 | | | | | | усереднений порядок збіжності 5 | | | | | |

У таблиці 2 спостерігаємо, що оцінювач на основі фундаментального розв’язку може бути ефективнішим, але в такому разі він не дає монотонної збіжності, на відміну від явного АОП.

Рисунок 4 і таблиця 3 демонструють поведінку алгоритму для задачі (18) при використанні оцінювача на основі фундаментального розв’язку та явного оцінювача (9) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (15).

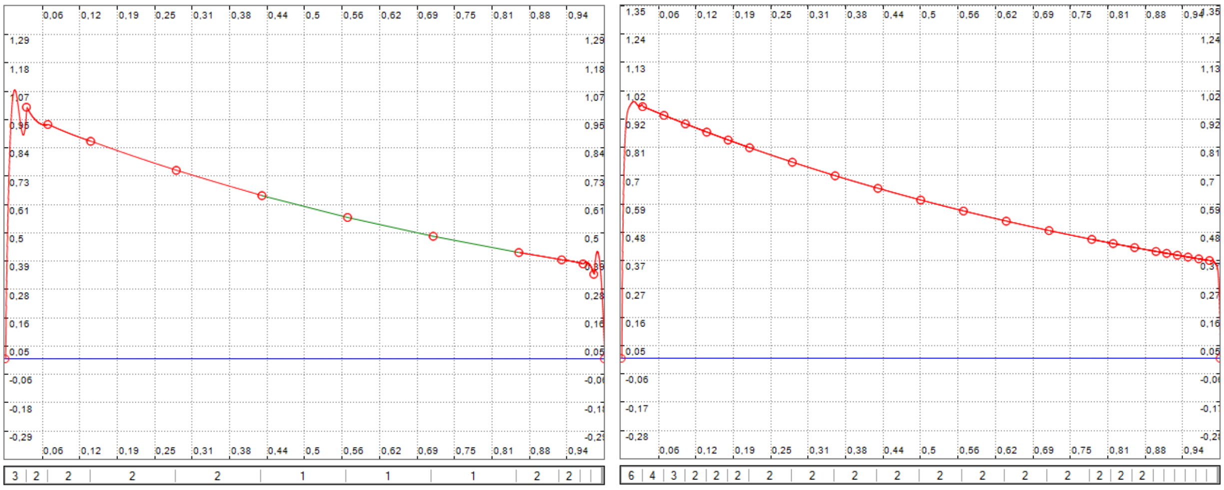

Рис. 4 Остаточні апроксимації МСЕ для задачі (18) при використанні оцінювача на основі фундаментального розв’язку (зліва) та явного оцінювача (9) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (15). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 3

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі (18) із критерієм адаптування «середнє» (15).

| Оцінювач на основі фундаментального розв’язку | | | | | | Явний оцінювач (9) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $n$ | $N$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ | $p_n$ | $n$ | $N$ | $N_{dof}$ | $\varepsilon_n^\Omega$ | $r_n^\Omega$ | $p_n$ |
| 0 | 7 | 8 | 21,4 | 8,94 | | 0 | 7 | 8 | 2124,30 | 886,20 | - |
| 1 | 7 | 12 | 4,08 | 1,65 | 4,08 | 1 | 7 | 15 | 627,39 | 254,32 | 1,94 |
| 2 | 9 | 16 | 5,44 | 2,18 | -0,99 | 2 | 14 | 29 | 220,92 | 88,72 | 1,58 |
| 3 | 11 | 20 | 3,96 | 1,58 | 1,42 | 3 | 20 | 41 | 77,51 | 30,99 | 3,02 |
| 4 | 12 | 23 | 0,84 | 0,33 | 11,04 | 4 | 23 | 50 | 29,30 | 11,69 | 4,90 |
| | | | | | | 5 | 23 | 54 | 12,02 | 4,79 | 11,57 |
| | | | | | | 6 | 23 | 56 | 4,82 | 1,92 | 25,11 |
| | | | | | | 7 | 23 | 58 | 1,77 | 0,70 | 28,48 |
| усереднений порядок збіжності 1,88 | | | | | | усереднений порядок збіжності 3,08 | | | | | |

