

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ДРЕБОТІЙ РОМАН ГРИГОРОВИЧ

УДК 519.632.4

ДИСЕРТАЦІЯ

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

01.01.07 – обчислювальна математика
Математика і статистика

Подається на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ (Р. Г. Дреботій)

Науковий керівник:
Шинкаренко Георгій Андрійович,
доктор фізико-математичних наук,
професор

Львів – 2019

АНОТАЦІЯ

Дреботій Р. Г. *Побудова та аналіз h -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.

Цю роботу присвячено дослідженню існуючих та розробці нових h -адаптивних схем методу скінченних елементів (МСЕ) для сингулярно збурених крайових задач дифузії-конвекції-реакції. Ключовою особливістю адаптивних схем цього типу є використання поліноміальних апроксимацій довільних порядків на скінченних елементах поряд із згущенням вузлів сітки. Порівняно із класичними h -адаптивними схемами, такий підхід дає змогу будувати скінченновимірні простори МСЕ з кращими апроксимаційними властивостями.

У праці розроблено нову схему адаптування, в основі якої лежить порівняння норм різних наближень до похибки на кожному скінченному елементі. Базуючись на такому порівнянні, виділено критерій, який дає змогу здійснити перебудову сітки скінченних елементів для наступної ітерації алгоритму. Підхід обґрунтовано для одновимірних симетричних задач. Результати числових експериментів засвідчили, що побудована стратегія також може бути застосована до несиметричних задач.

У вступній частині роботи проаналізовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету та подано перелік основних поставлених завдань, висвітлено наукову новизну та практичне значення результатів роботи.

У першому розділі розглянуто фундаментальні фізичні співвідношення, що описують процеси дифузії, конвекції та реакції у суцільному середовищі. На їх основі сформульовано модель дифузії-конвекції-реакції, у вигляді крайової задачі. Проаналізовано арсенал наявних числових та аналітичних методів розв'язування одержаної крайової задачі. Побудовано відповідну варіаційну задачу та доведено теорему про її коректність. Виокремлено клас сингулярно збурених задач, у яких конвективна та реактивна складові значно переважають

над дифузійною складовою процесу перенесення домішки. Подано класифікацію алгоритмів адаптування. Розглянуто 4 типи схем: h -, r -, p -, hp -адаптивні. Детально проведено огляд та порівняння відомих hp -адаптивних алгоритмів.

Другий розділ присвячено побудові апостеріорних оцінювачів похибок для апроксимацій довільних порядків. Сконструйовано спеціальний явний оцінювач, що безпосередньо враховує порядок апроксимації на скінченному елементі. Доведено його ефективність та надійність. Побудовано варіаційну задачу про похибку. Базуючись на ній, отримано неявний оцінювач на основі фундаментальних розв'язків. Додатково, сконструйовано ще два неявні оцінювачі Діріхле, що дають змогу оцінити похибку при поділі скінченного елемента навпіл, або при збільшенні його порядку. Досліджено питання ефективного обчислення оцінювача на основі контрольного розв'язку та доведено теорему про його поелементну декомпозицію.

У третьому розділі розроблено нову стратегію hp -адаптування на основі порівнянь норм різних наближень до похибки. Побудовану схему теоретично обґрунтовано для симетричних задач. Розглянуто універсальний алгоритм на основі контрольного розв'язку та аспекти його ефективної реалізації. Для обчислення компонент глобальної системи лінійних рівнянь методу скінченних елементів використано квадратурні формули Гаусса високих порядків. Для побудови останніх запропоновано комбінування алгоритму Голуба-Уелша та QL -алгоритму з вибором зсувів за Уілкінсоном. Для розв'язування системи рівнянь, в обох алгоритмах hp -адаптування запропоновано та обґрунтовано використання методу статичної конденсації внутрішніх параметрів.

У четвертому розділі міститься опис розроблених програмних засобів, що реалізують побудовані алгоритми, а також подано результати обчислювальних експериментів та їх аналіз для сингулярно збурених крайових задач дифузії-конвекції-реакції. Здійснено порівняльний аналіз розробленого алгоритму адаптування та алгоритму на основі контрольного розв'язку, а також розробленого алгоритму із типовою h -адаптивною схемою. Наведено

порівняння різних оцінювачів та критеріїв адаптування. Результати числових експериментів підтверджують ефективність побудованих схем.

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 елементарної 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 із 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 Струхалія.

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 work is devoted to the study of existing and development of new *hp*-adaptive finite element schemes for singularly perturbed diffusion-convection-reaction boundary-value problems. A key feature of adaptive schemes of this type is the use of polynomial approximations of arbitrary orders on finite elements along with the spatial refinement of the finite element mesh. Compared to the classical *h*-adaptive schemes, this approach allows us to construct finite-dimensional finite element spaces with better approximation properties.

In this work, a new adaptation scheme was developed, which is based on the comparison of the norms of various approximations to the error on each finite element. Based on this comparison, a criteria has been constructed, which provide proper refinement of finite element mesh for the next iteration of the algorithm. The approach is proved for one-dimensional symmetric problems. The results of numerical experiments have shown that the constructed strategy can also be applied to nonsymmetric problems.

In the introductory part of the paper, the relevance of the research topic is described, the purpose and list of the main tasks are formulated, the scientific novelty and the practical significance of the results of the work are highlighted.

In the first section we consider fundamental physical relations, describing the processes of diffusion, convection and reaction in a continuous medium. On their basis, a diffusion-convection-reaction model is formulated in the form of a boundary-value problem. A set of available numerical and analytical methods for solving the obtained boundary value problem is analyzed. An appropriate variational problem is constructed and the theorem on its well-posedness is proved. A class of singularly perturbed problems is described, in the sense, when the convective and reactive components considerably dominate the diffusion component. The classification of adaptation algorithms is described. Considered 4 types of schemes: h -, r -, p -, hp -adaptive. A detailed review and comparison of known hp -adaptive algorithms has been provided.

The second section is devoted to the construction of a posteriori error estimators for approximations of arbitrary orders. A special explicit estimator has been constructed, which directly takes into account the order of approximation on the finite element. Its efficiency and reliability are proved. The variational problem of error is constructed. On its basis an implicit estimator was obtained, based on fundamental solutions. Additionally, two more implicit Dirichlet estimators have been constructed, which allow us to estimate an error in the case of finite element bisection or increasing of its order. The problem of effective calculation of the

estimator, based on the reference solution solution is investigated and the theorem on its elementwise decomposition is proved.

In the third section a new *hp*-adaptative finite element scheme is developed, which is based on comparisons of the different error approximations. The constructed scheme is theoretically substantiated for symmetric problems. The universal algorithm, based on the reference solution and its effective implementation is considered. Gaussian quadrature formulas of high orders are used to calculate the component of the global system of linear equations of the finite element method. To construct the latter, it is proposed to combine the Golub-Welsh algorithm and the *QL*-algorithm with Wilkinson's shifts. To solve the system of linear equations in both *hp*-adaptation algorithms, the use of the method of static condensation of internal parameters has been proposed and proved.

The fourth section contains a description of the developed software, implementing the algorithms, as well as the results of computational experiments and their analysis for singularly perturbed diffusion-convection-reaction boundary-value problems. The comparative analysis of the developed adaptation algorithm and algorithm, based on the reference solution, as well as the developed algorithm with a typical *h*-adaptive scheme is considered. The comparison of different estimators and adaptation criteria is given. The results of numerical experiments confirm the efficiency of the constructed schemes.

Among the results and methods obtained in the thesis, the following should be noted:

- i. program implementation and theoretical analysis of an adaptive algorithm based on the reference solution;
- ii. proof of elementwise decomposition of the estimator based on reference solution;
- iii. construction of explicit and implicit a posteriori error estimators for high-order approximations;
- iv. construction of the *hp*-adaptation strategy based on the comparison of the norms of different approximations to local errors;

- v. conducting and analysis of numerical experiments of application of constructed algorithms to singularly perturbed problems.

Key words: finite element method, Galerkin method, orthogonal projection, Lobatto basis, Green's function, *hp*-adaptivity, a posteriori error estimator, well-posed problem, diffusion-convection-reaction boundary value problem, reference solution, Gaussian quadrature, Legendre polynomials, Péclet and Strouhal numbers.

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. Matematika 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.

ЗМІСТ

АНОТАЦІЯ	2
ВСТУП.....	13
РОЗДІЛ 1. МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ- КОНВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ	20
1.1. Огляд наближених методів, застосованих до ДКР-моделей	20
1.2. Математичні моделі процесів дифузії, конвекції та реакції	24
1.3. Якісний аналіз рівнянь дифузії-конвекції-реакції (ДКР). Сингулярно збурені задачі. Примежеві та внутрішні шари. Критерії Пекле і Струхалія.....	29
1.4. Варіаційне формулювання задачі ДКР та його коректність.....	30
1.5. Метод Гальоркіна. Метод скінченних елементів (МСЕ)	33
1.6. Загальні властивості та апіорні оцінки похибок наближення МСЕ	36
1.7. Апостеріорні оцінювачі похибок (АОП) та їхні характеристики. Варіаційна задача про похибку	38
1.8. h -, r -, p -, hp - адаптивні схеми	41
1.9. Огляд hp -адаптивних алгоритмів	43
1.10. Висновки	48
РОЗДІЛ 2. АПОСТЕРІОРНІ ОЦІНЮВАЧІ ПОХИБОК ДЛЯ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ- КОНВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ	50
2.1. Типи АОП. Огляд.....	50
2.2. Явний оцінювач для hp -адаптивних апроксимацій	52
2.3. Неявні оцінювачі типу Діріхле	59
2.4. Оцінювач на основі фундаментального розв'язку.....	63
2.5. Оцінювач на основі reference solution	65
2.6. Висновки	74
РОЗДІЛ 3. hp -АДАПТИВНІ СХЕМИ МЕТОДУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ.....	76
3.1. Базовий алгоритм адаптування. Деякі зауваження.....	76
3.2. Алгоритм на основі reference solution	77

	12
3.3. Алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки.....	80
3.3.1. Критерії адаптування	84
3.4. Оптимізація обчислювальних витрат.....	85
3.4.1. Розв'язування СЛАР. Конденсація внутрішніх параметрів	85
3.4.2. Ефективне обчислення квадратурних формул.....	88
3.4.3. Базисні функції та ефективне обчислення їх значень	89
3.4.4. Оцінка порядків збіжності	92
3.5. Задача симетризації білінійної форми	97
3.6. Висновки	100
РОЗДІЛ 4. ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ ТА ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ.....	102
4.1. Деталі програмної реалізації.....	102
4.2. Результати обчислювальних експериментів	103
4.2.1. Порівняння розробленого алгоритму з алгоритмом на основі контрольного розв'язку	103
4.2.2. Порівняльний аналіз АОП та критеріїв адаптування.....	116
4.2.3. Порівняння розробленого алгоритму з h -адаптивними схемами	124
4.3. Висновки	126
ВИСНОВКИ.....	127
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	128
ДОДАТОК А. ПОБУДОВА КВАДРАТУРНИХ ФОРМУЛ ГАУССА	134
ДОДАТОК Б. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА.....	145

ВСТУП

Актуальність теми дослідження:

Метод скінченних елементів (МСЕ, англ.: FEM – finite element method) є одним із найпоширеніших сьогодні методів дискретизації крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь і для рівнянь у частинних похідних. Важливою особливістю цього методу є можливість його застосування до задач із складною геометричною структурою. З метою оптимізації використання наявних обчислювальних ресурсів і знаходження наближення до розв'язку задачі з гарантованою точністю, на практиці використовують *адаптивні схеми методу скінченних елементів*. Мета адаптивного МСЕ – побудова наближеного розв'язку із заданою точністю при мінімальних обчислювальних затратах. Цього досягають за допомогою ітераційної перебудови (адаптування) просторів кусково-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} → {оцінка похибок} → {перебудова сітки}

виконується циклічно, доки не буде досягнуто заданого рівня похибки та її рівномірного розподілу між скінченними елементами.

Можна виділити такі основні підходи до адаптування простору апроксимацій:

- *h-адаптування*: степінь апроксимуючих поліномів на всіх елементах однаковий і незмінний в процесі роботи алгоритму. Сітка скінченних елементів змінюється за допомогою локального додавання нових вузлів (поділ елементів);
- *r-адаптування*: степені поліномів не змінюються. Перебудова сітки зі скінченних елементів досягається зміною положення вузлів. Слід зауважити, що топологічна структура сітки в процесі роботи алгоритму не змінюється;

- *p*-адаптування: сітка вузлів незмінна, змінюються лише степені апроксимуючих поліномів на вибраних скінченних елементах;
- *hp*-адаптування: комбінування поділу елементів (*h*-) та зміни степенів поліномів (*p*-) на вибраних елементах.

Схеми *hp*-адаптування дуже привабливі з точки зору ефективності, оскільки показано [20,48], що використання *hp*-апроксимацій у деяких випадках дає змогу отримати послідовність наближень до розв'язку задачі, похибки яких спадають експоненційно відносно кількості невідомих. Більш формально, 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:

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

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

Загалом можна стверджувати, що на цей час немає цілісної та завершеної теорії *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ. Також немає готових індустріальних продуктів (комерційних), що побудовані на їхній основі. Оскільки розробка таких рішень – це дуже перспективна задача, то посилився інтерес до алгоритмів на основі так званого «контрольного розв'язку» (reference solution, див. [20]). Такі алгоритми дуже загальні й дають можливість розв'язувати практично будь-які задачі. Саме враховуючи 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. Дотепер не доведено збіжність таких алгоритмів. Варто також зауважити, що збіжність алгоритмів на основі reference solution на практиці не завжди є монотонною [20]. 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, що вже можуть використовувати інженери, а з іншого – застосування його не дає жодних гарантій ефективності. Можна вважати, що останній факт гальмує розробку комерційних продуктів на основі *hp*-адаптивних алгоритмів МСЕ.

Зв'язок роботи з науковими програмами, темами, планами

Робота виконана в рамках держбюджетної науково-дослідної теми 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. У цьому напрямку передбачено виконання таких завдань:

- 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 для 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 дослідженні 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 і розрахунків.

Особистий внесок автора

Основні результати, що винесено на захист, автор одержав самостійно. У роботах, опублікованих у співавторстві [23 – 25, 27, 28] проф. Г. А. Шинкаренку належить постановка задач, загальні підходи до побудови числових схем, передбачення одержаних результатів та їхній аналіз, загальний огляд праць. У роботі [23] 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 [24] 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 проєкції. Проф. Г. А. Шинкаренку належить вступ і постановка задачі дифузії-конвекції-реакції. У статті [25] 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 [27] 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 [28] 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 і 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: [23-25,27] у наукових фахових виданнях з переліку, затвердженого МОН України, та [28] у закордонному виданні. Стаття [25] входить до наукометричної бази даних Web of Science, [28] складає розділ монографії. У матеріалах наукових конференцій опубліковано 12 тез та матеріалів доповідей.

Структура 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.

*Автор дисертації висловлює щирю вдячність науковому керівнику
Шинкаренку Георгію Андрійовичу.*

РОЗДІЛ 1. МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ-КОНВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ

Модель дифузії-конвекції-реакції (ДКР) є однією з найбільш використовуваних моделей у сучасній науці [13]. Ця модель дає змогу знайти розподіл концентрації субстанції в середовищі під дією трьох факторів: дифузії – руху субстанції із зон з вищою концентрацією у зони, де вона нижча (просторове вирівнювання концентрації), конвекції – фізичного переміщення субстанції у просторі, та хімічної реакції – зміни маси субстанції в результаті взаємоперетворення речовин. ДКР-модель є важливою як з точки зору математичного моделювання: задача міграції домішок, задача оптимального розміщення джерел забруднень, задача про дифузійний та дрейфовий струми у напівпровідниках тощо, так і в обчислювальній математиці – як абстрактна модель, що описує потоки. Найпростіша модель ДКР описується крайовою задачею із загальним лінійним диференціальним рівнянням у частинних похідних другого порядку. Цей факт дає змогу, зокрема, надавати певної фізичної інтерпретації співвідношенням, які одержують при побудові обчислювальних схем чи при якісному аналізі задач із рівняннями другого порядку, що, своєю чергою, є потужним інструментом верифікації результатів обчислювальних експериментів. Тут треба окремо відзначити різного роду рівняння балансу, які виникають при аналізі обчислювальних схем [7]. Звісно, що вищезгадане співставлення абстрактних математичних моделей із реальними фізичними категоріями є ключем до їх глибшого розуміння, а також до більш точного визначення меж застосовності цих моделей до реальних фізичних процесів.

1.1. Огляд наближених методів, застосованих до ДКР-моделей

На сьогоднішньому етапі розвитку обчислювальної математики розроблено цілу низку числових та аналітичних методів наближеного розв'язування крайових задач ДКР.

Історично першим методом розв'язування крайових задач для рівнянь у частинних похідних був метод Фур'є. Інша назва цього методу – метод

відокремлення змінних. Він є аналітичним за своєю природою (відшукується певна функція) і дає змогу знайти точний розв'язок задачі у вигляді функціонального ряду – розвинення за базисом Шаудера у певному «природньому» для задачі функціональному просторі (ряд Фур'є). Часткові суми отриманого ряду слугують наближеннями до шуканого розв'язку. Зазвичай розв'язок задачі шукають у просторі інтегровних (за Лебегом) з квадратом в області задачі функцій. Застосовність методу Фур'є прямо пов'язана із проблемою побудови базису вибраного простору. Ця проблема складна і, як наслідок, практичне застосування методу можливе лише до задач із доволі простими рівняннями у прямокутних чи кругових областях. У першому випадку можна отримати класичний (кратний, якщо область задачі є багатовимірною) тригонометричний ряд Фур'є, а у другому, наприклад, для рівняння Лапласа – ряд за функціями Бесселя. Також важливим є питання рівномірної збіжності отримуваних рядів. Логічним продовженням ідеї рядів Фур'є є інтегральне перетворення Фур'є (та інші перетворення такого типу). Згадане перетворення також можна застосовувати для знаходження загальних розв'язків рівнянь. Для інженерної практики важливо отримувати функцію, значення якої обчислювати просто. У випадку з інтегральними перетвореннями постає проблема апроксимації складних багатовимірних інтегралів, яка сама по собі, з обчислювальної точки зору, не є простою. Незважаючи на погану практичну застосовність методу Фур'є, ряди і перетворення Фур'є – це потужний засіб дослідження у математиці та математичній фізиці (наприклад, див. метод Неймана для дослідження стійкості числових схем [17-18]). Уникнути описаних проблем і суттєво спростити процес наближеного розв'язування крайових задач вдалося після появи перших числових методів.

Числові методи, на відміну від аналітичних, знаходять наближений розв'язок не у вигляді функції, а як скінченний набір чисел [4]. Зазвичай ці числа наближені до значень шуканого розв'язку у скінченній множині точок. Першим відомим числовим методом був метод Ейлера для розв'язування задачі Коші для звичайного диференціального рівняння. Попри те, що цей метод

нестійкий, фундаментальна його ідея – апроксимувати похідну функції скінченною різницею, лягла в основу загального підходу (метод скінченних різниць) до побудови числових схем для задач математичної фізики, які тепер називають різницеvими. Полягає ідея ось у чому: вибираємо прямокутну сітку вузлів в області задачі, а потім, шляхом заміни похідних у рівнянні та крайових умовах на скінченні різниці, які побудовані лише на вузлах вибраної сітки, задача зводиться до системи числових (алгебраїчних чи трансцендентних) рівнянь (лінійних у випадку лінійного диференціального рівняння). Оскільки задача при такому підході «переводиться» із нескінченновимірного простору функцій у скінченновимірний простір векторів, то такий перехід називають дискретизацією задачі. Розв'язки отриманої системи рівнянь є наближеннями до значень точного розв'язку у вузлах сітки. Різницеvі методи дають змогу працювати в областях із довільною геометрією (із певними поправками, щодо апроксимації крайових умов). Суттєвим недоліком різницеvих методів є можливість використання лише прямокутних сіток. Проблема виникає, коли розв'язок вихідної задачі має складну структуру з наявністю зон із великим значенням градієнту. В такому разі похибка наближення може бути дуже нерівномірно розподілена між вузлами і, як результат, отримане наближення втрачає практичний інтерес, оскільки воно не буде коректно відтворювати структури точного розв'язку. Задачами, про які йдеться, зокрема, завжди є так звані сингулярно збурені задачі дифузії-конвекції-реакції. Притаманною їм особливістю є значне переважання реактивних і конвективних процесів над дифузійними. Для уникнення нерівномірності розподілу похибки природно було б згущувати вузли сітки в зонах області задачі, де похибка більша. Така стратегія може бути застосована у методі скінченних елементів (МСЕ). Цей метод застосовують до задач із областями довільної геометрії, і він також є дуже гнучким відносно побудови сітки вузлів [2]. Використання специфічних нерівномірних сіток розглядали, зокрема, М. Бахвалов і Г. Шишкін.

Для дискретизації крайових задач у МСЕ використовуються варіаційні методи. Первісно, такі методи зароджувались у механіці. Їхню появу визначив

природній інтерес науки до фундаментальних принципів, що обґрунтовують рівняння руху. Пануюча ідея того, що природа «вибирає» таку траєкторію руху тіла, для якої значення певної величини є мінімальним, лягла в основу формулювання механіки Лагранжа [47]. Остання ж була передумовою виникнення окремого розділу математики – варіаційного числення, розвиток якого пов'язаний із роботами Ейлера та Лагранжа. Об'єктом дослідження є функціонали та задачі знаходження екстремалей – значень аргументів функціоналу, при яких він досягає екстремуму. Показано, що є певний взаємний зв'язок між розв'язуванням крайових задач і задач знаходження екстремалей функціоналів. Крім того у математиці є відомим принцип Діріхле, який для задачі Діріхле для рівняння Пуассона наводить «еквівалентну» задачу мінімізації функціонала. Принцип сформулював Вейерштрасс, а умови його коректності досліджували Ріман, Пуанкаре та Гільберт. Увага до строгого математичного обґрунтування варіаційних принципів механіки привела до виникнення таких важливих понять як лінійний простір, лінійний оператор, гільбертів простір. Ключовим моментом в обґрунтуванні принципу Діріхле є повнота простору, в якому шукають екстремаль [47]. Задачі знаходження екстремуму функціоналів, як і відповідні крайові задачі, є неперервними за своєю суттю. Рітц запропонував метод, який дає змогу дискретизувати задачу мінімізації функціоналу [7, 6, 47]. Ідея методу Рітца – розглянути задачу мінімізації вихідного функціоналу на *скінченновимірному* підпросторі простору функцій, на якому початково розглядалася задача. Легко бачити, що при виборі у скінченновимірному підпросторі базису така задача зводиться до задачі мінімізації числової функції багатьох змінних. Систему рівнянь для коефіцієнтів невідомого розв'язку дискретної задачі отримують з необхідної умови екстремуму в точці – рівності градієнта нулю. Знайдений розв'язок приймають за наближення до розв'язку вихідної нескінченновимірної задачі. Важливою задачею є вибір скінченновимірному простору для дискретизації. Тут, як і в методі Фур'є, виникає проблема побудови базису, проте, лише у скінченновимірному підпросторі, на якому розглядалася дискретизована задача.

Цю проблему ефективно вирішує метод скінченних елементів, який і полягає у специфічному виборі скінченного набору базисних функцій, і вибір простору дискретизованої задачі у вигляді лінійної оболонки, побудованої на цих функціях. Слід зауважити, що метод Рітца безпосередньо застосовний лише до стаціонарних задач із самоспряженими операторами.

Як основу для МСЕ використовують також інші варіаційні методи: Гальоркіна, Петрова-Гальоркіна, метод найменших квадратів, метод найменших квадратів на границі області, метод Трефтца, метод найшвидшого спуску, метод Куранта [47]. Якщо порівнювати метод скінченних різниць і МСЕ на абстрактному рівні, то перший – це, по суті, апроксимація оператора задачі, а другий – апроксимація простору, в якому відшукується розв’язок.

Коли задача описує змінний в часі процес, то потрібна додаткова дискретизація за часом. Загалом по часовій змінній ми будемо отримувати певну задачу Коші, яку зазвичай дискретизують з використанням скінченних різниць. За деталями див. [7].

У цій праці розглянуто МСЕ на основі методу Гальоркіна.

1.2. Математичні моделі процесів дифузії, конвекції та реакції

Розглянемо деяку область $\Omega \in \mathbb{R}^d$ та проміжок часу $T = [0, t_{max}]$. Нехай у цій області розподілено деяку субстанцію з густиною розподілу $u = u(\vec{x}, t)$, $(\vec{x}, t) \in \Omega \times T$. Зафіксуємо точку $\vec{x}_0 \in \Omega$ і довільно виберемо однозв’язну область $\omega \subset \Omega$ із гладкою межею $\partial\omega$ такою, що $\vec{x}_0 \in \omega$. Позначимо вектор одиничної зовнішньої нормалі до ω як $\vec{\nu}$ (див. Рис.1.1).

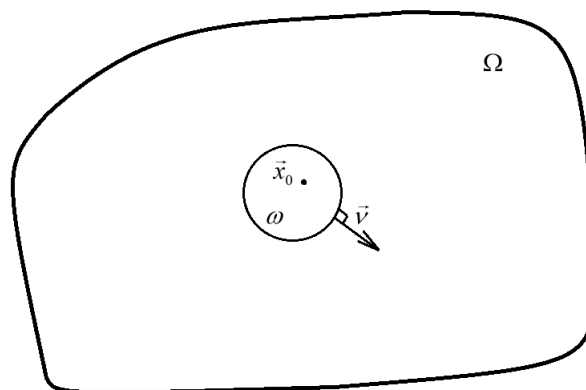


Рис.1.1.

Швидкість руху середовища в області Ω визначається вектором конвективного перенесення $\vec{\beta} = \vec{\beta}(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}^d$. Згідно із законом Фіка [12], дифузійна складова потоку субстанції лінійно залежить від градієнта густини – $\vec{\mathbf{J}}_{diff} = -\mu \nabla u$. В останньому співвідношенні $\mu = \{\mu_{ij}\}_{i,j=1,\overline{d}}$ є матрицею дифузії, що в реальних задачах симетрична і додатно визначена [12]. Знак “–” вказує на те, що субстанція рухається із зони з вищою концентрацією у зони, де вона нижча. Просторовий оператор ∇ є градієнтом функції в \mathbb{R}^d і визначається стандартно:

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \right\}_{i=1,\overline{d}} \in \mathbb{R}^d. \quad (1.1)$$

Тепер можемо записати повний потік субстанції $\vec{\mathbf{J}}$ як суму конвективної та дифузійної складових:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\beta}u + \vec{\mathbf{J}}_{diff} = \vec{\beta}u - \mu \nabla u. \quad (1.2)$$

Нехай $g = g(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}$ – густина джерел субстанції, що розподілені в області Ω . Миттєва маса субстанції, яка утворюється в області ω (швидкість утворення) в момент часу t , становить:

$$\mathbf{G}(t) = \int_{\omega} g d\vec{x}. \quad (1.3)$$

Швидкість надходження речовини в область ω за рахунок конвекції та дифузії становить:

$$\mathbf{D}(t) = - \int_{\partial\omega} \vec{\mathbf{J}} \cdot \vec{\nu} dS, \quad (1.4)$$

де dS – елемент межі $\partial\omega$. Знак “–” перед інтегралом вибрано тому, що нормаль $\vec{\nu}$ – зовнішня. Тепер можемо записати рівняння, що виражає баланс маси субстанції на відрізку часу $[t_0, t_0 + \Delta t]$:

$$\int_{\omega} [u(\vec{x}, t_0 + \Delta t) - u(\vec{x}, t_0)] d\vec{x} = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} [\mathbf{D}(t) + \mathbf{G}(t)] dt. \quad (1.5)$$

Це рівняння постулює фундаментальний аспект моделі, яку ми будуємо: зміна маси субстанції в довільній області залежить лише від надходження її з джерел та конвективно-дифузійного перенесення через межу цієї області.

Припустивши тепер, що підінтегральні функції неперервні, можемо до інтегралів у (1.5) застосувати теорему про середнє. Більш точно, існують точка $\bar{x}_* \in \omega$ і момент часу $t_* \in [t_0, t_0 + \Delta t]$ такі, що виконується співвідношення:

$$[u(\bar{x}_*, t_0 + \Delta t) - u(\bar{x}_*, t_0)] |\omega| = [\mathbf{D}(t_*) + \mathbf{G}(t_*)] \Delta t, \quad (1.6)$$

де $|\omega| = \text{mes}(\omega)$. Запишемо останнє рівняння у розширеній формі:

$$[u(\bar{x}_*, t_0 + \Delta t) - u(\bar{x}_*, t_0)] |\omega| = \left[- \int_{\partial\omega} \vec{\mathbf{J}}(\bar{x}, t_*) \cdot \vec{\nu} dS + \int_{\omega} g(\bar{x}, t_*) d\bar{x} \right] \Delta t. \quad (1.7)$$

Застосувавши до першого інтегралу у правій частині формулу Гаусса-Остроградського, отримаємо таку рівність:

$$[u(\bar{x}_*, t_0 + \Delta t) - u(\bar{x}_*, t_0)] |\omega| = \Delta t \int_{\omega} [-\nabla \cdot \vec{\mathbf{J}}(\bar{x}, t_*) + g(\bar{x}, t_*)] d\bar{x}. \quad (1.8)$$

Використавши для інтегралу у (1.8) теорему про середнє значення та поділивши останню рівність на $|\omega| \Delta t$, отримаємо, що для деякої точки $x_{**} \in \omega$:

$$\frac{u(\bar{x}_*, t_0 + \Delta t) - u(\bar{x}_*, t_0)}{\Delta t} = -\nabla \cdot \vec{\mathbf{J}}(\bar{x}_{**}, t_*) + g(\bar{x}_{**}, t_*). \quad (1.9)$$

Тепер, припустивши, що відповідні функції достатньо гладкі, перейдемо у (1.9) до границі при $\text{diam}(\omega) \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$. Отримаємо:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(\bar{x}_0, t_0) = -\nabla \cdot \vec{\mathbf{J}}(\bar{x}_0, t_0) + g(\bar{x}_0, t_0). \quad (1.10)$$

Враховуючи довільність вибору $(\bar{x}_0, t_0) \in \Omega \times T$ та вираз для потоку (1.2), опускаючи аргументи функцій, для всіх $(\bar{x}, t) \in \Omega \times T$ можемо записати:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{\beta}u - \mu \nabla u) + g. \quad (1.11)$$

Отримане рівняння (1.11) називають *рівнянням дифузії-конвекції*. Розкривши дужки та застосувавши правило добутку для похідних до першого доданку, останнє рівняння можна привести до вигляду:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - u \nabla \cdot \vec{\beta} - \vec{\beta} \cdot \nabla u + g. \quad (1.12)$$

Зазвичай для розглядуваного середовища виконується умова нестисливості [6]:

$$\nabla \cdot \vec{\beta} \equiv 0 \text{ в } \Omega, \quad (1.13)$$

враховуючи яку, рівняння (1.12) можемо спростити:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \vec{\beta} \cdot \nabla u + g. \quad (1.14)$$

Зміст доданку $u \nabla \cdot \vec{\beta}$ в (1.12) при виконанні умови нестисливості легко побачити, якщо помножити (1.13) на u та проінтегрувати отриману рівність на довільній області Q , що належить Ω і містить деяку фіксовану точку y . Застосувавши до лівої частини формулу Гаусса-Остроградського і спрямовуючи діаметр області Q до нуля (так, що точка $y \in Q$), бачимо – умова (1.13) гарантує, що сумарний масовий розхід субстанції через границю цього «нескінченно малого» околу точки y буде дорівнювати нулю.

Якщо, на додаток до вищеописаного, частина субстанції розпадається (перетворюється) в результаті якоїсь хімічної реакції, то, вважаючи відтік субстанції пропорційним до її густини, можемо функцію джерел g подати у вигляді:

$$g = f - \sigma u, \quad (1.15)$$

де $f = f(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}$ – «нова» густина джерел субстанції, $\sigma = \sigma(\vec{x}, t) \in \mathbb{R}$ – величина, що визначає інтенсивність проходження реакції, зокрема, у деяких застосуваннях, вона відома як *коефіцієнт біохімічного розпаду* [6]. З урахуванням (1.15) рівняння (1.14) набуде вигляду:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \vec{\beta} \cdot \nabla u - \sigma u + f. \quad (1.16)$$

Отримане рівняння називають рівнянням *дифузії-конвекції-реакції* (ДКР). Якщо процес зміни концентрації субстанції стабілізувався з часом, то отримаємо, що

$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ і після перегрупування доданків у (1.16) прийдемо до *стаціонарного рівняння дифузії-конвекції-реакції*:

$$-\nabla \cdot (\mu \nabla u) + \vec{\beta} \cdot \nabla u + \sigma u = f. \quad (1.17)$$

Останнє рівняння, разом із відповідними крайовими умовами на границі області Ω , є моделлю ДКР, числові схеми методу скінченних елементів для якої автор досліджує у цій дисертаційній роботі. Всі подальші результати наведено для одновимірного випадку.

Отже, сформулюємо одновимірну крайову задачу на області $G = (0, L)$, яку ми будемо розглядати далі:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Задано коефіцієнт дифузії } \bar{\mu} = \bar{\mu}(x), \\ \text{«вектор» конвективного перенесення } \bar{\beta} = \bar{\beta}(x), \\ \text{коефіцієнт біохімічного розпаду } \bar{\sigma} = \bar{\sigma}(x), \\ \text{інтенсивність джерел домішки } \bar{f} = \bar{f}(x) \text{ та} \\ \text{сталі } \bar{\alpha}, \bar{\gamma}, \bar{g}_0, \bar{g}_L \in \mathbb{R}. \\ \text{Знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ -\frac{d}{dx} \left(\bar{\mu} \frac{du}{dx} \right) + \bar{\beta} \frac{du}{dx} + \bar{\sigma} u = \bar{f} \text{ на } G = (0, L), \\ \bar{\mu} \frac{du}{dx} \Big|_{x=0} = \bar{\alpha} [u(0) - \bar{g}_0], \\ -\bar{\mu} \frac{du}{dx} \Big|_{x=L} = \bar{\gamma} [u(L) - \bar{g}_L]. \end{array} \right. \quad (1.18)$$

Вибір крайових умов Робена дає змогу в програмній реалізації МСЕ легко задавати будь-які інші типи крайових умов відповідним вибором коефіцієнтів.

Окрім того, слід зазначити, що в одновимірному випадку ми не будемо вимагати виконання умови нестисливості (1.13), проте, не зменшуючи загальності з точки зору побудови обчислювальної схеми, ми розглядатимемо рівняння у вигляді (1.17).

Далі буде показано, які умови повинні задовольняти дані задачі (1.18) для того, щоб вона була коректно поставленою.

1. 3. Якісний аналіз рівнянь дифузії-конвекції-реакції (ДКР). Сингулярно збуджені задачі. Примежеві та внутрішні шари. Критерії Пекле і Струхалія

У реальних задачах на загальну структуру розв'язків моделі ДКР суттєво впливають співвідношення між швидкостями перебігу окремих процесів: дифузії, конвекції та реакції. Щоб побачити цю специфіку задачі (1.18), виконаємо масштабування змінної x , увівши в розгляд додаткову змінну $t \in [0,1]$, згідно з правилом: $x = Lt$. Масштабуючи також коефіцієнти дифузії, конвекції і реакції в такий спосіб, щоб вони по абсолютній величині не набували значень більших за 1, та, виконавши відповідне перетворення інших даних задачі, згідно правил:

$$\begin{cases} \mu := \bar{\mu} \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1}, & \beta := \bar{\beta} \|\bar{\beta}\|_{\infty, G}^{-1}, & \sigma := \bar{\sigma} \|\bar{\sigma}\|_{\infty, G}^{-1}, & f := L^2 \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1} f, \\ \alpha := \bar{\alpha} L \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1}, & \gamma := \bar{\gamma} L \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1}, & g_0 := L \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1} \bar{g}_0, & g_1 := L \|\bar{\mu}\|_{\infty, G}^{-1} \bar{g}_L, \end{cases} \quad (1.19)$$

після нескладних алгебраїчних перетворень, задачу (1.18) зведемо до безрозмірного вигляду

$$\begin{cases} \text{Знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ -(\mu u')' + \text{Pe}[\beta u' + \text{St} \sigma u] = f \quad \text{на } \Omega = (0,1), \\ \mu u'|_{t=0} = \alpha[u(0) - g_0], \\ -\mu u'|_{t=1} = \gamma[u(L) - g_1], \end{cases} \quad (1.20)$$

де $v' := \frac{dv}{dt}$ і безрозмірні величини

$$\text{Pe} := \frac{\|\bar{\beta}\|_{\infty, G} L}{\|\bar{\mu}\|_{\infty, G}}, \quad \text{St} := \frac{\|\bar{\sigma}\|_{\infty, G} L}{\|\bar{\beta}\|_{\infty, G}} \quad (1.21)$$

є добре відомими в науці числами (критеріями подібності) Пекле і Струхалія.

Тут $\|\bullet\|_{\infty, G}$ є нормою в просторі Лебега $L^\infty(G)$: $\|v\|_{\infty, G} = \text{ess sup}_{x \in G} |v(x)|$.

Легко бачити, що безрозмірний критерій Пекле є відношенням швидкості конвективного перенесення до інтенсивності дифузії, а критерій Струхалія – відношенням швидкості проходження хімічної реакції до швидкості конвективного перенесення.

Якщо у рівнянні в (1.21) значення $Pe \rightarrow \infty$, то це рівняння вироджується у рівняння першого порядку:

$$\beta u' + St \sigma u = \frac{f}{Pe} \quad (1.22)$$

і одна з крайових умов у (1.20) стає зайвою. Якщо ж у (1.22) також $St \rightarrow \infty$ то отримаємо числове рівняння

$$\sigma u = \frac{f}{PeSt}. \quad (1.23)$$

На практиці значна величина чисел Пекле чи Струхалія за наявності двох крайових умов приводить до появи у структурі шуканих розв'язків зон із дуже великими градієнтами – так званих внутрішніх чи примежевих шарів. Задачі, розв'язки яких демонструють таку поведінку, називають *сингулярно збуреними*. Вказана особливість сингулярно збурених задач робить практично незастосовним до них класичний метод скінченних елементів із рівномірними сітками і приводить до потреби використання різного роду адаптивних схем, про які йтиметься далі.

1.4. Варіаційне формулювання задачі ДКР та його коректність

Використовуючи стандартну техніку [1, 3, 13]: домножуючи скалярно (в просторі $L^2(\Omega)$) та інтегруючи частинами для пониження порядку похідних, варіаційне формулювання задачі (1.20) подамо у вигляді:

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u \in V := H^1(\Omega) \text{ таку, що} \\ c_\Omega(u, v) = \langle l_\Omega, v \rangle \quad \forall v \in V, \end{cases} \quad (1.24)$$

де

$$c_\Omega(u, v) := (\mu u', v')_\Omega + Pe \cdot [(\beta u', v)_\Omega + St \cdot (\sigma u, v)_\Omega] + \alpha uv|_{t=0} + \gamma uv|_{t=1} \quad \forall u, v \in V, \quad (1.25)$$

$$\langle l_\Omega, v \rangle := (f, v)_\Omega + \alpha g_0 v(0) + \gamma g_1 v(1) \quad \forall v \in V. \quad (1.26)$$

Тут $(u, v)_\Omega = \int_\Omega uv dx$ – скалярний добуток в просторі $L^2(\Omega)$.

Ми отримали достатні умови коректності задачі (1.24) і довели [27]:

Теорема 1.1. (Про коректність варіаційної задачі)

Нехай дані задачі (1.20) задовольняють наступні умови

$$\begin{cases} \mu \in L^\infty(\Omega), \\ \mu \geq \mu_0 = \text{const} > 0 \text{ майже скрізь у } \Omega, \end{cases} \quad (1.27)$$

$$\begin{cases} \beta, \sigma \in L^\infty(\Omega) \\ \sigma - \frac{1}{2} \text{Re } \beta' \geq c_0 = \text{const} > 0 \text{ майже скрізь у } \Omega, \end{cases} \quad (1.28)$$

$$\alpha - \frac{1}{2} \text{Re } \beta(0) > 0, \quad \gamma + \frac{1}{2} \text{Re } \beta(1) > 0, \quad (1.29)$$

$$f \in L^2(\Omega). \quad (1.30)$$

Тоді

(i) білінійна форма $c_\Omega : V \times V \rightarrow R$ є неперервною, причому:

$$|c_\Omega(u, v)| \leq 4 \max\{1, \text{Re}, \text{Re} \cdot \text{St}, |\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V; \quad (1.31)$$

(ii) білінійна форма $c_\Omega : V \times V \rightarrow R$ є V -еліптичною, і визначає енергетичну норму

$$\|v\|_{E, \Omega} := \sqrt{c_\Omega(v, v)} \quad \forall v \in V = H^1(\Omega), \quad (1.32)$$

навіть більше,

$$c_0 \|v\|_V^2 \leq \|v\|_{E, \Omega}^2 \quad \forall v \in V, \quad (1.33)$$

де $c_0 = \min\{\frac{1}{2} \mu_0, \text{Re}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta' + C_F \min\{\frac{1}{2} \mu_0, C_D\})\}$;

(iii) лінійний функціонал $l_\Omega : V \rightarrow R$ є неперервним і

$$\begin{aligned} & |\langle l_\Omega, v \rangle| \leq \\ & \leq (\|f\|_{0, \Omega} + 2 \max\{|\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|(g_1 - g_0)x + g_0\|_{1, \Omega}) \|v\|_V \quad \forall v \in V; \end{aligned} \quad (1.34)$$

(iv) існує єдиний розв'язок $u \in V$ задачі (1.24) і справедлива оцінка

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{c_0} \|l_\Omega\|_*, \quad (1.35)$$

де $\|l_\Omega\|_* = \sup_{v \in V, v \neq 0_V} \frac{|\langle l_\Omega, v \rangle|}{\|v\|_V}$ – стандартна норма функціонала у спряженому

просторі.

Доведення. Визначимо лінійну функцію $\rho = \rho(t)$ таку, що $\rho(t) := (\gamma + \alpha)t - \alpha$, і виконаймо низку оцінок:

$$\begin{aligned}
\alpha uv|_{t=0} + \gamma uv|_{t=1} &= \rho uv|_0^1 = \int_0^1 [(\gamma + \alpha)t - \alpha] uv' dt \\
&= \int_0^1 [(\gamma + \alpha)uv + \rho u'v + \rho uv'] dt \\
&\leq \max\{\|\rho\|_{\infty, \Omega}, |\gamma + \alpha|\} \int_0^1 (|uv| + |u'v| + |uv'|) dt \\
&\leq 2 \max\{|\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|u\|_{1, \Omega}, \|v\|_{1, \Omega} \quad \forall u, v \in V.
\end{aligned} \tag{1.36}$$

(i) Використовуючи отриману фінальну оцінку покажемо обмеженість білінійної форми задачі:

$$\begin{aligned}
|c_{\Omega}(u, v)| &\leq |(\mu u', v')_{\Omega}| + \text{Pe} |(\beta u', v)_{\Omega}| + \text{St} \cdot |(\sigma u, v)_{\Omega}| + |(\rho uv)|_0^1 \\
&\leq \|u'\|_{0, \Omega} \|v'\|_{0, \Omega} + \text{Pe} [\|u'\|_{0, \Omega} + \text{St} \|u\|_{0, \Omega}] \|v\|_{0, \Omega} + |(\rho uv)|_0^1 \\
&\leq 2 \max\{1, \text{Pe}, \text{Pe} \cdot \text{St}\} \|u\|_V \|v\|_V \\
&\quad + 2 \max\{|\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|u\|_V \|v\|_V \\
&\leq 4 \max\{1, \text{Pe}, \text{Pe} \cdot \text{St}, |\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V.
\end{aligned} \tag{1.37}$$

(ii) Щоб одержати (1.33), ми починаємо виконувати такі оцінки:

$$\begin{aligned}
c_{\Omega}(v, v) &= \int_0^1 [\mu(v')^2 + \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta') v^2] dt \\
&\quad + (\alpha - \frac{1}{2} \text{Pe} \beta) v^2(0) + (\gamma + \frac{1}{2} \text{Pe} \beta) v^2(1) \\
&\geq \int_0^1 [\mu_0(v')^2 + \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta') v^2] dt + C_D [v^2(0) + v^2(1)] \\
&\geq \int_0^1 [\frac{1}{2} \mu_0(v')^2 + \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta') v^2] dt \\
&\quad + \min\{\frac{1}{2} \mu_0, C_D\} [\int_0^1 (v')^2 dx + v^2(0) + v^2(1)] \quad \forall v \in V,
\end{aligned}$$

де $C_D := \min\{(\alpha - \frac{1}{2} \text{Pe} \beta), (\gamma + \frac{1}{2} \text{Pe} \beta)\} > 0$. Використовуючи нерівність Фрідрікса [3,13,47]

$$\int_0^1 (v')^2 dt + [v^2(0) + v^2(1)] \geq C_F \int_0^1 v^2 dt \quad C_F = \text{const} > 0 \quad \forall v \in H^1(\Omega),$$

легко отримаємо нерівність (1.33):

$$\begin{aligned}
c_{\Omega}(v, v) &\geq \int_0^1 [\frac{1}{2} \mu_0(v')^2 + \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta') v^2] dt + C_F \min\{\frac{1}{2} \mu_0, C_D\} \int_0^1 v^2 dt \\
&= \int_0^1 [\frac{1}{2} \mu_0(v')^2 + \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta' + C_F \min\{\frac{1}{2} \mu_0, C_D\}) v^2] dt \\
&\geq c_0 \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V, \quad c_0 = \min\{\frac{1}{2} \mu_0, \text{Pe}(\text{St} \sigma - \frac{1}{2} \beta' + C_F \min\{\frac{1}{2} \mu_0, C_D\})\}.
\end{aligned}$$

Щодо оцінки константи C_F – див. [47].

(iii) Для того, щоб показати неперервність лінійного функціоналу, використаємо аналогічну техніку оцінювання:

$$\begin{aligned}
|\langle l_\Omega, v \rangle| &\leq |(f, v)_\Omega| + |\alpha g_0 v(0) + \gamma g_1 v(1)| \\
&\leq \|f\|_{0,\Omega} \|v\|_{0,\Omega} + |\rho[(g_1 - g_0)x + g_0]v|_0| \\
&\leq \|f\|_{0,\Omega} \|v\|_{0,\Omega} + 2 \max\{|\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|(g_1 - g_0)x + g_0\|_{1,\Omega} \|v\|_{1,\Omega} \\
&\leq (\|f\|_{0,\Omega} + 2 \max\{|\alpha|, |\gamma|, |\alpha + \gamma|\} \|(g_1 - g_0)x + g_0\|_{1,\Omega}) \|v\|_V \quad \forall v \in V.
\end{aligned}$$

(iv) Беручи до уваги теорему Лакса-Мільграма-Вишика [13], зразу ж отримаємо, що варіаційна задача (1.24) має єдиний розв'язок, який неперервно залежить від даних задачі. \square

1.5. Метод Гальоркіна. Метод скінченних елементів (МСЕ)

У методі Гальоркіна наближений розв'язок варіаційної задачі відшукують у вигляді лінійної комбінації $u_h(t) = \sum_{k=0}^n q_k \varphi_k(t)$, де $\{\varphi_k(t)\}$ – система вибраних у якийсь спосіб лінійно незалежних функцій (детальніше див. [3, 13]). Коефіцієнти q_k знаходять з умови:

$$c_\Omega(u_h, \varphi_j) = \langle l_\Omega, \varphi_j \rangle, \quad j = \overline{0, n}. \quad (1.38)$$

Підставивши вираз наближеного розв'язку, отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР):

$$\sum_{k=0}^n q_k c_\Omega(\varphi_k, \varphi_j) = \langle l_\Omega, \varphi_j \rangle, \quad j = \overline{0, n}. \quad (1.39)$$

За способом побудови наближеного розв'язку метод скінченних елементів співпадає з методом Гальоркіна. МСЕ, на відміну від методу Гальоркіна, дає конкретний спосіб побудови системи функцій $\{\varphi_k(t)\}$. Основна ідея полягає у тому, щоб використовувати функції з локальними носіями, що в результаті приведе до розрідженої СЛАР.

Продемонструємо детальніше процес отримання наближення у методі скінченних елементів на прикладі лінійної апроксимації на кожному скінченному елементі.

Нехай $\mathfrak{T} = \{t_i\}_{i=0}^N$ – поділ відрізка $[0, 1]$: $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = 1$, $K = [t_{k-1}, t_k]$ – k -ий скінчений елемент і крок $h_k = t_k - t_{k-1}$. Виходячи з варіаційного формулювання поставленої задачі, введемо такі позначення:

$$c_k(u, v) := (\mu u', v')_K + \text{Pe} \cdot [(\beta u', v)_K + \text{St} \cdot (\sigma u, v)_K] + \alpha uv \delta_{1, k} |_{t=0} + \gamma uv \delta_{N, k} |_{t=1} \quad \forall u, v \in V, \quad (1.40)$$

$$\langle l_k, v \rangle := (f, v)_K + \alpha g_0 v(0) \delta_{1, k} + \gamma g_1 v(1) \delta_{N, k} \quad \forall v \in V, \quad (1.41)$$

де $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } i = j \\ 0, & \text{якщо } i \neq j \end{cases}$ – символ Кронекера.