Загалом, для цього прикладу робимо такі висновки:

(i) Порівнюючи з попереднім критерієм «максимум» (див. таблицю 2), ми бачимо, що явний індикатор був практично удвічі менш ефективним стосовно кількості ітерацій, елементів та степенів свободи;

(ii) Похибка є монотонною, залежно від кількості степенів свободи;

(iii) У таблиці 3 видно, що порядок збіжності монотонно зростає, а отже це може свідчити про присутність експоненційної збіжності у цьому прикладі.

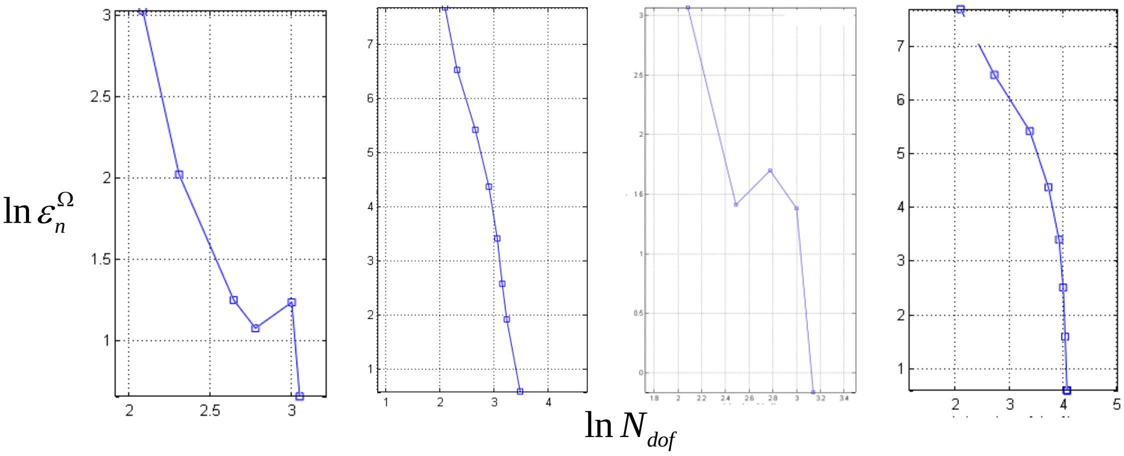


Рис. 5. Залежність між індикатором абсолютної похибки $\varepsilon_n^\Omega$ і кількістю степенів свободи $N_{dof}$ у логарифмічній шкалі для задачі (18): a) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «максимум»; b) для явного оцінювача та критерію адаптування «максимум»; c) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «середнє»; d) для явного оцінювача та критерію адаптування «середнє».

## ВИСНОВКИ

У цій роботі детально вивчено питання побудови *hp*-адаптивних схем МСЕ на основі методу Гальоркіна в контексті застосування до сингулярно збурених задач дифузії-конвекції-реакції. Основні складові та результати проведеної роботи такі:

1) одержано умови коректності розглядуваної варіаційної задачі дифузії-конвекції-реакції та здійснено її якісний аналіз в термінах критеріїв подібності Пекле та Струхаля;
2) побудовано явний та неявні апостеріорні оцінювачі похибок (АОП), які використано для оцінки похибки поліноміальних апроксимацій МСЕ довільних порядків;
3) доведено можливість поелементної декомпозиції оцінювача на основі reference solution;
4) розроблено алгоритм *hp*-адаптування, що ґрунтується на порівнянні норм різних наближень до похибки на кожному скінченному елементі;
5) досліджено та проаналізовано проблему симетризації варіаційної задачі дифузії-конвекції-реакції. Запропоновано два способи отримання симетричних задач та проаналізовано результуючі проблеми, що виникають при побудові дискретних рівнянь МСЕ на їхній основі;
6) здійснено ефективну імплементацію алгоритмів для використання базисних функцій Лобатто та знаходження вузлів квадратурних формул типу Гаусса довільного порядку;
7) розроблено комплекс програм для проведення обчислювальних експериментів;
8) проведено серію обчислювальних експериментів для сингулярно збурених задач та здійснено аналіз отриманих числових результатів.