Як систему функцій $\{\phi_k(t)\}$, що використовується в методі Гальоркіна, виберемо систему функцій Куранта (англ. *hat functions*):

$$\varphi_k(t) = \begin{cases} \frac{t - t_{k-1}}{h_k}, & t \in [t_{k-1}, t_k] \\ \frac{t_{k+1} - t}{h_{k+1}}, & t \in [t_k, t_{k+1}] \\ 0, & t \notin [t_{k-1}, t_{k+1}] \end{cases}. \quad (1.42)$$

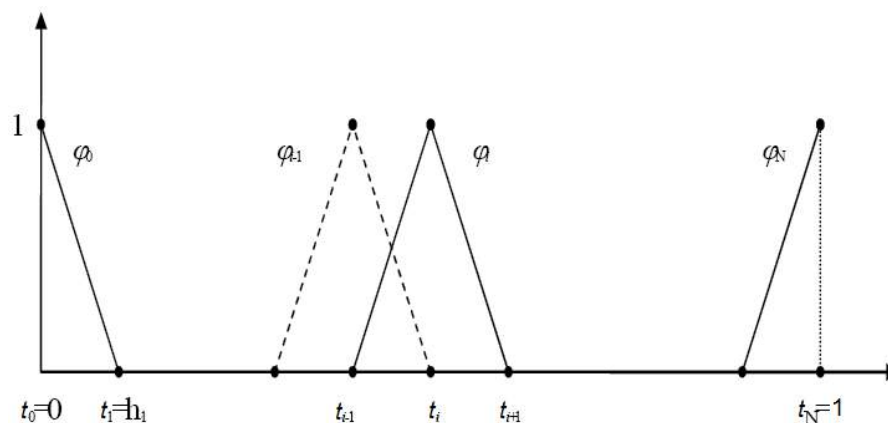


Рис.1.2. Графіки функцій Куранта

Шукатимемо розв'язок у вигляді: $u_h(t) = \sum_{k=0}^N q_k \varphi_k(t)$. Невідомі коефіцієнти знайдемо з системи $c_\Omega(\sum_{k=0}^N q_k \varphi_k, \varphi_j) = \langle l_\Omega, \varphi_j \rangle$, $j = \overline{0, N}$.

Використовуючи введені вище позначення і вигляд функцій Куранта, можемо отриману систему рівнянь записати так:

$$\sum_{i=1}^N c_i(q_{i-1} \varphi_{i-1} + q_i \varphi_i, \varphi_j) = \sum_{i=1}^N \langle l_i, \varphi_j \rangle, \quad j = \overline{0, N}$$

або, враховуючи, що $\text{supp}(\varphi_j) = [t_{j-1}, t_{j+1}]$, $j = \overline{1, N-1}$, $\text{supp}(\varphi_0) = [t_0, t_1]$, $\text{supp}(\varphi_N) = [t_{N-1}, t_N]$, отримуємо:

$$c_1(q_0\varphi_0 + q_1\varphi_1, \varphi_0) = \langle l_1, \varphi_0 \rangle,$$

$$c_j(q_{j-1}\varphi_{j-1} + q_j\varphi_j, \varphi_j) + c_{j+1}(q_j\varphi_j + q_{j+1}\varphi_{j+1}, \varphi_j) = \langle l_j, \varphi_j \rangle + \langle l_{j+1}, \varphi_j \rangle, \quad j = \overline{1, N-1},$$

$$c_N(q_{N-1}\varphi_{N-1} + q_N\varphi_N, \varphi_N) = \langle l_N, \varphi_N \rangle.$$

Запишемо отриману СЛАР в розгорнутому вигляді:

$$\begin{aligned} q_0 c_1(\varphi_0, \varphi_0) + q_1 c_1(\varphi_1, \varphi_0) &= \langle l_1, \varphi_0 \rangle, \\ q_0 c_1(\varphi_0, \varphi_1) + q_1 [c_1(\varphi_1, \varphi_1) + c_2(\varphi_1, \varphi_1)] + q_2 c_2(\varphi_2, \varphi_1) &= \langle l_1, \varphi_1 \rangle + \langle l_2, \varphi_1 \rangle \\ q_1 c_2(\varphi_1, \varphi_2) + q_2 [c_2(\varphi_2, \varphi_2) + c_3(\varphi_2, \varphi_2)] + \dots &= \langle l_2, \varphi_2 \rangle + \langle l_3, \varphi_2 \rangle, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots & \dots \\ q_{N-1} c_N(\varphi_{N-1}, \varphi_N) + q_N c_N(\varphi_N, \varphi_N) &= \langle l_N, \varphi_N \rangle. \end{aligned}$$

З вигляду глобальної системи рівнянь стає зрозумілим спосіб її утворення.

Алгоритм побудови глобальної СЛАР:

1. для i -го скінченного елемента ($i = \overline{1, N}$):

1.1 Вибрати дві базисні функції $\tilde{\varphi}_1^i(t) \equiv \varphi_{i-1}(t)$, $\tilde{\varphi}_2^i(t) \equiv \varphi_i(t)$, що не є тотожно рівними 0 на ньому (локальний базис; див. рисунок 1.3):

$$\tilde{\varphi}_1^i(t) = 1 - \frac{1}{h_i}(t - t_{i-1}), \quad \tilde{\varphi}_2^i(t) = \frac{1}{h_i}(t - t_{i-1}).$$

1.2 Аналогічно, як у методі Гальоркіна побудувати на основі вибраних базисних функцій локальну СЛАР $K^i U = F^i$ з такою матрицею і правою частиною:

$$K^i = \begin{pmatrix} c_i(\tilde{\varphi}_0, \tilde{\varphi}_0) & c_i(\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_0) \\ c_i(\tilde{\varphi}_0, \tilde{\varphi}_1) & c_i(\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_1) \end{pmatrix}, \quad F^i = \begin{pmatrix} \langle l_i, \tilde{\varphi}_0 \rangle \\ \langle l_i, \tilde{\varphi}_1 \rangle \end{pmatrix}.$$

2. На основі знайдених локальних матриць K^i та векторів F^i утворити глобальну СЛАР, як відзначено підкресленнями для перших елементів у наведеному вище розгорнутому записі глобальної системи (приклад з локальними матрицями 3x3 для квадратичних елементів – див. рисунок 1.4.).

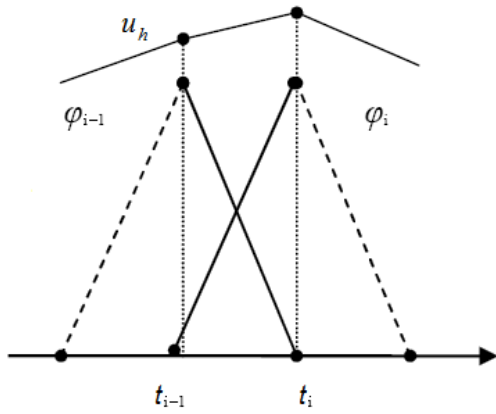


Рис.1.3.

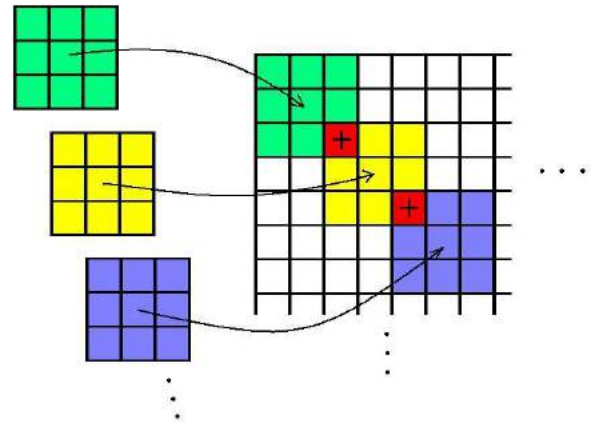


Рис.1.4.

Коли використовуються поліноміальні апроксимації вищих порядків, на кожному зі скінченних елементів отримуватимемо матриці, розмірність яких буде на одиницю більша від степеня апроксимуючого полінома (в одновимірному випадку). Схема утворення глобальної СЛАР залишається такою самою, як і у випадку лінійних апроксимацій, що описано вище. Приклад формування СЛАР із квадратичними апроксимаціями показано на рисунку 1.4.

1.6. Загальні властивості та апріорні оцінки похибок наближення МСЕ

Наведемо тут деякі загальні властивості апроксимації Гальоркіна, а також певні специфічні властивості, що притаманні поліноміальним апроксимаціям МСЕ. Для початку сформулюємо в абстрактній формі варіаційну задачу, отриману через дискретизацію за Гальоркіним задачі (1.24). Нехай задано простір кусково-поліноміальних функцій $V_h \subset V$. Наближення МСЕ будемо шукати як елемент $u_h \in V_h$. Отже дискретна варіаційна задача має вигляд:

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u_h \in V_h \subset V, \dim V_h < +\infty \text{ таку, що} \\ c_\Omega(u_h, v_h) = \langle l_\Omega, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V_h. \end{cases} \quad (1.43)$$

Теорема 1.2. [13, 27] (Про властивості методу Гальоркіна)

Нехай $u \in V$ та $u_h \in V_h$ є розв'язками задач (1.24) та (1.43) відповідно.

Справедливими є такі властивості:

(i) (ортогональність похибки):

$$c_\Omega(u - u_h, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h; \quad (1.44)$$

(ii) (лема Сеа):

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{M}{c_0} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_V, \quad (1.45)$$

де M та c_0 є константами обмеженості та V -еліптичності для c_Ω ;

(iii) (оптимальність похибки): якщо білінійна форма c_Ω є симетричною, то

$$\|u - u_h\|_{E,\Omega} = \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{E,\Omega}; \quad (1.46)$$

(iv) (теорема Піфагора): якщо білінійна форма c_Ω – симетрична, то

$$\|u - u_h\|_{E,\Omega}^2 = \|u\|_{E,\Omega}^2 - \|u_h\|_{E,\Omega}^2 \quad \forall h > 0. \quad (1.47)$$

Якщо в якості V_h використовуються простори кусково-поліноміальних апроксимацій довільного порядку V_{hp} , побудовані згідно методу скінченних елементів, то справджується наступна

Теорема 1.3. [48] (Про апроксимативність просторів кусково-поліноміальних функцій високих порядків)

Нехай простір апроксимацій МСЕ V_{hp} побудовано на рівномірній сітці з кроком h і однаковим степенем поліномів p на кожному зі скінченних елементів, тоді для кожного $v \in V$ існує $v_{hp} \in V_{hp}$ такий, що:

$$\|v - v_{hp}\|_{H^1(\Omega)} \leq C \frac{h^\chi}{p^{m-1}} \|v\|_{H^{m+1}(\Omega)}, \quad m \geq 1, \quad (1.48)$$

де $C = C(m) > 0$, $\chi = \min\{p, m-1\}$. Наведена оцінка є оптимальною.

Якщо ж сітка вузлів нерівномірна і степені поліномів на елементах змінні, то, при деяких додаткових припущеннях (щодо розташування приміжового шару), для кожного $v \in V$ можна побудувати таку сітку і вибрати степені поліномів у такий спосіб, що знайдеться елемент $v_{hp} \in V_{hp}$, для якого виконується оцінка:

$$\|v - v_{hp}\|_{H^1(\Omega)} \leq C_1 \exp\left[-C_2 \sqrt[3]{N_{dof}}\right], \quad (1.49)$$

де $C_1, C_2 = \text{const}$, $N_{dof} = \dim V_{hp}$.

Оцінки типу (1.49) є визначальними у зростаючій за останні десятиліття зацікавленості науковців hp -адаптивними схемами МСЕ.

1.7. Апостеріорні оцінювачі похибок (АОП) та їхні характеристики.

Варіаційна задача про похибку

Суттєвий недолік апріорних оцінок похибок, прикладами яких є оцінки (1.48) та (1.49) – наявність констант, значення яких практично завжди невідомі. Незважаючи на цей факт, апріорні оцінки дуже важливі з точки зору і теорії, і практики, оскільки дають змогу провести якісний аналіз характеристик збіжності методу, встановити швидкість та порядок збіжності, проаналізувати можливості щодо точності наближення невідомої функції елементами того чи іншого простору апроксимацій. Для реалізації ж конкретних алгоритмів методу скінченних елементів нам потрібно мати певний рецепт точної оцінки похибки. Ключем до віднайдення такого рецепту є використання при оцінці похибок вже знайденого наближення. Така ідея закономірна, оскільки, оцінюючи якість апроксимації, певна річ, можна припускати, що сама апроксимація містить в собі практично всю інформацію, яка потрібна для оцінки похибки. Вперше серйозне дослідження апостеріорних оцінювачів похибок (АОП) було висвітлено у працях таких вчених, як Babuška, Oden та Ainsworth [8].

Для найбільш загального співставлення й аналізу АОП, у [8] було введено такі важливі характеристики, як ефективність та надійність. Розглянемо їх детальніше.

Нехай знайдено наближення МСЕ u_h . Позначаючи точний розв'язок як u , похибка знайденого наближення становить $e = u - u_h$. Нехай задано деяку норму $\|\cdot\|$, в якій ми хочемо оцінити похибку e . Розглянемо апостеріорний оцінювач похибки $\eta = \eta(u_h) \geq 0$.

Оцінювач η називають *надійним*, якщо існує (відома) константа $k_R > 0$ така, що:

$$\|e\| \leq k_R \eta. \quad (1.50)$$

Оцінювач η називають *ефективним*, якщо існує константа $k_E > 0$ така, що:

$$\|e\| \geq k_E \eta. \quad (1.51)$$

Зміст умови (1.50) очевидний: якщо задано допустимий рівень похибки TOL , то величину $k_R \eta$ можна використовувати для контролю точності апроксимації МСЕ, оскільки виконання умови $k_R \eta < TOL$ гарантуватиме, що точна похибка апроксимації не більша, ніж TOL : $\|e\| < TOL$.

Бачимо, що з (1.50) та (1.51) отримуємо

$$k_E \leq \frac{\|e\|}{\eta} \leq k_R. \quad (1.52)$$

Щодо умови (1.51), то важливим є близькість константи k_E до k_R , оскільки останній факт визначає «оперативність» зупинки алгоритму МСЕ при досягненні відповідної точності в процесі, наприклад, рівномірного згущення сітки. Отож, що коли сталі k_E та k_R «сильно» відрізняються за величиною, то це може призводити до великого значення різниці $k_R \eta - \|e\|$, і навіть після фактичного досягнення заданої точності $\|e\| < TOL$ алгоритм буде робити ще додаткові кроки згущення сітки доти, доки не буде виконана умова $k_R \eta < TOL$. Саме тому згадану властивість і називають ефективністю оцінювача.

Побудова схем МСЕ на рівномірних сітках із використання АОП як індикатора повної похибки апроксимації для багатьох реальних задач не має практичної цінності, оскільки у тому випадку, коли розв'язок задачі матиме складну структуру (наприклад, у разі сингулярно збурених задач ДКР), густина вузлів рівномірної сітки, на якій апроксимація могла б з гарантованою точністю відтворити цю складну структуру, має бути надто велика. Величина обчислювальних затрат, внаслідок великої розмірності СЛАР, отримуваних в процесі роботи алгоритму, робить такі схеми практично повністю незастосовними.

Природним вирішенням проблеми відтворення складної структури розв'язку є використання нерівномірних сіток, густіших у зонах області задачі, де локальна похибка апроксимації є більшою. Як наслідок, виникла проблема побудови АОП, що міг би давати оцінку похибки не на всій області Ω а, наприклад, на окремих скінченних елементах або ж взагалі на певних підобластях області Ω .

Часто розглядають поелементні оцінювачі (індикатори) η_K та відповідний глобальний оцінювач η , які пов'язані співвідношенням:

$$\eta^2 = \sum_K \eta_K^2. \quad (1.53)$$

Для локальних оцінювачів розглядають аналогічні характеристики: надійність та ефективність.

В одновимірному випадку найпростіший алгоритм адаптування сітки полягає у тому, щоб на кожній ітерації алгоритму ділити навпіл скінченні елементи \tilde{K} , індикатор похибки для яких є максимальним серед усіх елементів сітки:

$$\eta_{\tilde{K}} = \max_K \eta_K. \quad (1.54)$$

Для зупинки використовується індикатор η у спосіб, який описано вище.

До цього часу було описано певні абстрактні характеристики і поняття, що застосовні до АОП. На завершення цього пункту розглянемо задачу про похибку наближення до розв'язку варіаційної задачі (1.24) та покажемо, що цю задачу про похибку можна використовувати як основу для побудови АОП.

Нехай задано деяку апроксимацію $u_h \in V_h$ до розв'язку u задачі (1.24). Якщо розглянути похибку $e = u - u_h$, то, враховуючи лінійність форми c_Ω по кожному з аргументів та (1.24), можна записати

$$c_\Omega(e, v) = c_\Omega(u - u_h, v) = c_\Omega(u, v) - c_\Omega(u_h, v) = \langle l_\Omega, v \rangle - c_\Omega(u_h, v). \quad (1.55)$$

Враховуючи останнє співвідношення та ортогональність Гальоркіна, позначимо $V_h^\perp := \{v \in V \mid c_\Omega(v, w) = 0 \ \forall w \in V_h\}$. Сформулюємо *варіаційну задачу про похибку*:

$$\begin{cases} \text{знайти функцію похибки } e \in V_h^\perp \text{ таку, що} \\ c_\Omega(e, v) = \langle \rho_\Omega(u_h), v \rangle \quad \forall v \in V_h^\perp, \end{cases} \quad (1.56)$$

де

$$\langle \rho_\Omega(u_h), v \rangle := \langle l_\Omega, v \rangle - c_\Omega(u_h, v). \quad (1.57)$$

Функціонал $\rho_\Omega(u_h)$ називають *функціоналом джерел похибки* і він, по суті, є репрезентацією нев'язки вихідного диференціального рівняння.

Очевидно, якщо дані задачі (1.24) задовольняють умови теореми Лакса-Мільграма-Вишика, то задача (1.56) також буде коректно поставленою, причому виконуватиметься оцінка вигляду (1.35), яку для задачі (1.56) наведено нижче:

$$\|e\|_V \leq \frac{1}{c_0} \|\rho_\Omega(u_h)\|_* . \quad (1.58)$$

З (1.58) випливає, що величину $\|\rho_\Omega(u_h)\|_*$ можна трактувати як АОП з константою надійності $k_R = \frac{1}{c_0}$.

Варто зауважити, що для побудови локальних індикаторів задачу про похибку (1.56) розглядають також на окремому скінченному елементі, але із врахуванням певних додаткових крайових умов.

1.8. *h*-, *r*-, *p*-, *hp*- адаптивні схеми

У попередньому пункті було наведено деякі основні властивості апостеріорних оцінювачів та описано найпростішу стратегію адаптування. Наведена стратегія належить до класу *h*-адаптивних. Загалом, на цьому етапі розвитку МСЕ виділяють наступні типи адаптивних схем: *h*-, *r*-, *p*-, *hp*-адаптивні. У вступі було вже подано короткий анонс і тепер розглянемо детальніше кожен тип:

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). Цей клас схем є історично першим і найпоширенішим на цей час. Теорія і практика використання даних алгоритмів добре розроблена і вдосконалена. Саме ці схеми реалізують у різноманітних комерційних пакетах програм для фізичного моделювання. У багатовимірних задачах, на відміну від одновимірних, проблема згущення сітки на скінченному елементі не така тривіальна, і також може виникати, зокрема, потреба використання сіток із висячими вузлами. Форма скінченних елементів зазвичай прямокутна чи трикутна. Алгоритми побудови трикутних сіток детально висвітлено у [2]. Різні

АОП для h -адаптивних схем та аспекти їх програмної імплементації описано у [8];

r -адаптування: степені поліномів не змінюються. Перебудова сітки зі скінченних елементів досягається зміною положення вузлів. Зауважимо, що топологічна структура сітки в процесі роботи алгоритму не змінюється. 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. Таким чином, додавання нових вузлів є неминучим і ми відразу ж приходимо до h -адаптивних схем. Частково r -адаптивність можна використовувати у нестационарних задачах, де є можливість переміщати цілу множину вузлів згідно з напрямком протікання певного фізичного процесу [30];

p -адаптування: сітка елементів незмінна, змінюються лише степені апроксимуючих поліномів на вибраних скінченних елементах. Тут треба відзначити роботи Melenk-а [43 – 45]. У них показано, що коли вихідна сітка вузлів вибрана належно, а саме, в ній, завдяки локальному згущенню вузлів, виділено всі зони області, де структура розв'язку може бути складною (зокрема, всі кутові точки області), то рівномірне збільшення степеня поліноміальних функцій на всіх елементах приводить до експоненційної збіжності з апріорною оцінкою вигляду (1.49). Ключовою проблемою тут є побудова коректної сітки вузлів. Також слід зазначити, що результати Melenk-а застосовні загалом лише до задач із аналітичними даними (з накладанням додаткових умов на їх розвинення Тейлора) та розв'язками, що суттєво звужує можливості їх практичного використання;

hp -адаптування: комбінування поділу елементів (h -) та зміни степенів поліномів (p -) на вибраних елементах. Такий тип адаптування, зважаючи на попередні коментарі, щодо h - та p -адаптивних схем, потенційно дає можливість комбінувати переваги цих двох схем. На цей час немає загальної консолідованої теорії hp -адаптивних схем. Перші фундаментальні результати належать Babuška, Schwab [48]. У цих роботах було показано, що на належним

чином вибраній послідовності сіток з елементів високих порядків можна досягнути експоненційно швидкого спадання похибок. Ідеї універсальних і практичних алгоритмів належать Demkovicz та Šolín [20, 50]. На практиці, однак, алгоритми ще не набули значного поширення (зокрема, ще немає комерційних пакетів, які їх реалізують), оскільки вони складні у реалізації, а отримувани обчислювальні схеми потребують велику кількість обчислювальних ресурсів. Окрім цього, похибки отримуваних наближень не завжди збігаються експоненційно і монотонно на практиці. Зважаючи на потенційну перевагу *hp*-адаптивних схем, дослідження в цьому напрямку є актуальними і перспективними.

1.9. Огляд *hp*-адаптивних алгоритмів

У цьому пункті наведено деякі загальні ідеї, що використовуються при побудові *hp*-адаптивних схем. Насамперед, слід звернути увагу на ідейну різницю між найпоширенішими на практиці *h*-адаптивними алгоритмами та *hp*-адаптивними. При використанні *h*-адаптування навіть найпростіші схеми дають змогу відтворювати очікувані алгебраїчні порядки збіжності. З огляду на це можна стверджувати, що ключовим та центральним аспектом при побудові згаданих схем є апостеріорні оцінювачі похибок. Основа побудови хороших схем – це побудова надійних та ефективних оцінювачів, що точно відображають реальну похибку на довільній локальній області. *hp*-адаптивні схеми вимагають додатково побудови певного критерію вибору між локальним згущенням сітки та локальним підвищенням порядку апроксимації. Крім цього, у зв'язку з тим, що на практиці в *h*-адаптивних алгоритмах практично не використовуються поліноми порядку вище, ніж 3, виникає також задача конструювання спеціальних АОП, які придатні саме для апроксимацій високих порядків. Загальна схема алгоритму *hp*-адаптування в стандартний спосіб складається із послідовності ітерацій, на кожній з яких:

- 1) Розв'язується глобальна СЛАР МСЕ;
- 2) Перевіряється умова завершення вигляду $k_R \eta < TOL$ (див. попередній пункт);

- 3) На основі розподілу локальних (для прикладу, поелементних) індикаторів η_k , як і в h -адаптивних схемах, визначають ті скінченні елементи, які підлягають зміні;
- 4) Для кожного елемента, який вибрано на кроці 3, на основі певного критерію вибирають спосіб перебудови сітки. У випадку, якщо задача одновимірною, можна, для прикладу, розглядати лише два варіанти зміни скінченного елемента: поділ навпіл зі збереженням порядку на утворених дочірніх елементах та підвищення порядку на 1;
- 5) Перебудовується сітка.

Як бачимо, загальна схема мало чим відрізняється від h -адаптування. Реалізація кроку 4, що буде показано в цій роботі, не обмежується лише описаним випадком поділу і підвищенням порядку на 1. Отже, далі розглянемо декілька ідейних напрямів, які дають змогу будувати критерій вибору на кроці 4 описаного алгоритму.

Добре відомо, що для гладких розв'язків p -адаптивний МСЕ дає змогу отримати експоненційну збіжність [44], проте якщо розв'язок має особливості, то чиста p -адаптивність втрачає свою ефективність і неминуче виникає потреба у згущенні вузлів сітки в зонах особливостей, де спостерігаються примежеві чи внутрішні шари із великим значенням градієнта. Цей факт, зокрема, відображено в оцінці (1.48). Сказане нашою думкою, що при побудові критерію вибору між підвищенням порядку апроксимації та згущенням вузлів доцільно використовувати ті чи інші знання про локальну гладкість розв'язку.

Найпростіша стратегія – використання *априорних* знань про особливості розв'язку. До прикладу, відомо, що крайова задача для лінійного еліптичного рівняння в частинних похідних із гладкими коефіцієнтами та кусково-аналітичними даними граничних умов може мати особливості лише в кутових точках області або в точках порушення аналітичності крайових умов [45]. Враховуючи це, можна позначити точки межі області, де може бути особливість, і під час роботи алгоритму виконувати h -адаптування лише для скінченних елементів, які містять позначений вузол. На всіх інших елементах

при такому підході виконують p -адаптування. Таку стратегію запропоновано Ainsworth і Senior [9]. Загалом цю стратегію можна зробити більш гнучкою, надавши можливість досліднику самостійно задавати точки, в яких потенційно можлива «погана» поведінка розв'язку. Іншим шляхом вдосконалення є визначення дослідником апріорного локального порядку гладкості m_K для кожного скінченного елемента. Вважатимемо, що функція має порядок гладкості m , на множині S , якщо вона належить до простору $H^{m+1}(S)$. Вибраний для зміни елемент підлягає p -адаптуванню, якщо степінь апроксимації $p_K \leq m_K - 1$, і h -адаптуванню, якщо виконується протилежна нерівність (див. коефіцієнт μ у (1.48)). На практиці все ж добре мати певну апостеріорну оцінку гладкості розв'язку, оскільки остання дасть нам змогу побудувати повністю автоматизований процес адаптування.