Результати теоретичних досліджень підтверджено серією чисельних експериментів проведених за допомогою розроблених програмних засобів.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ НАУКОВИХ ПРАЦЬ


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

1. Drebotiy R. Comparison of error indicators and refinement criteria for *hp*-adaptation algorithm for finite element method / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Visnyk Odeskoho Natsionalnoho Universytetu. Matematyka i Mekhanika. – Odessa, 2014 .– V.19, Is.4(24). – P. 45–57.
2. Drebotiy R. Symmetrization of diffusion-advection-reaction problem and *hp*-adaptive finite element approximations / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Visnyk of the Lviv University. Series Appl. Math. and Informatics. – Lviv, 2015. – Issue 23. – P. 55–72.
3. Drebotiy R. On the application of the one *hp*-adaptive finite element strategy for nonsymmetric convection-diffusion-reaction problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Journal of Numerical and Applied Mathematics, ISSN: 0868-6912. – Kyiv, 2017. – Issue 3(126). – P. 48–61.
4. Drebotiy R. Elementwise decomposition of a posteriori error estimator based on reference solution for *hp*-adaptive finite element method / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Visnyk of the Lviv University. Series Appl. Math. and Informatics. – Lviv, 2018. – Issue 26. – P. 56–69.

### *Наукові статті у закордонних виданнях:*

5. Drebotiy R. *hp*-adaptive finite element method for 1D diffusion-convection-reaction boundary value problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Manufacturing Processes. Actual Problems-2014. Politechnika Opolska. – Opole. – 2014. – Vol. 1. – P. 11–26.

### *Матеріали конференцій:*

6. Дреботій Р. Апроксимації *h*-адаптивного МСЕ для одновимірних крайових задач / Р. Дреботій, Ю. Ладанівський // XIV Всеукраїнська (IX Міжнародна) наукова студентська конференція з прикладної математики та інформатики (Львівський національний університет імені Івана Франка, 5-6 травня 2011 р.): Матеріали конференції. – Львів : Видавничий центр ЛНУ, 2011. – С. 208–209.
7. Drebotiy R. A posteriori error estimators and *hp*-adaptive FEM for 1D diffusion-convection-reaction boundary value problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // V Int. Conf. named by I. I. Lyashko “Computational and applied mathematics” (Taras Shevchenko National University of Kyiv, September 10-11, 2012): Short papers. – Kyiv, 2012. – P. 17–17.
8. Drebotiy R. Residual *hp*-adaptive FEM for 1D diffusion-convection-reaction boundary value problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // VI Int. Conf. named by I. I. Lyashko “Computational and applied mathematics” (Taras Shevchenko National University of Kyiv, September 5-6, 2013): Short papers. – Kyiv, 2013. – P. 18–21.
9. Drebotiy R. *hp*-adaptive FEM for 1D boundary value problems / R. Drebotiy // Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики: Матер. доп. XX Всеукр. наук. конф. 7-9 квітня 2014 р., м. Львів. – Львів: Видавничий центр ЛНУ, 2014. – С. 13–14.