Для побудови апостеріорної оцінки гладкості використаємо деякі нестрогі міркування на основі наведених апріорних оцінок. Припустимо, що нерівність (1.48) виконується локально, для кожного скінченного елемента, і розглядатимемо її як наближену рівність, приймаючи при цьому апроксимацію МСЕ як точний розв'язок. Нехай p_K – степінь скінченного елемента K , m_K – порядок гладкості (який ми хочемо наближено оцінити) точного розв'язку на цьому елементі, а $\eta_{K,q} = \|r\|_{H^1(K)}$ – індикатор похибки, що дає оцінку похибки часткової апроксимації до розв'язку степеня q на скінченному елементі K . Тут під частковою апроксимацією треба розуміти поліном s_q такий, що поточна апроксимація на елементі $u_h^K = s_q + r$. Маючи попередньо знайдені оцінки η_{K,p_K-1} та η_{K,p_K-2} , запишемо приблизну рівність:

$$\frac{\eta_{K,p_K-1}}{\eta_{K,p_K-2}} \approx \left(\frac{p_K - 1}{p_K - 2} \right)^{1-m_K}, \quad (1.59)$$

звідки прийдемо до такої наближеної оцінки

$$m_K \approx 1 - \frac{\ln(\eta_{K,p_K-1}/\eta_{K,p_K-2})}{\ln((p_K-1)/(p_K-2))}. \quad (1.60)$$

Як і в попередній стратегії, виконуємо підвищення порядку елемента, якщо $p_K \leq m_K - 1$ та h -адаптування в іншому випадку. Зауважимо, що ця стратегія застосовна для елемента порядку $p_K \geq 3$. Відповідно, якщо степінь елемента менший ніж 3, то виконується p -адаптування. Описану стратегію запропонували Süli, Schwab і Houston [53].

Ще один зі способів оцінки порядку гладкості розв'язку – оцінка швидкості спадання коефіцієнтів розвинення наближення за поліномами Лежандра. Добре відомо, що порядок спадання цих коефіцієнтів прямо пов'язаний із гладкістю розглядуваної функції. Такого плану стратегії розглядалися у роботах Mavriplis та Houston [37,42].

Варто зауважити, що схожу властивість має перетворення Фур'є: порядок спадання образу при цьому перетворенні на нескінченності співпадає з максимальним порядком похідних, які існують для розглядуваної функції. Цей факт робить потенційно можливим побудову стратегій на основі аналогічного використання класичного перетворення Фур'є (чи його дискретного аналога) для оцінки гладкості наближень МСЕ. Варто зазначити, що сьогодні в літературі немає стратегій такого типу, і цей факт відкриває нове поле для досліджень.

Babuška і Gui у [35] запропонували виконувати p -адаптування елемента, якщо

$$\frac{\eta_{K,p_K}}{\eta_{K,p_K-1}} \leq \theta \quad (1.61)$$

і h -адаптування в протилежному випадку. Тут θ – заданий параметр. Відношення індикаторів у (1.61) показує вагомість збільшення порядку від $p_K - 1$ до p_K .

Враховуючи зауваження про використання p -адаптування та результатів Melenk-а, які були подані у попередньому пункті, можна отримати алгоритм

адаптування, що загалом не вписується у ітераційну схему, про яку йшлося вище. Спершу виконується h -адаптування, щоб отримати деяку проміжну сітку, яка вже відображає структуру особливостей розв'язку, а потім виконується p -адаптування, для досягнення заданої точності. Обґрунтоване застосування такої стратегії можливе лише за умов аналітичності даних та розв'язку задачі.

Варто зазначити також, що проблему побудови нової сітки на кожній ітерації адаптування можна розглядати як загальну дискретну задачу оптимізації, яку можна формулювати у двох взаємозамінних формах:

- 1) мінімізувати кількість доданих степенів свободи за умови, що індикатор похибки не перевищує заданого допустимого рівня;
- 2) мінімізувати похибку при заданому обмеженні на кількість доданих степенів свободи;

Алгоритм перебудови сітки на кожній ітерації за допомогою розв'язування відповідної задачі оптимізації запропоновано Patra і Gupta у [46]. Розв'язувати отриману задачу оптимізації можна, зокрема, будь-якими відповідними відомими пакетами програм. Отримувана цілочислова задача нелінійного програмування є NP -повною і, як наслідок, не існує поліноміального алгоритму її розв'язування.

Найбільш універсальним типом стратегій адаптування є стратегії на основі контрольного розв'язку – reference solution. Запропоновані Demkowicz та Šolín [20, 50], вони можуть бути застосовані загалом до будь-яких типів крайових задач із різними типами рівнянь. Основна ідея – обчислення, поряд із поточним наближенням $u_{h,p}$, іншого наближення на сильно згущеній сітці. В одновимірному випадку обчислюють наближення на сітці вузлів, що рівномірно згущена удвічі (в центр кожного елемента доданий один вузол) та степені елементів на якій на 1 більші від відповідних степенів батьківських елементів. Обчислене наближення $u_{h/2,p+1}$ використовується для оцінки похибки. Глобальний оцінювач обчислюють у такий спосіб:

$$\eta = \|u_{h/2,p+1} - u_{h,p}\|_{H^1(\Omega)}. \quad (1.62)$$

Визначають набір способів перебудови окремого скінченного елемента K – $\{hp_i\}$ (наприклад, поділ навпіл і підвищення порядку) і розглядають локальну задачу оптимізації:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти спосіб перебудови елемента } K \text{ -- } hp_j \text{ такий, що} \\ \frac{\left| u_{h/2, p+1} - \Pi_{hp} u_{h/2, p+1} \right|_{H^1(K)}^2 - \left| u_{h/2, p+1} - \Pi_{hp_j} u_{h/2, p+1} \right|_{H^1(K)}^2}{N_{hp_j} - N_{hp}} \rightarrow \max, \end{array} \right. \quad (1.63)$$

де Π_{\cdot} – певний оператор проектування на відповідну сітку, індекси hp та hp_j вказують на поточний елемент K і, відповідно, локальну сітку з новоутворених елементів на ньому, N_{hp} та N_{hp_j} – кількості відповідних степенів свободи (для одновимірного випадку $N_{hp} = p_K + 1$), $|\cdot|_{H^1(0,L)}$ – напівнорма в просторі Соболева $H^1(0,L)$. Нову сітку отримуємо комбінуючи отримані способи перебудови для кожного елемента. Алгоритм на основі reference solution буде детальніше розглянуто в третьому розділі.

На завершення цього пункту треба скерувати читача до цікавих та неочікуваних результатів Vinev-а щодо побудови «субоптимальних» hp -сіток і відзначити їхній зв'язок із теоріями вейвлетів та оптимального кодування. Докладніше, див. [10, 11].

1.10. Висновки

В цьому розділі:

- 1) Проаналізовано фізичні основи сумісного математичного моделювання процесів дифузії, конвекції та реакції (ДКР) та наведено відповідну математичну модель у вигляді крайової задачі;
- 2) Проведено аналіз крайової задачі ДКР у термінах критеріїв подібності Пекле і Струхалія та виділено цікавий нам клас сингулярно збурених задач;
- 3) Побудовано варіаційне формулювання задачі ДКР та отримано умови його коректності з використанням теореми Лакса-Мільграма-Вишика;

- 4) Побудовано дискретизовану задачу методом Гальоркіна та для її розв'язування побудовано схему методу скінченних елементів (МСЕ);
- 5) Побудовано варіаційну задачу про похибку та її дискретизацію методом Гальоркіна;
- 6) У розділі детально описано класифікацію адаптивних алгоритмів (h -, r -, p -, hp -адаптивні схеми) та проведено огляд існуючих hp -адаптивних алгоритмів.

Підсумовуючи, варто зазначити, що розглядувані hp -адаптивні схеми на цей час є дещо «екзотичним» інструментом, оскільки немає сформованої єдиної теоретичної бази досліджень і, окрім цього, на практиці такі схеми часто не є універсальними і можуть не давати бажаних результатів. Зацікавлення ними і актуальність проведення таких досліджень спричинена потенційними можливостями використання hp -адаптування для конструювання дуже швидких алгоритмів.

РОЗДІЛ 2. АПОСТЕРІОРНІ ОЦІНЮВАЧІ ПОХИБОК ДЛЯ ЗАДАЧ ДИFUЗІЇ-КОНВЕКЦІЇ-РЕАКЦІЇ

У попередньому розділі було розглянуто поняття апостеріорного оцінювача похибки та наведено деякі базові його характеристики, а також вказано на роль АОП у побудові адаптивних схем. Цей розділ присвячено детальному розгляду і побудові АОП для задачі (1.18), які є застосовними, зокрема, до поліноміальних апроксимацій МСЕ високих порядків.

2.1. Типи АОП. Огляд

Приклад глобального АОП було подано формулою (1.58). Оцінювачі такого типу називають *явними*. Причина використання такого терміну полягає у тому, що правою частиною нерівності (1.58) задається конкретний вираз для обчислення оцінки похибки у певній нормі. Такого виду оцінювачі системно розглянуто у [8]. Основна перевага їх у відносній простоті програмної імплементації. Недоліком може бути те, що немає загального підходу до гнучкої зміни точності оцінювача. Щодо оцінювача (1.58) варто також зауважити, що безпосереднє наближене обчислення норми функціонала зводиться до розв'язування певної СЛАР, і ця операція, залежно від розмірності СЛАР, може бути також доволі затратною. Враховуючи це, можна спробувати провести додаткову оцінку зверху у (1.58) до норми функціонала джерел похибки $\|\rho_{\Omega}(u_h)\|_*$. Це типовий підхід і під час такої оцінки додатково виконують також певну декомпозицію глобального оцінювача на поелементні.

Ідея побудови *неявних* оцінювачів дає змогу уникнути описаних вище недоліків. Центральним елементом виступає тут варіаційна задача про похибку (1.56). Зауважимо, що ця задача є за структурою та складністю аналогічна до вихідної і відповідно для її наближеного розв'язування також можна застосувати МСЕ. Маючи наближення до точної функції похибки, можна легко знайти числові значення потрібних норм чи інших величин на його основі. Враховуючи відносну обчислювальну складність обчислення похибки описаним способом доцільно задекларувати наступні критерії, дотримуватись

яких є потрібно для того, щоб побудувати простий в обчисленні неявний оцінювач:

- 1) АОП має бути *локальним*, тобто обчислюватись на окремому скінченному елементі. Для досягнення цієї мети задачу (1.56) подають у вигляді аналогічного типу локальних підзадач. Варто зазначити, що існують також АОП, які будуються специфічно для обчислення оцінювача на певній області, що складається з декількох суміжних елементів (детальніше див. у [55]);
- 2) Якщо похибку відшукуємо у вигляді функції у певному просторі кусково-поліноміальних функцій, то простір для знаходження похибки має містити в собі простір апроксимацій основної задачі;
- 3) Також зазвичай вимагають, щоб обчислювальна складність знаходження всіх локальних оцінок похибки не перевищувала складність побудови глобальної СЛАР МСЕ для вихідної задачі [8,55].

Наведені вимоги природні і стосуються загалом всіх типів оцінювачів.

Ієрархічні оцінювачі отримують оцінку похибки, використовуючи апроксимації, знайдені на вкладених просторах. Для зменшення обчислювальних затрат, простір, в якому шукають наступну апроксимацію, подають у вигляді суми двох підпросторів: початкового, на якому знайдена вихідна апроксимація, та відповідного ортогонального доповнення. Враховуючи таку декомпозицію, потрібно знайти лише компоненту шуканої покращеної апроксимації з цього ортогонального доповнення. Також у цьому випадку використовують, як і в вищеописаних неявних оцінювачах, декомпозицію оцінювача на локальні складові.

Оцінювачі на основі усереднення градієнту дають змогу знайти оцінку до похибки, використовуючи градієнт від знайденої апроксимації. До прикладу, формула для обчислення глобального оцінювача η може мати такий вигляд:

$$\eta^2 = \int_{\Omega} |G[u_h] - \nabla u_h|^2 dx, \quad (2.1)$$

де $G[u_h]$ – неперервна інтерполяційна функція, що побудована по вузлах сітки скінченних елементів, значеннями в яких виступають середні значення градієнту на сусідніх елементах (∇u_h є розривною функцією). Детальніше див. [8, 55].

На завершення цього пункту зазначимо, що часто виникає потреба знаходження не розв’язку задачі, а лише певних величин, що обчислюються на його основі. Для задачі про міграцію домішок це може бути, наприклад, потік домішки через границю певної заданої області. Відповідно, немає потреби шукати похибку всієї апроксимації МСЕ, а доцільно будувати оцінки лише для похибки величини, яку шукають. Основи таких оцінок (errors in quantities of interest) детальніше описано у [15].

2.2. Явний оцінювач для *hp*-адаптивних апроксимацій

У цьому пункті для початку розглянуто побудову типового явного АОП для задачі (1.18). Далі побудовано новий АОП, що безпосередньо враховує інформацію про порядок використовуваного скінченного елемента. Останній в наступному розділі буде використано для побудови адаптивної схеми МСЕ.

Для зручності розглянемо задачу (1.18), проте з перепозначеними коефіцієнтами:

$$\begin{cases} \text{Знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ -(\mu u')' + \beta u' + \sigma u = f \quad \text{в } \Omega = (0, L), \\ (\mu u')|_{x=0} = \alpha [u(0) - \bar{u}_0], \\ -(\mu u')|_{x=L} = \gamma [u(L) - \bar{u}_L]. \end{cases} \quad (2.2)$$

Стандартним способом отримуємо варіаційне формулювання задачі (2.2):

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u \in V := H^1(\Omega) \text{ таку, що} \\ a(u, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in V, \end{cases} \quad (2.3)$$

де

$$\begin{aligned} a(u, v) := & \int_0^L [\mu u' v' + \beta u v + \sigma u v] dx \\ & + \alpha u(0)v(0) + \gamma u(L)v(L) \quad \forall u, v \in V, \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\langle l, v \rangle := \int_0^L f v \, dx + \alpha \bar{u}_0 v(0) + \gamma \bar{u}_L v(L) \quad \forall v \in V. \quad (2.5)$$

Відповідна дискретизована задача МСЕ має вигляд:

$$\begin{cases} \text{знайти елемент } u_h \in V_h \subset V, \dim V_h < +\infty \text{ такий, що} \\ a(u_h, v_h) = \langle l, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V_h, \end{cases} \quad (2.6)$$

де V_h є простором кусково-поліноміальних функцій, що побудований на сітці скінченних елементів $\mathfrak{T}_h = \{K_i\}_{i=1}^N$, $\bar{K}_i := [x_{i-1}, x_i]$, $h_i = h_{K_i} := \text{diam } K_i$, $h := \max_{1 \leq i \leq N} h_i$, з вузлами $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = L$.

При побудові явних оцінювачів часто основою виступає також, як і в неявних, задача про похибку (1.56). Нехай $V_h^\perp := \{v \in V \mid a(v, w) = 0 \quad \forall w \in V_h\}$. У термінах задачі (2.3) отримаємо таку задачу про похибку

$$\begin{cases} \text{знайти функцію похибки } e \in V_h^\perp \text{ таку, що} \\ a(e, v) = \langle \rho(u_h), v \rangle \quad \forall v \in V_h^\perp, \end{cases} \quad (2.7)$$

де $e = u - u_h$, а функціонал джерел похибки визначається в такий спосіб:

$$\langle \rho(u_h), v \rangle := \langle l, v \rangle - a(u_h, v). \quad (2.8)$$

Запишемо рівняння для похибки із (2.7) в розгорнутому вигляді:

$$\begin{aligned} a(e, v) = \langle l, v \rangle - a(u_h, v) = & \int_0^L [f v - \mu u_h' v' - \beta u_h' v - \sigma u_h v] \, dx + \\ & + v(0) \alpha [\bar{u}_0 - u_h(0)] + v(L) \gamma [\bar{u}_L - u_h(L)]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Виконуючи декомпозицію інтегралу у (2.9) на поелементні складові та інтегрування частинами, прийдемо до наступної рівності:

$$\begin{aligned} a(e, v) = \sum_{K \in \mathfrak{T}_K} \int_K [f + (\mu u_h')' - \beta u_h' - \sigma u_h] v \, dx - \sum_{k=1}^N v \mu u_h' \Big|_{x=x_{k-1}+0}^{x=x_k-0} \\ + v \alpha [\bar{u}_0 - u_h] \Big|_{x=x_0} + v \gamma [\bar{u}_L - u_h] \Big|_{x=x_N}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Перегрупувавши в останній рівності доданки у другій сумі, отримаємо:

$$\begin{aligned} a(e, v) = \sum_{K \in \mathfrak{T}_K} \int_K R[u_h] v \, dx + \sum_{k=1}^{N-1} [u_h'(x+0) - u_h'(x-0)] v \mu \Big|_{x=x_k} \\ + v \alpha [\bar{u}_0 - u_h] \Big|_{x=x_0} + v \gamma [\bar{u}_L - u_h] \Big|_{x=x_N}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

де

$$R[u_h] := f + (\mu u_h')' - \beta u_h' - \sigma u_h. \quad (2.12)$$

Використовуючи властивість ортогональності (1.44), маємо

$$a(e, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h. \quad (2.13)$$

Нехай $v_h := I_h v \in V_h$ є деяким інтерполянтом для v , побудованим на визначеній раніше системі вузлів $\{x_i\}_{i=0}^N$.

Враховуючи (2.13), отримуємо таке рівняння:

$$a(e, v) = a(e, v - I_h v) \quad \forall v \in V. \quad (2.14)$$

Тепер, беручи до уваги те, що $(v - I_h v)(x_i) = 0$, вибираючи v у рівності (2.11) як $v - I_h v$, приходимо до наступного фундаментального співвідношення:

$$a(e, v) = \sum_{K \in \mathfrak{T}} \int_K R[u_h](v - I_h v) dx \quad \forall v \in V. \quad (2.15)$$

Зокрема, у випадку $v := e$, з останнього співвідношення отримаємо

$$a(e, e) = \int_0^L R[u_h](e - I_h e) dx = \sum_{K \in \mathfrak{T}} \int_K R[u_h](e - I_h e) dx. \quad (2.16)$$

Використовуючи тепер різного роду оцінки зверху до правої частини нерівностей (2.15) та (2.16), можемо отримувати певні АОП.

Припустимо, що білінійна форма $a \in V$ -еліптичною з константою $\alpha > 0$:

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V. \quad (2.17)$$

Добре відомо, що оператор інтерполявання I_h можна вибрати в такий спосіб, що на кожному скінченному елементі виконуватиметься така оцінка [49]:

$$\|v - I_h v\|_{L^2(K)} \leq C h_K \|v\|_{H^1(K)} \quad \forall v \in H^1(K), \quad (2.18)$$

де $C > 0$ – деяка константа, $h_K = \text{diam}(K)$.

Використовуючи нерівність (2.17) та нерівність Коші-Буняковського-Шварца (КБШ) для простору $L^2(K)$ до (2.16), можемо записати:

$$\begin{aligned}
\|e\|_V^2 &\leq \frac{1}{\alpha} a(e, e) \\
&\leq \frac{1}{\alpha} \sum_{K \in \mathfrak{T}} \left| \int_K R[u_h](e - I_h e) \, dx \right| \\
&\leq \frac{1}{\alpha} \sum_{K \in \mathfrak{T}} \|R[u_h]\|_{L^2(K)} \|e - I_h e\|_{L^2(K)} \\
&\leq \frac{C}{\alpha} \sum_{K \in \mathfrak{T}} h_K \|R[u_h]\|_{L^2(K)} \|e\|_{H^1(K)} \\
&\leq \left\{ \begin{array}{l} \text{нерівність КБШ} \\ \text{для } \mathbb{R}^{\dim(V_h)} \end{array} \right\} \leq \frac{C}{\alpha} \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} h_K^2 \|R[u_h]\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|e\|_V.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Звідси отримуємо остаточною нерівність

$$\|e\|_V \leq \frac{C}{\alpha} \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} h_K^2 \|R[u_h]\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{2.20}$$

Отож, використовуючи стандартну техніку, ми отримали глобальний явний АОП

$$\eta := \frac{C}{\alpha} \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} h_K^2 \|R[u_h]\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} \frac{C^2}{\alpha^2} h_K^2 \|R[u_h]\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.21}$$

В останньому виразі природно виділити локальні складові η_K , які обчислюються лише на окремому скінченному елементі (див. подання (1.53)):

$$\eta_K := \frac{C}{\alpha} h_K \|R[u_h]\|_{L^2(K)}. \tag{2.22}$$

Отриману величину η_K , що задається формулою (2.22), можна розглядати як локальний АОП. Константу α у формулі (2.22) можна також оцінити (для конкретних оцінок див. теорему 1.1). Оцінку для C також можна провести, але у цій роботі ми її не розглядатимемо, оскільки для потреб адаптування будемо використовувати дещо інший оцінювач. Важливо зауважити, що отриманий локальний оцінювач загалом може не давати коректної оцінки для локальної похибки $\|e\|_{H^1(K)}$. Зокрема, це трапляється, коли задача сингулярно збурена і примежевий шар не врахований достатньо добре завдяки локальному згущенню

сітки. Незважаючи на це, типова практика полягає у використанні η_K у алгоритмах адаптування як індикатора локальної похибки наближення.

Оцінювач (2.22) є типовим і загальна схема, на основі якої він був отриманий, часто використовується також і для інших типів рівнянь та для задач більшої розмірності. Також така схема буде використана далі для побудови іншого АОП.

Варто зауважити, що у формулу (2.22) явно входить величина кроку сітки – розмір скінченного елемента. Априорні оцінки вигляду (1.48) наводять на думку про те, що при використанні апроксимацій високих порядків, для досягнення кращих оцінок, варто будувати АОП, які явно враховують порядок апроксимації. Далі буде розглянуто побудову такого оцінювача на основі узагальнення [22].

Позначимо $\omega_K(x) := (x_k - x)(x - x_{k-1})$.

Теорема 2.1. (про локальний інтерполянт)

Існує оператор інтерполювання $I_h : V \rightarrow V_h$ (побудований на сітці вузлів $\{x_i\}_{i=0}^N$) такий, що на кожному скінченному елементі $K = [x_{k-1}, x_k]$ виконуються такі нерівності $\forall v \in H^1(K)$:

$$\left\| \frac{v - I_h v}{\sqrt{\omega_K}} \right\|_{L^2(K)} \leq \frac{1}{\sqrt{p(p+1)}} \| (v - I_h v)' \|_{L^2(K)} \quad (2.23)$$

$$\| (I_h v)' \|_{L^2(K)} \leq \| v' \|_{L^2(K)} \quad (2.24)$$

де $p = \deg(I_h v)$.

Доведення. Див. [22]. \square

Теорема 2.2.

На кожному скінченному елементі $K = [x_{k-1}, x_k]$ $\forall v \in H^1(K)$ виконується така нерівність:

$$\left| \int_K R[u_h](v - I_h v) dx \right| \leq \frac{2}{\sqrt{p(p+1)}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \| v' \|_{L^2(K)}, \quad (2.25)$$

де I_h – оператор інтерполювання з попередньої теореми, $p = \deg(I_h v)$.

Доведення. Використовуючи попередню теорему та нерівність трикутника для норми, отримуємо:

$$\begin{aligned}
\left| \int_K R[u_h](v - I_h v) dx \right| &= \left| \int_K \sqrt{\omega_K} R[u_h] \frac{v - I_h v}{\sqrt{\omega_K}} dx \right| \\
&\leq \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \left\| \frac{v - I_h v}{\sqrt{\omega_K}} \right\|_{L^2(K)} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{p(p+1)}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \|(v - I_h v)\|_{L^2(K)} \\
&\leq \frac{2}{\sqrt{p(p+1)}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \|v\|_{L^2(K)}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

□

Тепер, подібно до (2.19), вибираючи як I_h оператор, про який ідеться у теоремі 2.1, отримуємо (зауважимо, що в умовах попередньої теореми, тут $p = p_K$ – степінь апроксимуючого полінома на елементі K):

$$\begin{aligned}
\|e\|_V^2 &\leq \frac{1}{\alpha} a(e, e) \\
&\leq \frac{1}{\alpha} \sum_{K \in \mathfrak{T}} \left| \int_K R[u_h](e - I_h e) dx \right| \\
&\leq \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \sum_{K \in \mathfrak{T}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \|e\|_{L^2(K)} \\
&\leq \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \sum_{K \in \mathfrak{T}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \|e\|_{H^1(K)} \\
&\leq \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|e\|_V.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Скоротивши однакові множники, прийдемо до оцінки:

$$\|e\|_V \leq \tilde{\eta} := \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{K \in \mathfrak{T}} \tilde{\eta}_K^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2.28}$$

де локальний індикатор визначається у такий спосіб

$$\tilde{\eta}_K = \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)}. \tag{2.29}$$

Порівняємо тепер індикатори $\tilde{\eta}_K$ (2.22) та η_K (2.29). Зауважимо, що

$\max_{x \in K} \omega_K(x) = \frac{h_K^2}{4}$. Тепер легко отримати таку низку нерівностей:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\eta}_K &= \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left\| \sqrt{\omega_K} R[u_h] \right\|_{L^2(K)} \\
 &= \frac{2}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left(\int_K \omega_K R^2[u_h] dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &\leq \frac{h_K}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \left(\int_K R^2[u_h] dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
 &= \frac{h_K}{\alpha \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \|R[u_h]\|_{L^2(K)} \\
 &= \frac{1}{C \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \eta_K,
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

де $C > 0$ – константа з (2.22).

Отже, отримали, що

$$\tilde{\eta}_K \leq \frac{1}{C \sqrt{p_K(p_K + 1)}} \eta_K. \tag{2.31}$$

Схожу нерівність отримуємо і для відповідних глобальних оцінювачів:

$$\tilde{\eta} \leq \frac{1}{C \sqrt{p_{\min}(p_{\min} + 1)}} \eta, \tag{2.32}$$

де $p_{\min} = \min_K p_K$.

Бачимо, що використання в явному вигляді інформації про порядок апроксимації дає змогу будувати точніші оцінки похибки для наближень високих порядків. Окрім того, з ефективності оцінювача η [8, 55], нерівностей (2.32) та (2.28) впливає ефективність та надійність побудованого оцінювача $\tilde{\eta}$. Оцінювач $\tilde{\eta}_K$ буде використовуватися для побудови критерію відбору елементів у одній із стратегій адаптування в розділі 3 цієї роботи.

Зауважимо, що явні оцінювачі дають фіксоване значення оцінки для похибки. В наступному пункті розглянуто інший тип оцінювачів – неявні АОП.

Вони дають змогу, через збільшення кількості обчислень, отримувати наближення до похибки довільної точності. Навіть більше, вони дають змогу знайти похибку у вигляді деякої функції, а не лише її числову оцінку. Для деяких задач, при побудові схем МСЕ, які описано у розділі 3, згадана гнучкість є необхідною.

2.3. Неявні оцінювачі типу Діріхле

Розглянемо задачу про похибку (2.7). Цю задачу, як і основну (2.3), можна розв'язувати за допомогою МСЕ. Відповідна дискретизована за Гальоркіним задача має такий вигляд:

$$\begin{cases} \text{знайти наближення до похибки } e_h \in E_h \subset V_h^\perp, \dim E_h < +\infty \text{ таке, що} \\ a(e_h, w_h) = \langle \rho(u_h), w_h \rangle \quad \forall w_h \in E_h. \end{cases} \quad (2.33)$$

Як глобальний оцінювач похибки можемо тепер використати величину $\eta = \|e_h\|_V$ (або, наприклад, $\eta = \|e_h\|_{E,\Omega}$, де $\|v\|_{E,\Omega} = \sqrt{a(v,v)}$ – енергетична норма задачі). Очевидно, що локальний індикатор похибки можна отримати через знаходження поелементно-визначених норм: $\eta_K = \|e_h\|_{H^1(K)}$.

На практиці, знаходити локальні індикатори, розв'язуючи задачі (2.33), надто затратно, оскільки складність розв'язування цієї задачі не є меншою, ніж складність розв'язування основної варіаційної задачі. Потрібно знайти аналог задачі про похибку, який дасть змогу знайти похибку на окремому скінченному елементі.

Розглянемо елемент $K = [x_{k-1}, x_k]$ та простір $H^1(K)$. Припустимо, що добутки $\mu e'$ та $\mu_h e'_h$ є неперервними в деякому околі границі ∂K скінченного елемента, тобто, очевидно, що

$$\mu e' \Big|_{[x_{k-1}, x_{k-1} + \delta]} \in H^1([x_{k-1}, x_{k-1} + \delta]), \quad \mu e' \Big|_{[x_k - \delta, x_k]} \in H^1([x_k - \delta, x_k]) \quad (2.34)$$

та

$$\mu_h e'_h \Big|_{[x_{k-1}, x_{k-1} + \delta]} \in H^1([x_{k-1}, x_{k-1} + \delta]), \quad \mu_h e'_h \Big|_{[x_k - \delta, x_k]} \in H^1([x_k - \delta, x_k]) \quad (2.35)$$

для деякого $\delta > 0$. Зафіксуємо довільну функцію $w \in H^1(\Omega)$ (з властивостей інтеграла Лебега очевидно отримуємо, що $w|_K \in H^1(K)$) та визначимо послідовність функцій $\varphi_n \in H^1(\Omega)$, $n \in \mathbb{N}$, причому $\varphi_n|_K \in H_0^1(K) = \{v \in H^1(K) \mid v|_{\partial K} = 0\}$, у такий спосіб:

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} nw\left(x_{k-1} + \frac{1}{n}\right)(x - x_{k-1}), & x \in \left[x_{k-1}, x_{k-1} + \frac{1}{n}\right], \\ w(x), & x \in \left(x_{k-1} + \frac{1}{n}, x_k - \frac{1}{n}\right), \\ nw\left(x_k - \frac{1}{n}\right)(x_k - x), & x \in \left[x_k - \frac{1}{n}, x_k\right], \\ 0, & x \in \Omega \setminus K. \end{cases} \quad (2.36)$$

Запишемо тепер варіаційне рівняння для похибки (2.7) у розгорнутій формі:

$$\begin{aligned} & \int_0^L [\mu e'v' + \beta e'v + \sigma ev] dx + \alpha u(0)v(0) + \gamma u(L)v(L) \\ &= \int_0^L [fv - \mu u'_h v' - \beta u'_h v - \sigma u_h v] dx \\ & \quad + v(0)\alpha[\bar{u}_0 - u_h(0)] + v(L)\gamma[\bar{u}_L - u_h(L)], \quad \forall v \in V. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Прийmemo $v = \varphi_n$ у (2.37). Отримаємо:

$$\int_K [\mu e' \varphi'_n + \beta e' \varphi_n + \sigma e \varphi_n] dx = \int_K [f \varphi_n - \mu u'_h \varphi'_n - \beta u'_h \varphi_n - \sigma u_h \varphi_n] dx. \quad (2.38)$$

Врахувавши тепер (2.36), останнє рівняння можна переписати так:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{k-1}+1/n}^{x_k-1/n} [\mu e'w' + \beta e'w + \sigma ew] dx + \int_{\substack{[x_{k-1}, x_{k-1}+1/n] \\ \cup [x_k-1/n, x_k]}} [\beta e' + \sigma e] \varphi_n dx + \\ & + nw(x_{k-1} + 1/n) \int_{x_{k-1}}^{x_{k-1}+1/n} \mu e' dx - nw(x_k - 1/n) \int_{x_k-1/n}^{x_k} \mu e' dx \\ &= \int_{x_{k-1}+1/n}^{x_k-1/n} [fw - \mu u'_h w' - \beta u'_h w - \sigma u_h w] dx + \int_{\substack{[x_{k-1}, x_{k-1}+1/n] \\ \cup [x_k-1/n, x_k]}} [f - \beta u'_h - \sigma u_h] \varphi_n dx + \\ & + nw(x_k - 1/n) \int_{x_k-1/n}^{x_k} \mu u'_h dx - nw(x_{k-1} + 1/n) \int_{x_{k-1}}^{x_{k-1}+1/n} \mu u'_h dx. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Беручи до уваги абсолютну неперервність інтеграла Лебега (у перших двох інтегралах з кожного боку рівності) та припущення (2.34)–(2.35) і теорему про середнє у всіх інших інтегралах, перейдемо у (2.39) до границі при $n \rightarrow \infty$. Отримаємо:

$$\begin{aligned} & \int_K [\mu e'w' + \beta e'w + \sigma ew] dx - \mu e'w \Big|_{x=x_{k-1}}^{x=x_k} \\ & = \int_K [fw - \mu u'_h w' - \beta u'_h w - \sigma u_h w] dx + \mu u'_h w \Big|_{x=x_{k-1}}^{x=x_k}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Врахувавши тепер, що $e = u - u_h$, скоротимо однакові доданки та після перегруповування отримаємо остаточне локальне рівняння для похибки на скінченному елементі K :

$$\int_K [\mu e'w' + \beta e'w + \sigma ew] dx = \int_K [fw - \mu u'_h w' - \beta u'_h w - \sigma u_h w] dx + \mu u'_h w \Big|_{x=x_{k-1}}^{x=x_k}. \quad (2.41)$$

Зауважимо, що в правій частині отриманого рівняння фігурує невідома величина u' . Припускаючи, що функція u має поточково визначену похідну, природно за апроксимацію останньої величини у вузлах сітки взяти усереднене значення похідної від знайденого наближення МСЕ. Отже приймемо

$$u'(x) \approx \langle u'_h \rangle(x) := \frac{1}{2} [u'_h(x-0) + u'_h(x+0)]. \quad (2.42)$$

Враховуючи довільність вибору функції $w \in H^1(K)$, отримали таку нескінченновимірну наближену локальну варіаційну задачу про похибку МСЕ на скінченному елементі $K = [x_{k-1}, x_k]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти наближення до похибки } e \in H^1(K) \text{ таке, що} \\ \int_K [\mu e'w' + \beta e'w + \sigma ew] dx \\ = \int_K [fw - \mu u'_h w' - \beta u'_h w - \sigma u_h w] dx + \mu \langle u'_h \rangle w \Big|_{x=x_{k-1}}^{x=x_k} \quad \forall w \in H^1(K). \end{array} \right. \quad (2.43)$$

Дискретизована за Гальоркіним локальна задача про похибку має вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти наближення до похибки } e_h \in E_h^K \subset H^1(K), \dim E_h^K < +\infty \text{ таке, що} \\ \int_K [\mu e_h' w_h' + \beta e_h' w_h + \sigma e_h w_h] dx \\ = \int_K [f w_h - \mu u_h' w_h' - \beta u_h' w_h - \sigma u_h w_h] dx + \mu \langle u_h' \rangle w_h \Big|_{x=x_{k-1}}^{x=x_k} \quad \forall w_h \in E_h^K. \end{array} \right. \quad (2.44)$$

Очевидно, що задачі про похибку (2.43) відповідає певна крайова задача Неймана. Загалом вона може не мати розв'язку [8]. На практиці часто розглядають задачу (2.43) (по суті відповідно і (2.44)) у якій замість $H^1(K)$ вибирають деякий вужчий підпростір.

Далі всі неявні оцінювачі ми будемо будувати на основі локальної задачі Діріхле, тобто, фактично, будемо припускати, що апроксимація є точною у вузлах сітки. В такому разі дискретизована задача про похибку на окремому скінченному елементі набуде вигляду:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти наближення до похибки} \\ e_h \in E_h^K \subset H_0^1(K), \dim E_h^K < +\infty \text{ таке, що} \\ a_K(e_h, w_h) = \langle l_K, w_h \rangle - a_K(u_h, w_h) \quad \forall w_h \in E_h^K, \end{array} \right. \quad (2.45)$$

де використано такі позначення:

$$a_K(u, v) := \int_K [\mu u' v' + \beta u' v + \sigma u v] dx \quad \forall u, v \in H_0^1(K), \quad (2.46)$$

$$\langle l_K, v \rangle := \int_K f v dx \quad \forall v \in H_0^1(K). \quad (2.47)$$

Припустивши достатню гладкість відповідних функцій, виконаємо інтегрування частинами у правій частині рівності (2.45) в доданку з $\mu u_h' w_h'$.

Отримаємо рівняння в іншій формі:

$$a_K(e_h, w_h) = \int_K R[u_h] w_h dx \quad \forall w_h \in E_h^K, \quad (2.48)$$

де $R[u_h]$ визначено згідно (2.12).

Зауважимо, що задачу Діріхле (2.45) можна було б отримати безпосередньо з (2.33) за допомогою специфічного вибору скінченновимірного підпростору E_h :

$$E_h = \bigoplus_{K \in \mathcal{T}_h} \tilde{E}_h^K, \quad (2.49)$$

де

$$\tilde{E}_h^K = \{v \in H^1(\Omega) \mid v|_K \in E_h^K \subset H_0^1(K), v|_{\Omega \setminus K} = 0, \dim E_h^K < +\infty\}. \quad (2.50)$$

Бачимо, що $\dim E_h = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \dim E_h^K$. При такому виборі задача (2.33) очевидно

розпадається на сукупність задач (2.45) для кожного скінченного елемента.

Також бачимо, що у випадку, коли $\dim E_h^K = 1$, безпосередньо можна отримати явні формули для обчислення АОП. Приклад спеціального одновимірного АОП буде побудовано у наступному пункті.

У наступному розділі ми будемо використовувати оцінювачі Діріхле із такими просторами апроксимацій для похибки:

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

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

де $X^p(S)$ є простором поліномів степеня p на множині S , p_K – степінь поліноміальної апроксимації на елементі K .

Зауважимо також, що локальна задача про похибку (2.43) будується на основі припущення про доволі точну апроксимацію дифузійного потоку задачі $-\mu u'$ за допомогою відповідного усередненого значення (2.42), отриманого на основі знайденого наближення МСЕ. Загалом, такий підхід може бути не надто точним. Модифікацію такого підходу із використанням фізичного змісту потоку між елементами коротко висвітлено у [8] (equilibrated residual method).

2.4. Оцінювач на основі фундаментального розв'язку

Розглянемо задачу (2.45) у якій $\dim E_h^K = 1$. Нехай ψ^K – базисна функція простору E_h^K . Тоді, очевидно, що функцію похибки на скінченному елементі знаходимо у вигляді $e_h = \lambda_K \psi^K$, де $\lambda_K \in \mathbb{R}$ можна знайти безпосередньо із рівняння задачі (2.45):

$$\lambda_K = \frac{\langle l_K, \psi^K \rangle - a_K(u_h, \psi^K)}{a_K(\psi^K, \psi^K)}. \quad (2.51)$$

Одновимірний простір апроксимації похибки цілком визначається заданням функції ψ^K . Вибір цієї функції також залежить від того, які апроксимації було використано для того, щоб знаходити наближення. Для лінійних апроксимацій можна використовувати, для прикладу, квадратичну нормовану бабл-функцію:

$$\psi^K(x) := \frac{4}{|K|^2} (x_k - x)(x - x_{k-1}) \quad (2.52)$$

Також можна використовувати неперервну функцію, подібну до функції Куранта, проте локалізовану повністю на одному скінченному елементі $K = [x_{k-1}, x_k]$:

$$\psi^K(x) = \begin{cases} 2 \frac{x - x_{k-1}}{h_k}, & x \in [x_{k-1}, (x_{k-1} + x_k) / 2], \\ 2 \frac{x_k - x}{h_k}, & x \in [(x_{k-1} + x_k) / 2, x_k], \end{cases} \quad (2.53)$$

де $h_k = |K|$.

Спробуємо тепер на основі нестрогих міркувань побудувати функцію $\psi^K \in C(K)$ за аналогією з (2.53), яка б враховувала структуру диференціального рівняння вихідної задачі.

Нехай $\psi^K(x_{k-1}) = \psi^K(x_k) = 0$ та $\psi^K((x_{k-1} + x_k) / 2) = 1$. Позначимо

$$\begin{aligned} T_1 &= [x_{k-1}, (x_{k-1} + x_k) / 2], \\ T_2 &= [(x_{k-1} + x_k) / 2, x_k]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

При достатньо малому діаметрі скінченного елемента диференціальне рівняння, що відповідає неперервній задачі про похибку, на кожному з проміжків можна наближено замінити на відповідне рівняння зі сталими коефіцієнтами:

$$-(\tilde{\mu}_i e_i)' + \tilde{\beta}_i e_i + \tilde{\sigma}_i e_i = 0, \quad (2.55)$$

де $\tilde{\mu}_i, \tilde{\beta}_i, \tilde{\sigma}_i$ – середні значення функцій μ, β, σ відповідно на проміжку T_i (можна загалом вибирати інші апроксимації нульового порядку). 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 рівняння (2.55) 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 функцію оцінювача в такий спосіб:

$$\psi^k(x) = \begin{cases} e_1(x), & x \in T_1, \\ e_2(x), & x \in T_2. \end{cases} \quad (2.56)$$

Зауважимо, що побудований в такий спосіб оцінювач доцільніше використовувати, коли розмір скінчених елементів є достатньо малим. Для знаходження фундаментальних розв'язків на кожному з проміжків потрібно розв'язати квадратне рівняння

$$-\tilde{\mu}_i \lambda^2 + \tilde{\beta}_i \lambda + \tilde{\sigma}_i = 0 \quad (2.57)$$

Для коренів λ_1, λ_2 маємо три випадки:

- 1) якщо $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}, \lambda_1 \neq \lambda_2$, то $\varphi_{i1}(t) = e^{\lambda_1 t}, \varphi_{i2}(t) = e^{\lambda_2 t}$
- 2) якщо $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}, \lambda_1 = \lambda_2$, то $\varphi_{i1}(t) = e^{\lambda_1 t}, \varphi_{i2}(t) = t e^{\lambda_1 t}$
- 3) якщо $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}, \lambda_1 = \alpha + \beta i, \lambda_2 = \alpha - \beta i$, то
 $\varphi_{i1}(t) = e^{\alpha t} \sin(\beta t), \varphi_{i2}(t) = e^{\alpha t} \cos(\beta t)$.

2.5. Оцінювач на основі reference solution

Розглянемо тепер останній тип оцінювача похибки (який вже було коротко анонсовано у попередньому розділі), що, вірогідно, претендує на позицію найбільш універсального АОП. Йдеться про оцінювач на основі контрольного розв'язку (reference solution).

Глобальний оцінювач обчислюється як певна відстань між поточним наближенням МСЕ $u_{h,p}$ та іншим наближенням (контрольним розв'язком), що знайдене на густішій сітці – $u_{h/2,p+1}$. Для прикладу, можемо обчислити оцінювач в такий спосіб:

$$\eta = \|u_{h/2,p+1} - u_{h,p}\|_{H^1(\Omega)}. \quad (2.58)$$

Контрольний розв'язок $u_{h/2,p+1}$ в одновимірному випадку обчислюватимемо як апроксимацію МСЕ на вдвічі густішій сітці та із збільшеними порядками

новоутворених дочірніх елементів на 1 в порівнянні з поточною сіткою (це і пояснює вибір позначення).

Локальну оцінку для похибки на скінченному елементі можна отримати з (2.58) :

$$\eta_K = \|u_{h/2,p+1} - u_{h,p}\|_{H^1(K)}. \quad (2.59)$$

У контексті алгоритмів hp -адаптування така оцінка не дає змоги гнучко обчислювати зміну локальної похибки при локальному згущенні елемента чи збільшенні його порядку, оскільки для (2.59) в такому разі потрібно буде перераховувати обидва наближення на всій сітці, що, ясна річ, суперечитиме вимогам пункту 2.1 цього розділу. Для вирішення цієї проблеми у [20, 50] запропоновано замість (2.58) використовувати величину:

$$\tilde{\eta}_\Omega = |u_{h/2,p+1} - \Pi_{hp}^\Omega u_{h/2,p+1}|_{H^1(\Omega)}, \quad (2.60)$$

де $|\bullet|_{H^1(\Omega)}$ – напівнорма в просторі Соболева $H^1(\Omega)$:

$$|u|_{H^1(\Omega)}^2 = \int_0^L (u')^2 dx, \quad (2.61)$$

Π – певний оператор проектування на відповідну сітку. Відповідний локальний індикатор природно визначити в аналогічний спосіб:

$$\tilde{\eta}_K = |u_{h/2,p+1} - \Pi_{hp}^K u_{h/2,p+1}|_{H^1(K)}, \quad (2.62)$$

Доведемо наступну теорему:

Теорема 2.3 (про декомпозицію АОП на основі контрольного розв'язку).

Розглянемо сітку скінченних елементів $\mathfrak{T}_h = \{(x_{i-1}, x_i)\}_{i=1}^N$, де $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = L$ і $\Omega = (0, L)$. Визначимо простір кусково-поліноміальних апроксимацій $X_{hp}(\Omega) = \{v \in C(\Omega) \mid v|_K \in X_{p_K}(K), K = (x_{i-1}, x_i), i = 1, \dots, N\}$, де $X_{p_K}(K)$ локальний простір апроксимацій на елементі K з порядком поліноміальної апроксимації p_K . На довільному інтервалі $D = (\alpha, \beta) \subset \Omega$

розглянемо оператор ортогональної проєкції $\Pi_{hp}^D : H^1(D) \rightarrow X_{hp}(D)$,
 $X_{hp}(D) = \{v \mid \exists u \in X_{h,p}(\Omega) : v = u|_D\}$, що визначений відносно напівнорми $|\bullet|_{H^1(D)}$.

Для довільної функції $u \in H^1(\Omega)$ виконується така рівність:

$$\left| u - \Pi_{h,p}^\Omega u \right|_{H^1(\Omega)}^2 = \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \left| u - \Pi_{h,p}^K u \right|_{H^1(K)}^2, \quad (2.63)$$

і, відповідно,

$$\tilde{\eta}_\Omega^2 = \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \tilde{\eta}_K^2, \quad (2.64)$$

Доведення. Для функції $u \in H^1(0, L)$ її проєкція $w_{hp} = \Pi_{hp} u$ визначається так:

$$\begin{cases} \text{знайти } w_{hp} \in X_{hp}(\Omega) \text{ таку, що} \\ w_{hp}(0) = u(0), w_{hp}(L) = u(L), \\ \left| u - w_{hp} \right|_{H^1(\Omega)} \leq \left| u - v_{hp} \right|_{H^1(\Omega)} \quad \forall v_{hp} \in X_{hp}(\Omega), \\ v_{hp}(0) = u(0), v_{hp}(L) = u(L). \end{cases} \quad (2.65)$$

Остання нерівність еквівалентна умові:

$$\left| u - w_{hp} \right|_{H^1(\Omega)} = \min_{\substack{v_{hp} \in X_{hp}(\Omega) \\ v_{hp}(0)=u(0), v_{hp}(L)=u(L)}} \left| u - v_{hp} \right|_{H^1(\Omega)}. \quad (2.66)$$

Безпосередньо з означення знайти $w_{hp} = \Pi_{hp} u$ важко. Перейдемо до іншої, еквівалентної, задачі. Для цього зафіксуємо довільну функцію $v \in X_{hp}(0, L)$, $v(0) = v(L) = 0$. Нехай $w_{hp} = \Pi_{hp} u$. Тоді $\forall \varepsilon \in \mathbb{R}$ можемо записати:

$$\left| w_{hp} + \varepsilon v - u \right|^2 = \int_0^L (w'_{hp} + \varepsilon v' - u')^2 dx = \left| w_{hp} - u \right|^2 + 2\varepsilon \int_0^L (w'_{hp} - u')v' dx + \varepsilon^2 \int_0^L |v'|^2 dx. \quad (2.67)$$

З останньої рівності очевидно, що остання умова з означення оператора Π еквівалентна умові:

$$\int_0^L (w'_{hp} - u')v' dx = 0, \quad \forall v \in X_{hp}(0, L), v(0) = v(L) = 0. \quad (2.68)$$

Тепер отримуємо еквівалентну задачу для знаходження проєкції:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } w_{hp} \in X_{hp}(\Omega) \text{ таку, що} \\ w_{hp}(0) = u(0), w_{hp}(L) = u(L) \\ \int_0^L (w'_{hp} - u')v' dx = 0, \quad \forall v \in X_{hp}(0, L), \\ v(0) = v(L) = 0. \end{array} \right. \quad (2.69)$$

Розглянемо тепер простір $X_{hp}(0, L)$. В ньому можна сконструювати базис за допомогою вибору локального базису Лобатто на кожному зі скінченних елементів [24]. Нехай отриманий базис складається із вузлових функцій Куранта ϕ_j та бабл-функцій ψ_i . Покажемо, що коли $u \in H^1(0, L)$, то $w_{hp} = \Pi_{hp} u$ є інтерполяційною функцією для u відносно системи вузлів $\mathfrak{T} = \{x_i\}_{i=0}^N$, тобто $w_{hp}(x_j) = u(x_j)$. Очевидно, що для граничних вузлів потрібне співвідношення виконується (це впливає із означення оператора проектування). Підставивши у рівність

$$\int_0^L (w'_{hp} - u')v' dx = 0 \quad (2.70)$$

як v функцію Куранта ϕ_j , що відповідає внутрішньому вузлу сітки, отримаємо:

$$\begin{aligned} \int_0^L w'_{hp} \phi'_j dx &= \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} w'_{hp} \phi'_j dx = \int_{x_{j-1}}^{x_j} w'_{hp} \phi'_j dx + \int_{x_j}^{x_{j+1}} w'_{hp} \phi'_j dx = \frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1}}^{x_j} w'_{hp} dx - \frac{1}{h_{j+1}} \int_{x_j}^{x_{j+1}} w'_{hp} dx = \\ &= \frac{1}{h_j} w_{hp} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} - \frac{1}{h_{j+1}} w_{hp} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} = \\ &= -\frac{1}{h_j} w_{hp}(x_{j-1}) + \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right) w_{hp}(x_j) - \frac{1}{h_{j+1}} w_{hp}(x_{j+1}) = \int_0^L u' \phi'_j dx. \end{aligned}$$

Отже для знаходження значень $w_{hp}(x_j)$ отримали (врахувавши значення у граничних вузлах) СЛАР. Зауважимо, що інші рівняння, отримувані з (2.70) за допомогою підстановки базисних бабл-функцій, не міститимуть вузлових значень $w_{hp}(x_j)$ і тому в отриману СЛАР їх можна не долучати. Розглянемо довільну бабл-функцію ψ_i таку, що її носій повністю міститься в межах одного скінченного елемента. Навіть більше, $\text{supp}(\psi_i) = \tilde{K} = [x_{j-1}, x_j]$, де \tilde{K} є деяким

елементом, для якого ψ_i є локальною базисною бабл-функцією. Для звуження w_{hp} на елемент \tilde{K} отримаємо:

$$w_{hp}|_{\tilde{K}} = w_{hp}(x_{j-1})\phi_{j-1} + w_{hp}(x_j)\phi_j + \sum_{\tilde{K}: \text{supp}(\psi_s)=\tilde{K}} q_s \psi_s \quad (2.71)$$

Підставляючи ψ_i у (2.70), отримаємо:

$$\begin{aligned} \int_0^L w'_{hp} \psi'_i dx &= \int_{\tilde{K}} w'_{hp} \psi'_i dx = \\ &= \int_{\tilde{K}} [w_{hp}(x_{j-1})\phi_{j-1} + w_{hp}(x_j)\phi_j + \sum_{\tilde{K}: \text{supp}(\psi_s)=\tilde{K}} q_s \psi_s]' \psi'_i dx = \\ &= \frac{1}{h_j} [w_{hp}(x_j) - w_{hp}(x_{j-1})] \underbrace{\int_{\tilde{K}} \psi'_i dx}_{=0} + \sum_{\tilde{K}: \text{supp}(\psi_s)=\tilde{K}} q_s \int_{\tilde{K}} \psi'_s \psi'_i dx = \quad (2.72) \\ &= \sum_{\tilde{K}: \text{supp}(\psi_s)=\tilde{K}} q_s \int_{\tilde{K}} \psi'_s \psi'_i dx = \\ &= \int_0^L u' \psi'_i dx. \end{aligned}$$

У (2.72) ми врахували, що при вибраному базисі Лобатто ψ'_i буде поліномом Лежандра, масштабованим на \tilde{K} , і, відповідно, ортогональним до константи:

$$\int_{\tilde{K}} \psi'_i dx = \int_{\tilde{K}} 1 \cdot \psi'_i dx = 0.$$

Аналогічно, провівши такі ж перетворення, як у попередньому випадку

для $\int_0^L u'v' dx$, отримаємо

$$-\frac{1}{h_j} u(x_{j-1}) + \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}} \right) u(x_j) - \frac{1}{h_{j+1}} u(x_{j+1}) = \int_0^L u' \phi'_j dx \quad (2.73)$$

Порівнюючи з попередніми співвідношеннями для $w_{hp}(x_j)$, бачимо, що значення $w_{hp}(x_j)$ і $u(x_j)$ знаходяться із однакових СЛАР, а отже вони співпадають.