10. Drebotiy R. *hp*-adaptive finite element approximation for 1D boundary value problems [Електронний ресурс] / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання-2014», (Інститут прикладних проблем механіки і математики імені Я. С. Підстригача НАН України, 28-30 травня 2014). – Львів, 2014. – Режим доступу: http://www.iapmm.lviv.ua/chyt2014/theses/Drebotiy.pdf
11. Drebotiy R. Symmetrization of diffusion-advection-reaction boundary value problem and its *hp*-finite element approximations / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // VII Int. Conf. named by I. I. Lyashko "Computational and applied mathematics" (Taras Shevchenko National University of Kyiv, October 9-10, 2014): Short papers. – Kyiv, 2014. – P. 119–120.
12. Drebotiy R. A posteriori error estimators for *hp*-adaptive finite element method / R. Drebotiy // Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики: Матер. доп. XXI Всеукр. наук. конф. 24-25 вересня 2015 р., м. Львів. – Львів : Видавничий центр ЛНУ, 2015. – С. 27–30.
13. Drebotiy R. Symmetrization of diffusion-advection-reaction problem and *hp*-adaptive finite element approximations / R. Drebotiy // XIX Всеукраїнська (XIV Міжнародна) наукова студентська конференція з прикладної математики та інформатики (Львівський національний університет імені Івана Франка, 14-15 квітня 2016р.): Матеріали конференції. – Львів : Видавничий центр ЛНУ, 2016. – С. 46–47.
14. Drebotiy R. Gaussian quadrature implementation for *hp*-adaptive finite element method / R. Drebotiy // Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики: Матер. доп. XXII Всеукр. наук. конф. 5-7 жовтня 2016 р., м. Львів. – Львів : Видавничий центр ЛНУ, 2016. – С. 9–12.
15. Drebotiy R. A posteriori error estimator based on fundamental solution for 1D *hp*-adaptive FEM approximation [Електронний ресурс] / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання-2017», (Інститут прикладних проблем механіки і математики імені Я. С. Підстригача НАН України, 23-25 травня 2017). – Львів, 2017. – Режим доступу: http://iapmm.lviv.ua/chyt2017/abstracts/Drebotiy.pdf
16. Drebotiy R. On some properties of a posteriori error estimator based on reference solution for *hp*-adaptive finite element method // Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики: Матер. доп. XXIV Всеукр. наук. конф. 26-28 вересня 2018 р., м. Львів. – Львів : Видавництво Тараса Сороки, 2018. – С. 54–55.
17. Drebotiy R. Application of certain *hp*-adaptive finite element strategy to nonsymmetric convection-diffusion-reaction problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Ukrainian Conference on Applied Mathematics (dedicated to the 100th birth anniversary of Professor Olexandr Kostovskiy). Ivan Franko National University of Lviv, September 28-30, 2017 – Lviv, 2017. – P. 45–46.

# АНОТАЦІЯ

**Дреботій Р. Г.** *Побудова та аналіз hp-адаптивних схем методу скінченних елементів для задач дифузії-конвекції-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, 2019.

У цій роботі досліджено застосування *hp*-адаптивних схем методу скінченних елементів до сингулярно збурених крайових задач дифузії-конвекції-реакції. Досліджено загальний підхід до побудови *hp*-адаптивних схем на основі контрольного розв’язку. Побудовано ефективну реалізацію алгоритму, що використовує цей підхід, та проаналізовано низку числових експериментів. Реалізовано нову схему адаптування, в основі якої – порівняння норм різних наближень до похибки на кожному скінченному елементі для різних способів перебудови елемента. На основі такого порівняння виділено критерій, який дає змогу оптимізувати перебудову сітки скінченних елементів для наступної ітерації алгоритму. Підхід обґрунтовано для одновимірних симетричних задач. Результати числових експериментів довели, що побудовану стратегію також можна доволі ефективно застосовувати до несиметричних задач.

Серед одержаних в дисертації результатів і методів варто відзначити такі:

i. програмна імплементація та теоретичний аналіз адаптивного алгоритму на основі контрольного розв’язку;
ii. доведення можливості поелементної декомпозиції оцінювача на основі контрольного розв’язку;
iii. побудова явного та неявних апостеріорних оцінювачів похибок для апроксимацій довільних порядків;
iv. побудова стратегії *hp*-адаптування на основі порівняння норм різних наближень до похибки;
v. проведення та аналіз обчислювальних експериментів застосування побудованих алгоритмів МСЕ до сингулярно збурених задач.

**Ключові слова:** метод скінченних елементів, метод Гальоркіна, ортогональна проекція, базис Лобатто, функція Гріна, *hp*-адаптивність, апостеріорний оцінювач похибки, коректно поставлена задача, крайова задача дифузії-конвекції-реакції, контрольний розв’язок, квадратурна формула Гаусса, поліноми Лежандра, критерії Пекле та Струхаля.