Враховуючи доведену вище властивість, неважко побачити, що задача знаходження проєкції w_{hp} еквівалентна такій

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } w_{hp} \in X_{hp}(\Omega) \text{ таку, що} \\ w_{hp}(x_j) = u(x_j), \quad j = \overline{0, N} \\ \int_0^L (w'_{hp} - u')v' dx = 0, \quad \forall v \in X_{hp}(0, L), \\ v(x_j) = 0, \quad j = \overline{0, N}. \end{array} \right. \quad (2.74)$$

Врахувавши структуру простору $X_{hp}(\Omega)$, її можемо звести до знаходження проєкції $w_{hp} = \Pi_{hp}^K u$ на кожному елементі $K = (x_{j-1}, x_j)$, $j = 1, \dots, N$ окремо, тобто до еквівалентного розв'язування сукупності задач

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } w_{hp} \in X_{p_K}(K) \text{ таку, що} \\ w_{hp}(x_{j-1}) = u(x_{j-1}), \quad w_{hp}(x_j) = u(x_j) \\ \int_K (w'_{hp} - u')v' dx = 0, \quad \forall v \in X_{p_K}(K), \\ v(x_{j-1}) = v(x_j) = 0. \end{array} \right. \quad (2.75)$$

Кожну із задач отриманої послідовності легко безпосередньо звести до СЛАР, використавши стандартний підхід МСЕ.

З (2.74) та (2.75) отримуємо, що $(\Pi_{hp}^K u)(x) = (\Pi_{hp}^\Omega u)(x)$, $x \in K = (x_{i-1}, x_i)$, $i = 1, \dots, N$. Тепер легко отримати рівність (2.63):

$$\begin{aligned} |u - \Pi_{hp}^\Omega u|_{H^1(\Omega)}^2 &= \int_\Omega (u - \Pi_{hp}^\Omega w)^2 dx = \\ &= \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \int_K (u - \Pi_{hp}^\Omega u)^2 dx = \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} \int_K (u - \Pi_{hp}^K u)^2 dx = \\ &= \sum_{K \in \mathfrak{T}_h} |u - \Pi_{hp}^K u|_{H^1(K)}^2. \end{aligned}$$

Рівність (2.64) отримуємо з (2.63), приймаючи $u := u_{h/2, p+1}$. \square

Зауваження 1:

Знайшовши $w_{hp} = \Pi_{hp} u$, можемо обчислити оцінку похибки

$$|u - w_{hp}|_{H^1(x_{j-1}, x_j)}^2 = \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u' - w'_{hp})^2 dx \quad (2.76)$$

на кожному скінченному елементі, використовуючи, для прикладу, квадратурні формули Гаусса.

Зауваження 2:

Вищеописане обґрунтовує вибір в якості числової характеристики оцінювача похибки напівнорми $|\bullet|_{H^1(K)}$.

Зауваження 3:

Варто зауважити, що можливість локального обчислення індикаторів похибки (2.76) можна також отримати як наслідок більш загального твердження.

Теорема 2.4. (про апроксимацію МСЕ у вузлах сітки)

Нехай задано крайову задачу Діріхле в області $\Omega = (0, L)$ для лінійного диференціального рівняння другого порядку $Lu = f$ із достатньо гладкими даними. Методом Гальоркіна отримано (стандартно, із зведенням вихідної задачі до задачі з однорідними крайовими умовами) апроксимацію $u_h \in u_0 + V_h$, $u_0 \in H^1(\Omega)$, $V_h \subset H_0^1(\Omega)$, $\dim V_h < +\infty$. Якщо для функції Гріна $G(x, s)$ відповідної крайової задачі з однорідними крайовими умовами в точці $x_0 \in \Omega$ виконується:

$$G(x_0, \bullet) \in V_h, \quad (2.77)$$

то $u_h(x_0) = u(x_0)$.

Доведення. Виберемо функцію $u_0 \in H^1(\Omega)$, яка задовольняє крайові умови задачі. Вихідна задача зводиться до знаходження функції $\tilde{u} \in H_0^1(\Omega)$, що є розв'язком рівняння $L\tilde{u} = g$, де $g = f - Lu_0$. Апроксимацію розв'язку вихідної задачі шукатимемо у вигляді $u_h = u_0 + \tilde{u}_h$, де \tilde{u}_h є апроксимацією Гальоркіна задачі з однорідними крайовими умовами. Позначимо для скорочення $(u, v) = (u, v)_{L^2(\Omega)}$. Очевидно, що

$$(L\tilde{u}, v) = (g, v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (2.78)$$

Оскільки $\tilde{u} \in H_0^1(\Omega)$, то також

$$(L\tilde{u}_h, v_h) = (g, v_h), \forall v_h \in V_h. \quad (2.79)$$

З властивостей функції Гріна та вигляду рівняння задачі отримуємо, що

$$\tilde{u}(x) = (G(x, \bullet), g) = (L\tilde{u}, G(x, \bullet)). \quad (2.80)$$

Очевидно, що похибка $\tilde{e} = \tilde{u} - \tilde{u}_h \in H_0^1(\Omega)$ задовольняє також однорідні крайові умови Діріхле і є розв'язком рівняння $L\tilde{e} = g - L\tilde{u}_h$. Враховуючи те, що функція Гріна не залежить від правої частини рівняння, отримуємо за аналогією з (2.80):

$$\tilde{e}(x) = (L\tilde{e}, G(x, \bullet)). \quad (2.81)$$

Віднявши тепер рівності (2.78) та (2.79) отримуємо, по суті, умову ортогональності Гальоркіна:

$$(L\tilde{e}_h, v_h) = 0, \forall v_h \in V_h. \quad (2.82)$$

Порівнюючи (2.81) та (2.82), бачимо: якщо $G(x_0, \bullet) \in V_h$ для деякої точки $x_0 \in \Omega$, то $\tilde{e}(x_0) = 0$. Неважко тепер отримати твердження теореми: $(u - u_h)(x_0) = ((u - u_0) - (u_h - u_0))(x_0) = \tilde{e}(x_0) = 0$.

□

Розглянемо тепер задачу (2.69). Очевидно, що вона є дискретною задачею методу Гальоркіна для відповідної крайової задачі:

$$\begin{cases} \text{знайти } w \in C^2(\Omega) \text{ таку, що} \\ -w'' = q, \\ w(0) = u(0), \\ w(L) = u(L), \end{cases} \quad (2.83)$$

де $q = -u''$. Точним розв'язком останньої задачі є $w = u$. Знайдемо функцію Гріна відповідної однорідної задачі:

$$\begin{cases} \text{знайти } w \in C^2(\Omega) \text{ таку, що} \\ -w'' = q, \\ w(0) = w(L) = 0. \end{cases} \quad (2.84)$$

З означення функції Гріна отримуємо, що

$$\begin{cases} -G_{xx}''(x, s) = \delta(x - s), (x, s) \in \Omega^2 \\ G(0, s) = G(L, s) = 0, \end{cases} \quad (2.85)$$

де δ – δ -функція Дірака. Зафіксуємо довільну точку $s \in \Omega$. Розглянемо декомпозицію:

$$G(x, s) = \begin{cases} G_l(x, s), & x \leq s, \\ G_r(x, s), & x > s. \end{cases} \quad (2.86)$$

Проінтегруємо рівняння задачі (2.85) по $x \in [s - \varepsilon, s + \varepsilon]$, $\varepsilon > 0$. Отримаємо:

$$G'_x(s - \varepsilon, s) - G'_x(s + \varepsilon, s) = 1. \quad (2.87)$$

Перейшовши формально у (2.87) до границі при $\varepsilon \rightarrow 0$, отримуємо співвідношення, яке постулюється додатково при класичному означенні функції Гріна:

$$G'_x(s - 0, s) - G'_x(s + 0, s) = 1. \quad (2.88)$$

Беручи до уваги (2.86):

$$(G_l)_x'(s - 0, s) - (G_r)_x'(s + 0, s) = 1. \quad (2.89)$$

Окрім того, треба зазначити, що з неперервності функції Гріна отримуємо:

$$G_l(s, s) = G_r(s, s). \quad (2.90)$$

На додаток до останнього співвідношення, комбінуючи (2.85) і (2.86), отримаємо наступне:

$$\begin{cases} -(G_l)''_{xx}(x, s) = 0, & x < s, \\ -(G_r)''_{xx}(x, s) = 0, & x > s, \\ G_l(0, s) = G_r(L, s) = 0. \end{cases} \quad (2.91)$$

З перших двох рівнянь (2.91) можемо записати загальний вигляд шуканих функцій:

$$\begin{cases} G_l(x, s) = xA_l(s) + B_l(s), \\ G_r(x, s) = xA_r(s) + B_r(s). \end{cases} \quad (2.92)$$

Враховуючи співвідношення (2.89)–(2.92), отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} \text{знайти функції } A_l(s), B_l(s), A_r(s), B_r(s) \text{ такі, що} \\ B_l(s) = 0, \\ LA_r(s) + B_r(s) = 0, \\ sA_l(s) + B_l(s) = sA_r(s) + B_r(s), \\ A_l(s) - A_r(s) = 1. \end{cases} \quad (2.93)$$

Безпосередньо розв'язуючи отриману систему та враховуючи (2.92) і декомпозицію (2.86), отримуємо:

$$G(x, s) = \begin{cases} x \left(1 - \frac{s}{L}\right), & x \leq s, \\ s \left(1 - \frac{x}{L}\right), & x > s. \end{cases} \quad (2.94)$$

Бачимо, що формула (2.94) визначає кусково-лінійну функцію по x при кожному фіксованому s з розривом похідної у точці $x = s$. Враховуючи симетричність функції Гріна (яку, зокрема, бачимо в цьому конкретному прикладі), отримуємо, що і при кожному фіксованому x функція $G(x, s)$ буде кусково-лінійною по s з розривом похідної у точці $s = x$. Враховуючи тепер вигляд простору апроксимацій задачі (2.69), отримуємо виконання умови (2.77) теореми 2.4 у вузлах сітки x_i . Звідси одразу ж отримуємо можливість поелементного обчислення похибки за допомогою розв'язування задач (2.75). Графік функції $G(x, s)$ при фіксованому s зображено на рисунку 2.1.

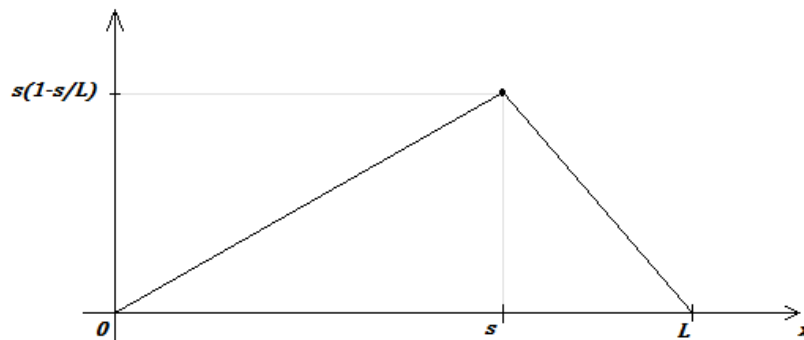


Рис.2.1. Графік $G(x, s)$ при фіксованому s .

2.6. Висновки

У цьому розділі:

- 1) Побудовано надійний та ефективний явний оцінювач на основі лишку, який безпосередньо враховує інформацію про порядок використовуваної апроксимації на скінченному елементі;
- 2) Побудовано спеціальні неявні оцінювачі Діріхле із використанням кусково-поліноміальних бабл-функцій, що дають змогу порівнювати похибки апроксимацій на сітках, локально згущених у різний спосіб;

- 3) Побудовано спеціальний АОП на основі фундаментального розв'язку;
- 4) Розглянуто оцінювач на основі *reference solution* та доведено можливість його ефективного обчислення за допомогою поелементної декомпозиції.

Оцінювачі, які побудовано у цьому розділі, будуть використовуватися далі для побудови схем *hp*-адаптування.

РОЗДІЛ 3. *HP*-АДАПТИВНІ СХЕМИ МЕТОДУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

У попередніх розділах сформовано інструментарій у вигляді певних АОП, що є основою для побудови схем адаптування. На початку цього розділу розглянуто коротко універсальний алгоритм на основі контрольного розв'язку, ключова властивість АОП, що використаний у ньому, обґрунтована у теоремах 2.3 та 2.4. Далі розроблено нову схему адаптування, що комбінує у спеціальний спосіб оцінювачі Діріхле з попереднього розділу для отримання критерію адаптування.

Відносно обидвох схем вивчено питання їх ефективної імплементації. Розглянуто алгоритм Голуба-Уелша для автоматизованого генерування квадратур Гаусса довільного порядку та імплементовано алгоритм, що комбінує його і *QL*-алгоритм із використанням зсувів. Описано спосіб ефективного обчислення значень базисних функцій та розв'язування СЛАР, що отримується при використанні поліноміальних апроксимацій довільних порядків.

3.1. Базовий алгоритм адаптування. Деякі зауваження

Згадані схеми адаптування практично повністю вписуються у структуру алгоритму з пункту 1.9 розділу 1. Для розв'язування глобальної СЛАР в одновимірному випадку доцільно використовувати метод прогонки, оскільки отримувана в результаті дискретизації Гальоркіна та конденсації внутрішніх параметрів (цю процедуру опишемо далі) матриця є тридіагональною. Глобальний оцінювач η у другій схемі будемо отримувати на основі локальних оцінювачів η_k . У схемі на основі reference solution при визначенні результуючого способу трансформації сітки на елементі використовуватиметься дещо ширший набір допустимих варіантів перебудов із збереженням сумарної кількості степенів свободи, що на 1 більша, ніж степінь поточного елемента. При поширенні цієї схеми на багатовимірний простір доцільно використовувати багатосіткові алгоритми для розв'язування СЛАР [14].

3.2. Алгоритм на основі reference solution

Ідею алгоритму, що буде описано далі, запропоновано у [20]. Ітерація алгоритму складається із двох основних частин:

Отримання контрольного розв'язку (*reference solution*). Під ним ми розуміємо розв'язок МСЕ на вдвічі згущеній сітці (стосовно заданої початкової), в якій на кожному новоутвореному елементі додатково збільшено степінь апроксимуючих поліномів на 1 порівняно із батьківським елементом (Рис. 3.1.).

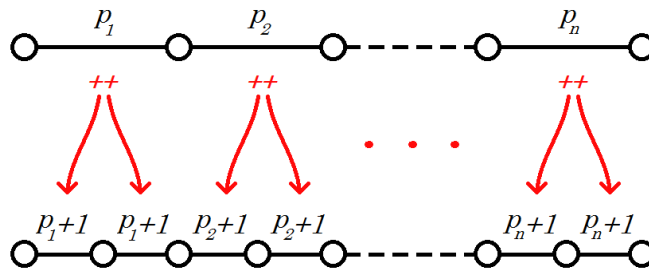


Рис. 3.1.

Введення достатньої кількості нових змінних призводить до того, що контрольний розв'язок містить в собі більше, порівняно з розв'язком на вихідній сітці, інформації про точний розв'язок і, відповідно, це вже дає змогу робити певний вибір відносно оптимальної перебудови сітки. Оцінку похибки проводять із використанням однойменного оцінювача (2.60) чи (2.62) для окремого елемента.

Вибір оптимальної сітки. 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 $h_{p_{opt}}$ зводиться до наступної задачі оптимізації: *знайти сітку $h_{p_{opt}}$, таку, що:*

$$\frac{\left| u - \Pi_{h_p} u \right|_{H^1(0,L)}^2 - \left| u - \Pi_{h_{p_{opt}}} u \right|_{H^1(0,L)}^2}{N_{h_{p_{opt}}} - N_{h_p}} \rightarrow \max. \quad (3.1)$$

Тут Π – оператор проектування (інтерполювання) на простір апроксимацій, заданий відповідною сіткою (визначений у підрозділі 2.5), N – кількість невідомих змінних на відповідній сітці.

Зауваження:

Далі, для зручності, опускатимемо нижній індекс в позначенні введеної напівнорми, розуміючи під $|\bullet|$ або $|\bullet|_{H^1(0,L)}$, або $|\bullet|_{H^1(K)}$, залежно від контексту (K – скінченний елемент).

Деталізуємо одну ітерацію алгоритму, тобто перехід від заданої сітки до наступної. Вона складається з таких кроків:

Крок 1: Побудова розв'язку на вихідній сітці u_{hp} та контрольного розв'язку $u_{h/2,p+1}$.

Крок 2: Обчислюємо відносну похибку розв'язку

$$\eta = \frac{|u_{h/2,p+1} - u_{hp}|}{|u_{h/2,p+1}|} \cdot 100\%. \quad (3.2)$$

Якщо похибка менша за допустимий рівень, то алгоритм припиняє роботу.

Крок 3: Для кожного скінченного елемента вихідної сітки: зробити вибір між збільшенням степеня апроксимуючих поліномів і поділом його навпіл та обчислити *показник ефективності*.

Розглядатимемо лише переконструювання одного скінченного елемента порядку p , які призводять до зростання кількості змінних на 1, а саме – збільшення порядку елемента на 1 (степеня апроксимуючого полінома) або поділи елемента навпіл на скінченні елементи із порядками p_1, p_2 такими, що $p_1 + p_2 = p + 1$. Отже для одного елемента маємо $p + 1$ варіантів перебудови. Для кожного із них обчислюємо *показник спадання похибки*

$$\frac{|u_{h/2,p+1} - w_{hp}|^2 - |u_{h/2,p+1} - w_{hp}^{new}|^2}{1}, \quad (3.3)$$

де w_{hp} , w_{hp}^{new} – відповідні проєкції на вихідний елемент та на відповідну сітку-результат переконструювання вихідного елемента. Серед обчислених показників вибираємо максимальний. Якщо він відповідає одному із варіантів поділу елемента, то в подальшому, якщо цей елемент буде вибрано для перебудови, його буде поділено на два, з встановленням відповідних степенів дочірніх елементів, в іншому ж випадку порядок апроксимації на цьому елементі буде збільшено на 1.

Далі обчислюємо *показник ефективності* β_K (*guaranteed rate* див. у [20] обґрунтування потреби в цьому). Для цього, починаючи із поділу елемента з найвищим *показником спадання похибки*, будуємо послідовність поділів, для кожного із яких обчислюємо складові похибки дочірніх елементів і збільшуємо порядок тих дочірніх елементів, похибка яких є більшою, ніж, наприклад, 70% від сумарної на елементі (рекомендовано вибирати число від 50% до 90%). Причому для кожного такого поділу на елементи з порядками p_1, p_2 обчислюємо величину

$$\mu_j = \frac{|u_{h/2, p+1} - w_{hp}|^2 - |u_{h/2, p+1} - w_{hp}^{(j)}|^2}{p_1 + p_2 - p}. \quad (3.4)$$

Тут $w_{hp}^{(j)}$ – відповідна проєкція. Побудову послідовності зупиняємо, коли $p_1 = p_2 = p + 1$. Тепер обчислюємо

$$\beta_K = \max_j \mu_j. \quad (3.5)$$

Описаний процес продемонстровано на рисунку 3.2.

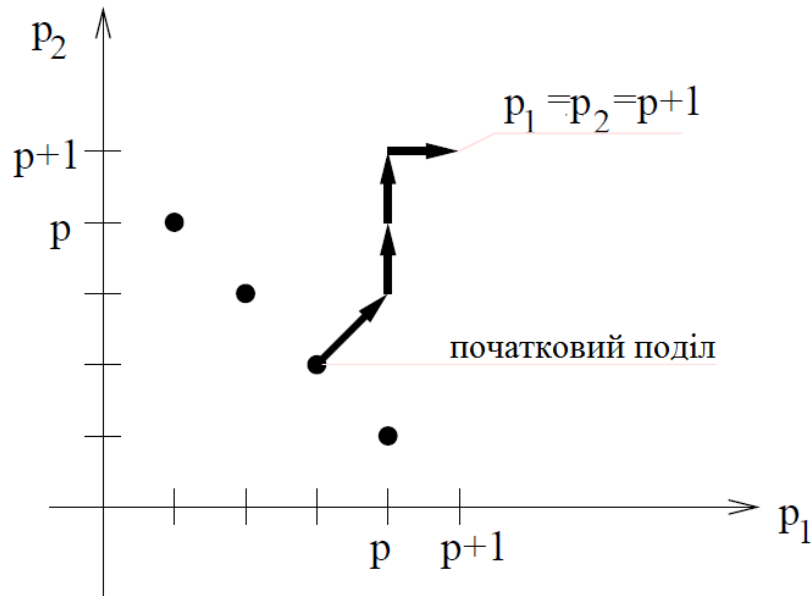


Рис. 3.2.

Крок 4: Перебудова вихідної сітки.

Обчислюємо максимальний показник ефективності на вихідній сітці

$$\beta_{\max} = \max_K \beta_K \quad (3.6)$$

Елемент K для якого $\beta_K > \frac{1}{3} \beta_{\max}$ перебудовуємо. Якщо на кроці 3 для нього вибір був зроблений на користь збільшення порядку і таке збільшення не призведе до перевищення максимального порядку заданого користувачем, то порядок елемента збільшується на 1. В іншому випадку виконується процедура, аналогічна, як на кроці 3 для визначення β_K , але тепер побудова послідовності припиняється у випадку, коли $\mu_j > \frac{1}{3} \beta_{\max} \geq \mu_{j+1}$, причому від'ємні μ_i ігноруються. В результаті виконання описаної процедури отримаємо порядки дочірніх елементів p_1, p_2 (які відповідають μ_j). Елемент K ділиться на два скінченні елементи із знайденими порядками p_1, p_2 .

Крок 5: Повернутись на Крок 1.**3.3. Алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки**

Центральною ідеєю розробленого алгоритму є використання неявного оцінювача похибки із різними просторами апроксимацій, для визначення

найкращого способу перебудови скінченних елементів. Алгоритм складається з наступних кроків:

Крок 1: Знайти розв'язок на поточній сітці – u_h (позначимо звуження отриманої апроксимації на скінченний елемент K як u_h^K).

Крок 2: Перевірка умови зупинки.

Для кожного елемента K обчислити оцінку похибки η_K , використовуючи явний оцінювач (2.29) (або оцінювач на основі фундаментального розв'язку, що описаний у розділі 2.4).

Нехай $\eta := \sqrt{\sum_K \eta_K^2}$, тоді, якщо $\frac{\eta}{\|u_h\|_{E,\Omega}} \times 100\% < TOL$, то робота алгоритму

припиняється (TOL – допустима відносна похибка), інакше:

Крок 3: Виділити елементи, що призначені для зміни.

Обчислити $\eta_{\max} = \max_K \eta_K$.

Зміні підлягатимуть ті елементи K , для яких $\eta_K > (1 - \theta)\eta_{\max}$, $\theta \in (0,1)$ – фіксоване число. Множину цих елементів позначимо A_θ .

Крок 4: Перебудова сітки.

Для кожного вибраного елемента $K = [x_{k-1}, x_k]$ ($p_K := \deg(u_h^K)$ – степінь апроксимуючого полінома на елементі K) вибрати між поділом навпіл та збільшенням степеня полінома на одиницю.