**Дреботий Р. Г.** *Построение и анализ hp-адаптивных схем метода конечных элементов для задач диффузии-конвекции-реакции.* – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика. – Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2019.

В данной работе исследовано применение *hp*-адаптивных схем метода конечных элементов к сингулярно возмущенным краевым задачам диффузии-конвекции-реакции. Исследовано общий подход к построению *hp*-адаптивных

схем на основании контрольного решения. Построено эффективную реализацию алгоритма, использующего этот подход, и проанализирован ряд численных экспериментов. Реализована новая схема адаптирования, в основе которой лежит сравнение норм различных приближений к погрешности на каждом конечном элементе для различных способов перестройки элемента. Основываясь на таком сравнении, выделено критерий, позволяющий оптимизировать перестройку сетки конечных элементов для следующей итерации алгоритма. Подход обоснованно для одномерных симметричных задач. Результаты численных экспериментов доказали, что построенная стратегия также может быть достаточно эффективной при применении к несимметричным задачам.

Среди полученных в диссертации результатов и методов следует отметить следующие:

i. программная имплементация и теоретический анализ адаптивного алгоритма на основе контрольного решения;
ii. доказательство возможности поэлементной декомпозиции оценивателя на основе контрольного решения;
iii. построение явного и неявных апостериорных оценивателей погрешностей для аппроксимаций произвольных порядков;
iv. построение стратегии *hp*-адаптирования на основе сравнения норм различных приближений к погрешности;
v. проведение и анализ вычислительных экспериментов применение построенных алгоритмов к сингулярно возмущенным задачам.

**Ключевые слова:** метод конечных элементов, метод Галеркина, ортогональная проекция, базис Лобатто, функция Грина, *hp*-адаптивность, апостериорный оцениватель погрешности, корректно сформулированная задача, краевая задача диффузии-конвекции-реакции, контрольное решение, квадратурная формула Гаусса, полиномы Лежандра, критерии Пекле и Струхаля.

**Drebotiy R. G.** *Construction and analysis of hp-adaptive finite element method for diffusion-convection-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, 2019.

This thesis is devoted to the study of the application of *hp*-adaptive schemes of the finite element method to singularly perturbed diffusion-convection-reaction boundary value problems.

In the introduction the relevance of the thesis topic is substantiated, the scientific novelty and practical value of the work are defined, the subject and the goal of the research are formulated. Besides, the list of the applicant`s publications on the thesis topic is given here.

Chapter 1 is devoted to introduction into modeling of diffusion-convection-reaction phenomena. Derived formulation of diffusion-convection-reaction boundary value problem is reformulated as a corresponding variational problem. The theorem

which provides sufficient conditions of derived problem's well-posedness is proved. The problem is analyzed in the terms of Péclet and Strouhal criteria. In the end of the chapter, the overview of existing *hp*-adaptive schemes is provided.

Chapter 2 is dedicated to construction of a posteriori error estimates for high-order approximations. Special explicit error estimator is and also two implicit estimators are constructed. In addition the reference solution estimator is studied and the possibility of its elementwise decomposition is proved. All constructed estimators are used in the next chapter to construct corresponding adaptation strategy.

In Chapter 3 *hp*-adaptation schemes are considered. New strategy is constructed, which is based on the comparison of different error estimates on finite elements. Its correctness is proved for symmetric problems. Optimization of numerical procedures of constructed algorithm is discussed. Special algorithms constructed for solving the system of linear equations and generation of Gaussian quadratures of arbitrary order.

Chapter 4 is the last and it is devoted to numerical solution of some test singular perturbed problems using algorithm, constructed in chapter 3. The comparison of this algorithm with algorithm based on reference solution is provided. In addition different variations of algorithm produced by using different estimators and adaptation criteria are compared. In the end comparison with *h*-adaptive scheme is considered.

The results of the theoretical research have been confirmed by the series of numerical experiments, which were conducted using developed software.