Якщо $p_K = p_{\max}$ (p_{\max} – максимальний порядок апроксимації, який визначив користувач), то елемент ділимо навпіл із порядками новоутворених елементів (p_K, p_K) , інакше:

Нехай $X^p(a,b)$ – простір поліномів степеня p на відрізку $[a,b]$.

Визначимо простори $V_{hp}^m(K), m = 1, 2$ у такий спосіб:

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

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

Для $m = 1, 2$ розв'язати наступні задачі Діріхле типу (2.45):

$$\begin{cases} \text{знайти } e_h^m \in V_{hp}^m(K) \text{ такий, що} \\ a_K(e_h^m, v_h) = \int_K R[u_h^K] v_h \, dx, \quad \forall v_h \in V_{hp}^m(K). \end{cases} \quad (3.7)$$

Обчислимо $r_m = \|e_h^m\|_{E,\Omega}$, $m=1,2$

(для наступних потреб введемо функцію e_h^K так: нехай число m_K таке, що

$$\|e_h^{m_K}\|_{E,\Omega} = \max_{m=1,2} \|e_h^m\|_{E,\Omega}, \text{ тоді } e_h^K(x) := \begin{cases} e_h^{m_K}(x), & x \in K \\ 0, & x \notin K \end{cases}.$$

Розглянемо величину $\Delta = r_2 - r_1$.

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

Крок 5: Повернутись на Крок 1.

Зауваження 1:

З теоретичної точки зору потрібно вибирати $\delta = 0$, проте на практиці, оскільки в обчисленнях є похибки квадратурних формул та заокруглення, а максимальний порядок апроксимуючого полінома – обмежений, то є сенс, у випадках, коли величина Δ близька до нуля, віддавати перевагу поділу елемента навпіл. Для цього достатньо задати деяке мале число $\delta > 0$.

Зауваження 2:

Ідею алгоритму вибору способу локальної зміни сітки, у випадку, коли задача симетрична, можна обґрунтувати використовуючи рівність $\|u - u_h\|_{E,\Omega}^2 = \|u\|_{E,\Omega}^2 - \|u_h\|_{E,\Omega}^2$, яку ми наводили без доведення у розділі 1.

Переконаємось, що вона виконується:

$$\begin{aligned}
\|u - u_h\|_{E,\Omega}^2 &= a(u - u_h, u - u_h) \\
&= a(u - u_h, u) \\
&= \|u\|_{E,\Omega}^2 - a(u_h, u) \\
&= \|u\|_{E,\Omega}^2 - a(u, u_h) \\
&= \|u\|_{E,\Omega}^2 - \langle l, u_h \rangle \\
&= \|u\|_{E,\Omega}^2 - \|u_h\|_{E,\Omega}^2.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Оскільки задача для похибки є задачею із тією самою білінійною формою, то для наближення до похибки e_h також виконується аналогічна рівність:

$$\|e - e_h\|_{E,\Omega}^2 = \|e\|_{E,\Omega}^2 - \|e_h\|_{E,\Omega}^2 \tag{3.9}$$

(неважко, зокрема, побачити, що при знаходженні похибки локально із використанням бабл-функцій як базисних на кожному елементі окремо ця рівність теж виконується).

З останньої рівності видно, що зі збільшенням енергетичної норми наближення до похибки, точність цього наближення зростає. На початку ітерації ми маємо розв'язок $u_h \in V_h$. Розглянемо похибку $e = u - u_h$. Рівність (3.9) можемо записати так:

$$\|u - (u_h + e_h)\|_{E,\Omega}^2 = \|u - u_h\|_{E,\Omega}^2 - \|e_h\|_{E,\Omega}^2. \tag{3.10}$$

Отже бачимо, що при збільшенні норми наближення до похибки зростає точність *уточненого розв'язку* $u_h + e_h$. Для побудови розв'язку на початку наступної ітерації ми будемо використовувати скінченновимірний підпростір $\tilde{V}_h = V_h + E_h \subset V$, де E_h – простір для наближеного знаходження похибки, побудований із використанням бабл-функцій, згідно алгоритму адаптування ($e_h \in E_h$). Оскільки ми розглядаємо випадок симетричної задачі, то:

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{E,\Omega} \leq \|u - \tilde{v}_h\|_{E,\Omega}, \quad \forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h, \tag{3.11}$$

де $\tilde{u}_h \in \tilde{V}_h$ – розв'язок на перебудованій сітці (початок наступної ітерації).

Справді:

$$\begin{aligned}
\|u - \tilde{u}_h\|_{E,\Omega}^2 &= a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{u}_h) \\
&= a(u - \tilde{u}_h, u) \\
&= a(u - \tilde{u}_h, u - \tilde{v}_h) \\
&\stackrel{КБШ}{\leq} \|u - \tilde{u}_h\|_{E,\Omega} \|u - \tilde{v}_h\|_{E,\Omega}, \quad \forall \tilde{v}_h \in \tilde{V}_h.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Поділивши на $\|u - \tilde{u}_h\|_{E,\Omega}$, отримаємо потрібне.

Врахувавши отриману нерівність та (7.3), оскільки $u_h + e_h \in \tilde{V}_h$, маємо:

$$\|u - \tilde{u}_h\|_E^2 \leq \|u - u_h\|_E^2 - \|e_h\|_E^2. \tag{3.13}$$

Виконуючи декомпозицію квадрату норми наближення до похибки на локальні складові, отримуємо остаточну нерівність, що гарантує її монотонне спадання:

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{E,\Omega}^2 \leq \|u - u_h\|_{E,\Omega}^2 - \sum_{K \in A_\vartheta} \|e_h^K\|_{E,\Omega}^2. \tag{3.14}$$

Ця нерівність природно приводить до використання такого способу локальної перебудови сітки, який дає змогу знайти наближення до похибки з максимальною нормою, оскільки в такому випадку похибка розв'язку на наступній ітерації буде гарантовано обмежена найменшою величиною у правій частині (3.14).

У випадку несиметричної задачі побудувати адекватний аналог рівності (3.14) на цей момент не вдалося. На практиці все-таки застосування описаного алгоритму до несиметричних задач також приводить до збіжних послідовностей наближених розв'язків. У підрозділі 3.5 ми розглянемо деякі потенційні способи зведення несиметричної задачі до еквівалентної симетричної, що своєю чергою може уможливити попереднє обґрунтування алгоритму і для випадку несиметричних задач.

3.3.1. Критерії адаптування

Для відбору елементів для зміни на кроці 3 алгоритму ми розглядатимемо наступні два критерії (перший з яких вже було використано в алгоритмі):

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

$$\eta_K > (1 - \theta)\eta_{\max}, \tag{3.15}$$

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

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

$$\frac{\sqrt{N} \eta_K}{\sqrt{\|u_h\|_{E,\Omega}^2 + \sum_{K'} \eta_{K'}^2}} \cdot 100\% > \varepsilon, \quad (3.16)$$

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

3.4. Оптимізація обчислювальних витрат

У цьому підрозділі детально висвітлено низку допоміжних задач, які потрібно ефективно вирішувати в контексті реалізації алгоритмів МСЕ із використанням поліноміальних апроксимацій високих порядків.

3.4.1. Розв'язування СЛАР. Конденсація внутрішніх параметрів

Детальніше розглянемо проблему розв'язування СЛАР в одновимірному випадку. Зауваження щодо просторів вищих розмірностей див. в кінці цього підрозділу.

У підрозділі 1.5 наведено алгоритм побудови глобальної СЛАР у випадку одновимірних лінійних елементів (оскільки лінійна комбінація лінійних базисних функцій елемента є поліномом 1-го степеня). В результаті роботи алгоритму отримується СЛАР із тридіагональною матрицею, для розв'язування якої можна застосувати ефективний метод прогонки [5]. Проте, якщо використовувати як базисні функції поліноми вищих порядків, то локальні матриці для кожного елемента будуть мати більшу розмірність, і це приведе до глобальної матриці з структурою, яку у випадку квадратичних поліномів було наведено на рисунку 1.4. Для ефективного розв'язування систем з такими матрицями в загальному випадку потрібно застосовувати алгоритми, що спеціально призначені для розріджених матриць [5]. Спеціальна структура матриці в нашому випадку дозволяє використати специфічний підхід – виконати *статичну конденсацію внутрішніх невідомих*. Ця процедура (дещо детальніше її описано в [51]) дає змогу отримати систему з тридіагональною

матрицею, при цьому ефективно опрацювавши лише ненульові елементи вихідної матриці.

Розглянемо скінченний елемент $K = [x_{k-1}, x_k]$ порядку p . На цьому скінченному елементі отримаємо простір апроксимацій розмірності $p+1$. Нехай $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_p$ – базис МСЕ у цьому просторі. Нумерацію базисних функцій виберемо в такий спосіб, щоб функції φ_0, φ_1 були вузловими функціями Куранта (відповідно для вузлів x_{k-1}, x_k), а інші базисні функції (бابل-функції) такі, що $\text{supp}(\varphi_i) = K, i = 2, \dots, p$. Отож, на елементі апроксимацію МСЕ можна подати у вигляді:

$$u_h(x) = u_0 \varphi_0(x) + u_1 \varphi_1(x) + \sum_{i=2}^p u_i \varphi_i(x) \quad (3.17)$$

Зауважимо, що невідомі коефіцієнти (степені свободи) u_i , розвинення (3.17) при $i \geq 2$, є локальними, тобто фігуруватимуть лише на цьому скінченному елементі, на відміну від u_0, u_1 , що також входять у апроксимації на сусідніх елементах. Завдяки цьому можна виконати звичайне виключення Гаусса для того, щоб спершу виключити локальні коефіцієнти, а потім знайти їх після розв'язування глобальної СЛАР на основі знайдених вузлових значень наближеного розв'язку. В блоковому вигляді локальну систему рівнянь на i -му елементі можна записати так:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} G \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

де A, B, C, D – матриці розмірностей $2 \times 2, 2 \times (p-1), (p-1) \times 2, (p-1) \times (p-1)$ відповідно, F_1, F_2 – вектори-стовпці висотою відповідно 2 та $p-1$,

$G = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} u_2 \\ \vdots \\ u_p \end{pmatrix}$ – вектори глобальних та локальних невідомих.

Локальну систему можна переписати так:

$$\begin{cases} AG + BL = F_1 \\ CG + DL = F_2. \end{cases} \quad (3.19)$$

Виразимо L з другого рівняння:

$$L = D^{-1}(F_2 - CG) \quad (3.20)$$

і підставимо у перше рівняння:

$$\underbrace{(A - BD^{-1}C)}_K G = \underbrace{F_1 - BD^{-1}F_2}_F. \quad (3.21)$$

Тепер очевидно, що цілком коректним буде застосування алгоритму побудови глобальної матриці, але з використанням отриманих в результаті конденсації 2×2 -матриць K і векторів F . У результаті отримаємо СЛАР із тридіагональною матрицею, яку можна розв'язати методом прогонки. Знайшовши таким чином вузлові значення наближеного розв'язку, зможемо знайти для кожного елемента його внутрішні невідомі. Порівняння такого алгоритму із деякими іншими подібними алгоритмами запропоновано у [51].

Варто зазначити, що наведений алгоритм виключення локальних степенів свободи треба розцінювати лише як метод розв'язування систем із розрідженими матрицями спеціальної структури. Незважаючи на суттєве зменшення розмірності результуючої глобальної СЛАР, нам доведеться додатково витратити обчислювальні ресурси на знаходження локальних невідомих на кожному скінченному елементі.

Також потрібно зауважити, що використання вищеописаного підходу дає змогу дуже легко виконувати значну частину обчислювальної роботи паралельно.

До багатовимірних задач алгоритм теж застосовний, проте результуюча матриця не буде тридіагональною. Зокрема також зазначимо, що у випадку використання алгоритму адаптування на основі *reference solution* у багатовимірному випадку доцільно використовувати багатосіткові методи для розв'язування СЛАР, у зв'язку із специфікою саме цього алгоритму адаптування, оскільки він використовує на кожному кроці два розв'язки: поточний і контрольний.

На рисунку 3.3 наочно показано перетворення глобальної матриці МСЕ порівняно із матрицею, що отримана класичним способом із локальних складових (локальні вузлові функції тут перша та остання на кожному елементі).

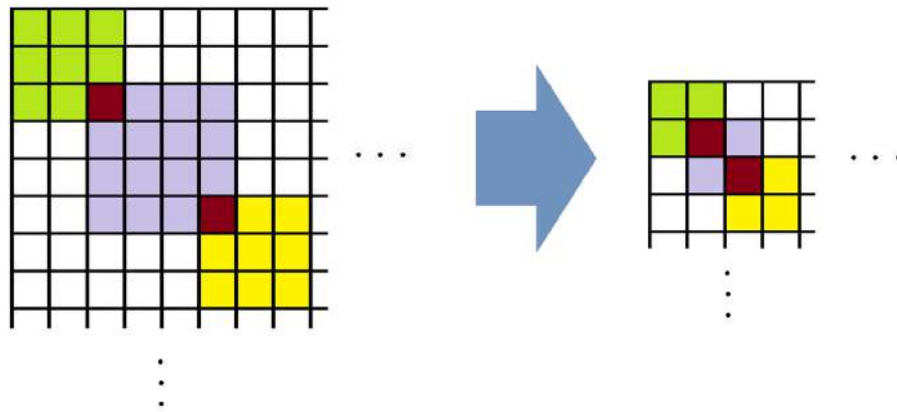


Рис. 3.3. Статична конденсація внутрішніх степенів свободи

3.4.2. Ефективне обчислення квадратурних формул

Для наближеного обчислення інтегралів використано квадратурні формули Гаусса. Такий вибір пов'язаний з тим, що ці формули забезпечують високу точність при малій кількості вузлів. Зокрема, вони дають змогу точно знайти значення інтегралу від полінома при найменшій кількості вузлів. Оскільки для потреб *hp*-адаптивних алгоритмів використовуються поліноми високих порядків і максимальний їх порядок задається користувачем програми, то задання вузлів і коефіцієнтів квадратури безпосередньо у кодї програми є неможливим. Виходячи з цього постає проблема обчислення вузлів і вагових коефіцієнтів цих формул програмним шляхом.

Для проведення таких обчислень використано алгоритм Голуба-Уелша [33]. Цей алгоритм зводить задачу знаходження вузлів і ваг квадратури до задачі на власні значення для певної тридіагональної матриці. Цілісне обґрунтування цього алгоритму і виведення всіх потрібних коефіцієнтів для цієї матриці, а також обчислення вагових коефіцієнтів зібрано у Додатку А.

Для кінцевого обчислення власних значень і векторів отриманої матриці в цій роботі було використано певною мірою модифікований *QR-алгоритм* [5]. Для тридіагональних симетричних матриць доведено його збіжність [5].

Оригінальний алгоритм збігається досить повільно (він є ітераційним). Для пришвидшення збіжності можна використати зсуви (див. [5]). В такому разі доведено, що алгоритм збігається із кубічною швидкістю. Є різні стратегії вибору зсувів. У цій роботі, в програмній реалізації, використано так звані зсуви за Уілкінсоном. Потрібно зауважити, що класичний алгоритм ґрунтується на *QR-факторизації* матриці (представлення у вигляді добутку ортогональної та верхньої трикутної матриць). Якщо проаналізувати алгоритм такої факторизації, то можна побачити, що обчислювальна похибка може бути сильно нерівномірно розподілена між елементами отримуваних матриць, і як наслідок, це відобразиться й на власних значеннях. Доцільніше використовувати просту реорганізацію *QR*-алгоритму – *QL-алгоритм* (саме ця версія алгоритму і була реалізована у програмі). Ідейно він не відрізняється від оригіналу, лише замість верхньої трикутної використовується нижня трикутна матриця, проте така проста перебудова дає змогу досягти більш рівномірного розподілу похибки в результаті обчислень.

3.4.3. Базисні функції та ефективне обчислення їх значень

При обчисленнях на скінченному елементі для певної уніфікації та узагальнень використання обчислювальних ресурсів доцільно окремий скінченний елемент $K = [x_{k-1}, x_k]$ масштабувати до певного віртуального базового (reference) елемента $\tilde{K} = [-1, 1]$, вводячи допоміжну змінну ξ за правилом: $x = x_{k-1/2} + \xi \cdot h_K / 2$, де $x_{k-1/2} = (x_{k-1} + x_k) / 2$, $h_K = x_k - x_{k-1}$. Якщо φ_i – i -а базисна функція на елементі K , то можемо розглядати *базисні функції у локальних координатах*: $\tilde{\varphi}_i(\xi) = \varphi_i(x_{k-1/2} + \xi \cdot h_K / 2)$. Тепер, для обчислень компонент матриць на скінченному елементі, можемо в інтегралах також, для прикладу, переходити до змінної ξ :

$$\begin{aligned}
\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi'_j \varphi'_i dx &= \frac{2}{h_k} \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}'_j \tilde{\varphi}'_i d\xi, \\
\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi'_j \varphi_i dx &= \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}'_j \tilde{\varphi}_i d\xi, \\
\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi_j \varphi_i dx &= \frac{h_k}{2} \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}_j \tilde{\varphi}_i d\xi, \\
\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi_i dx &= \frac{h_k}{2} \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}_i d\xi.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Водночас з переходом до локальних координат, ми будемо використовувати набір базисних функцій Лобатто, що покращує стійкість обчислень [50]. Інша причина використання такого набору функцій – менш затратне обчислення проєкцій у алгоритмі на основі reference solution. Проєкцію потрібно будувати або на одному скінченному елементі, або на двох, утворених в результаті поділу деякого елемента, причому таку побудову потрібно виконувати багатократно на кожному скінченному елементі. Це, загалом, досить ресурсомістка процедура, оскільки знаходження проєкції потребує розв'язування СЛАР. Якщо знаходити аналітично матрицю $A = \{a_{ij}\}$ системи для знаходження проєкції, то в локальних координатах неважко отримати таку формулу для обчислення її елементів:

$$a_{ij} = \int_{-1}^1 \tilde{\varphi}'_j \tilde{\varphi}'_i d\xi, \tag{3.23}$$

причому в матриці $A = \{a_{ij}\}$: $i, j = \overline{1, p}$ або $i, j = 0, 2, 3, \dots, p$. Тут $\tilde{\varphi}_j$ – j -та базисна функція у локальних координатах. $\tilde{\varphi}_0, \tilde{\varphi}_1$ – лінійні вузлові базисні функції, $\tilde{\varphi}_j, j \geq 2$ – бабл-функції ($\deg(\tilde{\varphi}_j) = j, j \geq 2$). Для того, щоб не розв'язувати СЛАР, базисні функції у локальних координатах можна вибрати так, щоб матриця A була діагональною.

Виходячи з потреби ефективного обчислення похибки, базис у локальних координатах будемо задавати в такий спосіб:

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_0(\xi) &= \frac{1}{2}(1 - \xi) \\
\tilde{\varphi}_1(\xi) &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \\
\tilde{\varphi}_n(\xi) &= \int_{-1}^{\xi} p_{n-1}(t) dt, \quad n = \overline{2, d}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

тут p_{n-1} – многочлен Лежандра (див. попередній підрозділ 3.4.2), d – максимальний степінь базисного многочлена. Бачимо, що $\tilde{\varphi}_n(-1) = \tilde{\varphi}_n(1) = 0$, $n = \overline{2, d}$, окрім того, матриця A , введена в попередньому пункті, при такому виборі базису буде діагональною. Отримані базисні функції (3.24) називають функціями Лобатто.

Обчислення значень базисних функцій $\tilde{\varphi}_n(\xi)$ з використанням комп'ютера безпосередньо за наведеною формулою є неефективним. Для виведення ефективнішої формули розглянемо тривіальну тотожність:

$$(x^2 - 1) \frac{d}{dx} [(x^2 - 1)^n] = 2nx(x^2 - 1)^n \tag{3.25}$$

Продиференціювавши її $n+1$ раз з використанням правила Лейбніца для диференціювання добутку та врахувавши, що

$$p_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \tag{3.26}$$

отримаємо відоме *рівняння Лежандра*

$$\frac{d}{dx} [(x^2 - 1) \frac{dp_n}{dx}] = n(n+1)p_n \tag{3.27}$$

Замість n підставивши $n-1$ та проінтегрувавши його на відрізку $[-1, \xi]$, прийдемо до альтернативного подання базисних бабл-функцій:

$$\tilde{\varphi}_n(\xi) = (\xi^2 - 1) \cdot \frac{1}{n(n-1)} \frac{dp_{n-1}}{d\xi}, \quad n = \overline{2, d}. \tag{3.28}$$

Тепер, використовуючи двокрокове рекурентне співвідношення для многочленів Лежандра (див. Додаток А.), можна побудувати [24] відповідні

рекурентні співвідношення для похідних від цих многочленів і на їх основі обчислювати значення функцій $\tilde{\varphi}_n, \tilde{\varphi}'_n$, $n = \overline{2, d}$.

3.4.4. Оцінка порядків збіжності

Доведено [20, 48], що у випадку, коли розв'язок крайової задачі має примежеві шари з великим градієнтом, можна побудувати послідовність hp -сіток, для якої відповідна послідовність норм похибок наближень методу скінченних елементів спадає експоненційно щодо $\sqrt{N_{dof}}$:

$$\|e_h^N\|_E \sim C e^{-\alpha \sqrt{N_{dof}}}, \quad N \rightarrow \infty, \quad (3.29)$$

де N_{dof} – кількість невідомих на N -ій ітерації.

Виконуючи логарифмування у (3.29), можемо переконатися, що у цьому випадку

$$-\alpha \sim \frac{\ln \|e_h^N\|_E}{\sqrt{N_{dof}}}, \quad N \rightarrow \infty. \quad (3.30)$$

Безпосередньо використовуючи наведену асимптотику, можемо наближено обчислити порядок $-\alpha$ для побудованого алгоритму адаптування:

$$-\alpha \approx \frac{\ln \eta}{\sqrt{N_{dof}}}. \quad (3.31)$$

Зауваження 1:

Варто зазначити, що за наближене значення величини $-\alpha$ слід вибирати праву частину останнього співвідношення, обчислену на одній із (останніх) ітерацій, для котрих спостерігається «стабілізація» обчислюваного відношення. Згадана «стабілізація» та від'ємне значення величини є показниками того, що алгоритм забезпечує експоненційну збіжність.

Зауваження 2:

Обчислювальні експерименти показали, що формула (3.31) малоприматна для обчислень. Це можна пояснити ігноруванням у (3.30) та відповідно у (3.31) доданку $\ln C / \sqrt{N_{dof}}$ (що є асимптотично еквівалентним нулю). У випадку, коли

експоненційна збіжність не досягається і якщо константа C – достатньо велика, то останнє відношення акумулюватиме велику похибку обчислення за формулою (3.31). Окрім цього, видно, що збурення з ростом кількості невідомих N_{dof} прямує до нуля дуже повільно. На практиці це проявляється на графіку величини $\ln \eta / \sqrt{N_{dof}}$ залежно від кількості невідомих, а саме, спочатку простежується «оманлива» стабілізація величини, що може навести на думку про експоненційну збіжність, і лише при дуже густих сітках можна помітити, що величина повільно зростає (і теоретично прямує до нуля; див. далі):

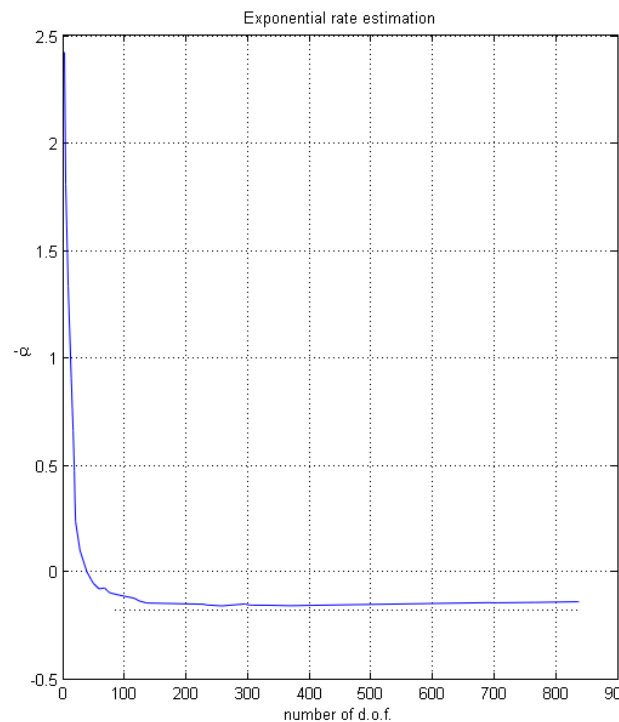


Рис. 3.4.

Щоб переконатись, що у прикладі з графіком, який наведено на рисунку 3.4, насправді немає експоненційної збіжності, можна скористатися іншим методом оцінки порядку збіжності, в якому невідома константа C явно виключається із отримуваних співвідношень. Це буде описано далі.

Також зауважимо, що наявність примежевого шару є суттєвою умовою для виконання (3.29). У випадку, коли в околі межі області функція є аналітичною, можлива швидкість спадання послідовності норм похибок визначається співвідношенням [20]:

$$\|e_h^N\|_E \sim C e^{-\alpha N_{dof}^\beta}, \quad N \rightarrow \infty, \quad (3.32)$$

де $\beta > \frac{1}{2}$.

Алгебраїчний порядок збіжності

Якщо степінь використовуваних поліномів фіксований, то гарантувати експоненційну збіжність не можна. У такому випадку говорять про збіжність деякого алгебраїчного порядку $p > 0$, тобто виконується співвідношення:

$$\|e_h^N\|_E \sim C N_{dof}^{-p}, \quad N \rightarrow \infty. \quad (3.33)$$

Аналогічно, як і у випадку експоненційної збіжності, отримуємо:

$$-p \sim \frac{\ln \|e_h^N\|_E}{\ln N_{dof}}, \quad N \rightarrow \infty. \quad (3.34)$$

Або наближено:

$$-p \approx \frac{\ln \eta}{\ln N_{dof}}. \quad (3.35)$$

Зауваження 3:

Якщо збіжність є експоненційною, то $-p \sim -\infty$, $N \rightarrow \infty$. Якщо маємо збіжність порядку p , то $-\alpha \sim 0$, $N \rightarrow \infty$. Легко бачити, що експоненційна збіжність швидша, ніж збіжність із будь-яким порядком p .

Зауваження 4:

Як і у випадку експоненційної збіжності, формула (3.35) теж не має практичної цінності.

Зауваження 5:

На практиці можна оцінити алгебраїчний порядок збіжності або констатувати факт наявності експоненційної збіжності (без оцінки порядку). В останньому випадку формально $p = +\infty$.

На підставі останнього зауваження розглянемо оцінку лише алгебраїчного порядку збіжності (повністю аналогічно можна оцінити порядок $-\alpha$).

З (3.33) легко отримуємо:

$$\ln \|e_h^N\|_E \sim -p \ln N_{dof} + \ln C, \quad N \rightarrow \infty. \quad (3.36)$$

Або наближено, при великих N :

$$\ln \|e_h^N\|_E \approx -p \ln N_{dof} + \ln C. \quad (3.37)$$

Отже наближено, при густих сітках, отримуємо лінійну залежність величини $\ln \|e_h^N\|_E$ від $\ln N_{dof}$ (з кутовим коефіцієнтом $-p$). Оцінку для порядку збіжності можна отримати, візуально аналізуючи графік похибки в логарифмічних осях координат або ж використавши інформацію із двох послідовних ітерацій, обчислити відповідне наближення. Для цього потрібно відняти два рівняння (3.37), що записані для цих ітерацій (при цьому доданок $\ln C$ виключається) та виразити з отримуваного співвідношення, наприклад, кутовий коефіцієнт $-p$:

$$-p \approx \frac{\ln \|e_h^{N^{(2)}}\|_E - \ln \|e_h^{N^{(1)}}\|_E}{\ln N_{dof}^{(2)} - \ln N_{dof}^{(1)}}. \quad (3.38)$$

З використанням явних оцінювачів для побудованого алгоритму можна записати:

$$-p \approx \frac{\ln \eta^{(2)} - \ln \eta^{(1)}}{\ln N_{dof}^{(2)} - \ln N_{dof}^{(1)}}. \quad (3.39)$$

Верхні індекси у формулах (3.38) і (3.39) вказують на віднесення відповідної величини до однієї із двох послідовних ітерацій. На рисунку 3.5 для задачі, для якої побудовано графік з рисунку 3.4, наведено графіки оцінювача похибки в логарифмічних осях та величини $-p$, обчисленої згідно (3.39).

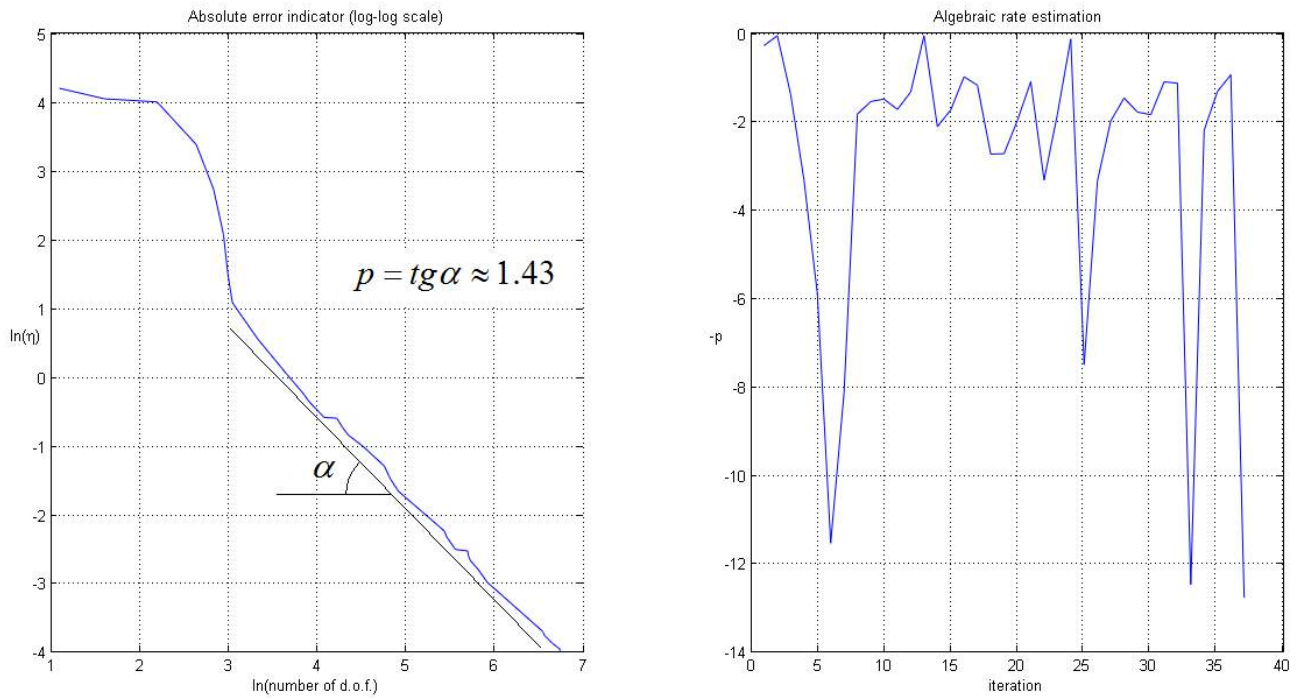


Рис. 3.5. – Візуальна оцінка порядку збіжності та графік поведінки величини

$$\frac{\ln \eta^{(2)} - \ln \eta^{(1)}}{\ln N_{dof}^{(2)} - \ln N_{dof}^{(1)}}$$

Чітко видно, що у цьому випадку алгоритм забезпечує алгебраїчний порядок збіжності. Правий графік на рисунку 3.5 показує, що безпосереднє застосування формули (3.39) дає результат, який важко проаналізувати, на відміну від візуального аналізу поведінки похибки. Це легко пояснити тим, що формула у (3.39) дає наближене значення кутового коефіцієнта до графіка похибки на рисунку 3.5 у фіксованій точці (яке може сильно змінюватися і не відображати адекватно порядок збіжності), а візуальний аналіз дає змогу визначити деяке усереднене його значення. Описане вище наводить на думку про використання певного усереднення при обчисленнях за формулою (3.39).

Нехай p_i – наближення до порядку, обчисленого на i -ій ітерації. Введемо вагові коефіцієнти $w_i := \ln N_{dof}^{(i)} - \ln N_{dof}^{(i-1)}$ (тут $i = 2, 3, \dots$; $N_{dof}^{(i)}$ – кількість невідомих на i -ій ітерації). Тепер можна знайти наближення до p , обчисливши зважене середнє арифметичне:

$$p \approx \frac{\sum_i p_i w_i}{\sum_i w_i}. \quad (3.40)$$

Для розглядуваної задачі отримаємо $p \approx 1,45$. Отримане значення дає доволі адекватну оцінку для порядку збіжності (див. лівий графік на рисунку 3.5).

Зауваження:

Використання у формулі (3.40) специфічних вагових коефіцієнтів w_i зумовлене потребою надання більшого впливу на результуюче значення порядку тій величині p_i , котра визначає кутовий коефіцієнт графіка похибки в логарифмічних осях на більшому проміжку на координатній осі $\ln N_{dof}$.

3.5. Задача симетризації білінійної форми

У контексті проблеми обґрунтування та застосовності алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки, описаного у підрозділі 3.3, логічним є питання можливості зведення вихідної крайової чи варіаційної задачі до симетричної форми. Тут побудовано два способи отримання симетричних задач. Варто зазначити, що задача, як з'ясувалося, дуже складна з обчислювальної точки зору, і, як наслідок, подані способи мають лише теоретичну цінність та можуть бути використані як можливі відправні точки до побудови практичних алгоритмів.

Перший спосіб полягає у перетворенні рівняння в такий спосіб, щоб явно виключити доданок із першою похідною. Для цього розглянемо допоміжну функцію

$$z(x) = \exp \left\{ - \int_0^x \frac{\beta(t)}{\mu(t)} dt \right\}. \quad (3.41)$$

Тепер, завдяки безпосередній перевірці, можна переконатися, що крайова задача (2.2) є еквівалентною до задачі:

$$\begin{cases} \text{Знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ -(\mu zu')' + \sigma zu = fz \text{ в } \Omega = (0, L), \\ (\mu zu')|_{x=0} = \alpha [u(0) - \bar{u}_0], \\ -(\mu zu')|_{x=L} = \gamma z(L) [u(L) - \bar{u}_L]. \end{cases} \quad (3.42)$$

Очевидно, що отримана задача приводить до симетричної варіаційної задачі.

На практиці такий, простий, на перший погляд, підхід не є результативним, оскільки для сингулярно збурених задач множник z вносить дуже велику похибку обчислень інтегралів у значення білінійної форми і лінійного функціонала задачі. Пов'язано це з тим, що значення функції z є дорівнює 1 в точці 0 і є практично нульовим у всіх інших точках. Навіть виконання різного роду локальних масштабувань не дає бажаного результату і система рівнянь МСЕ виходить настільки збуреною, що отримувана апроксимація зовсім не відповідає шуканому розв'язку. Далі наведено список досліджених способів обчислення інтегралів, що зрештою не привели до практичного результату:

- формула трапецій;
- квадратура на основі інтерполяції підінтегральної функції локальними L -сплайнами;
- спеціальна асимптотична формула при $Pe \rightarrow +\infty$;
- \tanh - \sinh квадратури;
- адаптивні квадратури на основі попередніх;
- реалізація алгоритму з використанням Wolfram Mathematica.

Другий спосіб не дає безпосередньо еквівалентної задачі, проте дає змогу побудувати певну послідовність симетричних задач, розв'язки яких збігаються до розв'язку вихідної несиметричної задачі.

Нехай маємо задачу (2.3) із *несиметричною* білінійною формою і нехай для задачі виконуються умови теореми Лакса-Мільграма-Вишика (що, зокрема, гарантує її коректність): функціонал l – лінійний і неперервний, а білінійна

форма a – обмежена та V -еліптична, тобто існують константи $M > 0$, $\alpha > 0$ такі, що $\forall u, v \in V$:

$$\begin{aligned} |a(u, v)| &\leq M \|u\|_V \|v\|_V, \\ a(u, u) &\geq \alpha \|u\|_V^2. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Побудуємо послідовність $\{u^k\}_{k=0}^{\infty}$. Виберемо довільно елемент u^0 . Далі $\forall k \geq 1$ послідовно знаходимо u^k на основі попереднього елемента u^{k-1} як розв'язок наступної варіаційної задачі з *симетричною* білінійною формою:

$$\begin{cases} \text{знайти елемент } u^k \in V \text{ такий, що} \\ a(u^k, v) + a(v, u^k) = \langle l, v \rangle + a(v, u^{k-1}), \quad \forall v \in V. \end{cases} \quad (3.44)$$

Теорема 3.1.

Якщо $M < 2\alpha$ то $u^k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} u$ у просторі V , де u – розв'язок (2.3), причому

$$\|u - u^k\|_V \leq \left(\frac{M}{2\alpha}\right)^k \|u - u^0\|_V \quad (3.45)$$

Доведення. Позначимо $e^k := u^k - u$, тоді рівняння (3.44) запишемо у вигляді:

$$a(u + e^k, v) + a(v, u + e^k) = \langle l, v \rangle + a(v, u + e^{k-1}) \quad (3.46)$$

Врахувавши те, що форма – білінійна та u – розв'язок (2.3), скоротивши однакові доданки з обох сторін рівності, отримаємо:

$$a(e^k, v) + a(v, e^k) = a(v, e^{k-1}) \quad (3.47)$$

Вибравши $v := e^k$ та врахувавши умови теореми Лакса-Мільграма, будемо мати:

$$2\alpha \|e^k\|_V^2 \leq 2a(e^k, e^k) = a(e^k, e^{k-1}) \leq M \|e^k\|_V \|e^{k-1}\|_V \quad (3.48)$$

Тепер можливими є два випадки:

- 1) $\exists k_0 : e^{k_0} = 0_V$, тоді, очевидно, що $u^k = u$, $\forall k \geq k_0$, тобто маємо потрібну збіжну послідовність;

2) Такого номера k_0 , як у попередньому випадку, не існує. Тоді $\forall k \in \mathbb{N}$ останню нерівність можемо поділити на $\|e^k\|_V \neq 0$. В результаті отримаємо:

$$\|e^k\|_V \leq \frac{M}{2\alpha} \|e^{k-1}\|_V \quad (3.49)$$

звідки, оскільки $M < 2\alpha$, маємо остаточний результат (який, очевидно, є істинним і для попереднього випадку):

$$\|e^k\|_V \leq \left(\frac{M}{2\alpha}\right)^k \|e^0\|_V \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0. \quad (3.50)$$

Отож, бачимо, що на кожній ітерації існує єдиний розв'язок відповідної задачі, а тому послідовність $\{u^k\}_{k=0}^{\infty}$ визначено коректно. \square

Невирішеними для практичного застосування тут є: питання про виконання умов теореми для сингулярно збурених задач та проблема комбінування побудованої схеми обчислень із алгоритмами адаптування сітки.

Загалом, проблема симетризації задачі ДКР сьогодні не вирішена і вимагає подальших досліджень.

3.6. Висновки

У цьому розділі:

- 1) Побудовано ефективну реалізацію алгоритму на основі reference solution;
- 2) Побудовано та обґрунтовано алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки;
- 3) Проведено оптимізацію обчислювальних витрат. Побудовано ефективні алгоритми для:
 - а) розв'язування СЛАР з використанням конденсації внутрішніх параметрів;

- b) автоматизованої побудови квадратурних формул Гаусса довільного порядку. Доповнення алгоритму Голуба-Уелша із застосуванням QL -алгоритму із зсувами;
 - c) ефективного обчислення базисних функцій Лобатто.
- 4) Побудовано два методи симетризації білінійної форми.

РОЗДІЛ 4. ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ ТА ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ

У цьому розділі коротко наведено деякі відомості про програмну реалізацію розглянутих алгоритмів та наведено низку обчислювальних результатів, що дають змогу, певною мірою, пересвідчитися у практичній застосовності розробленого алгоритму адаптування та порівняти його із універсальним алгоритмом на основі контрольного розв'язку. Також проведено аналіз АОП та критеріїв адаптування, про які йшлося у попередніх розділах. На завершення подано порівняння із h -адаптивною схемою на основі побудованих оцінювачів.

4.1. Деталі програмної реалізації

У межах цієї роботи було написано дві основні програми:

- 1) реалізація алгоритму на основі reference solution;
- 2) реалізація алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки.

Окрім того було здійснено серію експериментів для дослідження проблеми симетризації, в межах яких було:

- імплементовано додаткові модулі до програми 2 для дослідження різних алгоритмів знаходження інтегралів;
- розроблено тестову імплементацию алгоритму адаптування в середовищі Wolfram Mathematica.

Дві основні програми написано мовою програмування C# із використанням Windows Forms. Також використано MATLAB для деяких допоміжних обчислень та виведення графіків. Обидві програми мають однаковий користувацький графічний інтерфейс, який зображено на рисунку 4.1. Безпосередньо в коді програми задаються дані крайової задачі та деякі додаткові параметри алгоритму адаптування.

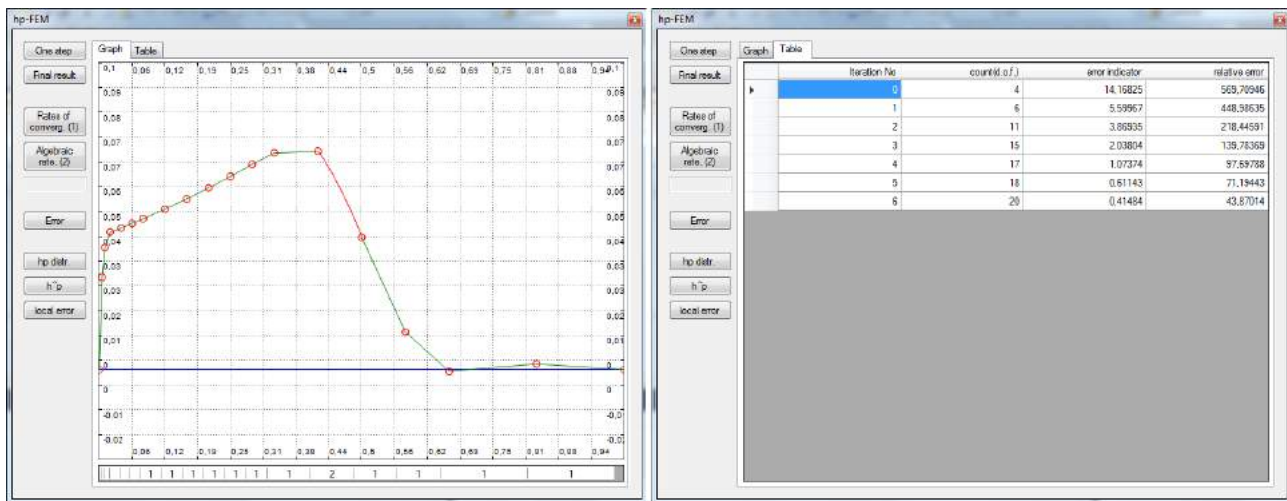


Рис. 4.1. Користувацький інтерфейс програми, що реалізує розроблений алгоритм адаптування.

4.2. Результати обчислювальних експериментів

У цьому підрозділі подано деякі приклади застосування розробленого алгоритму адаптування на основі порівнянь норм наближень до похибки та алгоритму на основі контрольного розв'язку до розв'язування сингулярно збурених задач (2.2). Виконано відповідний порівняльний аналіз алгоритмів, а також на основі розробленого алгоритму проведено порівняльний аналіз різних індикаторів похибки та критеріїв адаптування. На завершення подано порівняння із h -адаптивною схемою. Інформацію подано у вигляді графіків та таблиць, які доповнено заключними коментарями та висновками.

4.2.1. Порівняння розробленого алгоритму з алгоритмом на основі контрольного розв'язку

Далі буде розглянуто результати застосування описаного вище алгоритму до розв'язування деяких сингулярно збурених крайових задач. Оцінювачем похибки, що використовується для вибору елементів для зміни, вибрано явний оцінювач (2.29). Також для порівняння наведено результати розв'язування тих самих задач за допомогою алгоритму, що ґрунтується на reference solution.

Задача №1:

Вихідні дані:

$$\mu = 1, \beta = 0, \sigma = 10^6, f = 10^6, \alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Параметри алгоритму: $\delta = 10^{-8}$, $\theta = 0.2$.

Наближення до розв'язку знайдено з точністю 1%. Максимальний порядок поліномів – 9. Отриману апроксимацію показано на рисунку 4.2. Процес послідовного уточнення апроксимації деталізовано у таблиці 4.1. Аналогічну інформацію для алгоритму на основі reference solution показано на рисунку 4.3 і у таблиці 4.2.

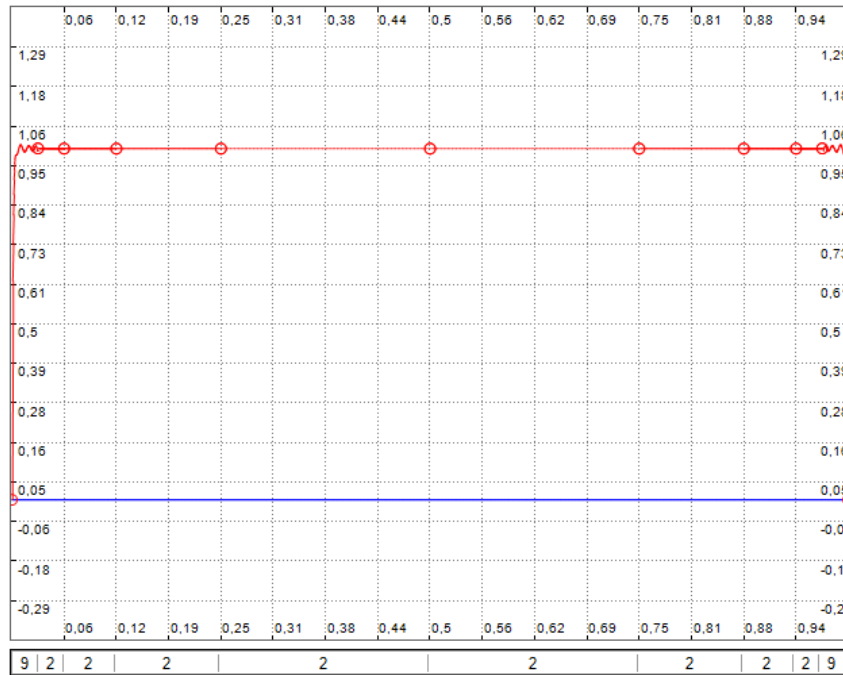


Рис. 4.2. Остаточне наближення МСЕ для задачі 1 знайдене за допомогою алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.1.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 1 (алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки): n – номер ітерації, N_{dof} – кількість невідомих,

$\varepsilon_n^\Omega = \eta$ – індикатор абсолютної похибки, $r_n^\Omega = \frac{\eta}{\|u_h\|_{E,\Omega}} \times 100\%$ – відносна похибка.

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	3	120611,32	13927,08
1	5	38696,50	4104,42
2	9	14465,76	1491,12
... ..			
8	27	86,01	8,61
9	29	49,84	4,99
10	31	28,71	2,87
11	33	16,13	1,61
12	35	9,69	0,97

Зауваження до таблиці 4.1.

Велике значення похибки на початку роботи алгоритму зумовлене використанням енергетичної норми (коефіцієнти рівняння є достатньо великими).

Алгоритм на основі reference solution

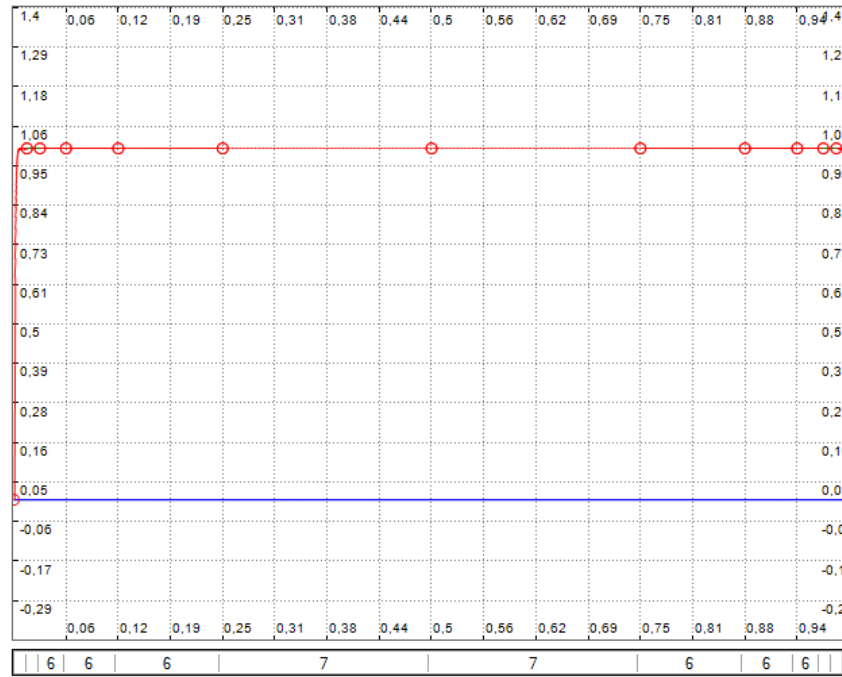


Рис. 4.3. Остаточне наближення МСЕ для задачі 1 знайдене за допомогою алгоритму на основі reference solution (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.2.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 1 (алгоритм на основі reference solution).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	3	5,21	174,05
1	5	5,85	143,79
2	7	6,67	130,29
... ..			
8	51	4,20	13,64
9	61	2,46	7,85
10	71	0,22	0,69

Висновок до задачі 1:

Побудований алгоритм демонструє процес розв'язування удвічі ефективніший ніж алгоритм на основі reference solution, якщо проводити

порівняння максимальних порядків отримуваних систем (35 – 71), при майже однаковій кількості ітерацій.

Задача №2:

Вихідні дані:

$$\mu = 1, \beta = 0, \sigma = 10^4 x^2 + 1, f = 10^4, \alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Параметри алгоритму: $\delta = 40, \theta = 0.2$.

Наближення до розв'язку знайдено з точністю 5%. Максимальний порядок поліномів – 9. Отриману апроксимацію показано на рисунку 4.4. Процес послідовного уточнення апроксимації деталізовано у таблиці 4.3. Аналогічну інформацію для алгоритму на основі reference solution показано на рисунку 4.5 і у таблиці 4.4.

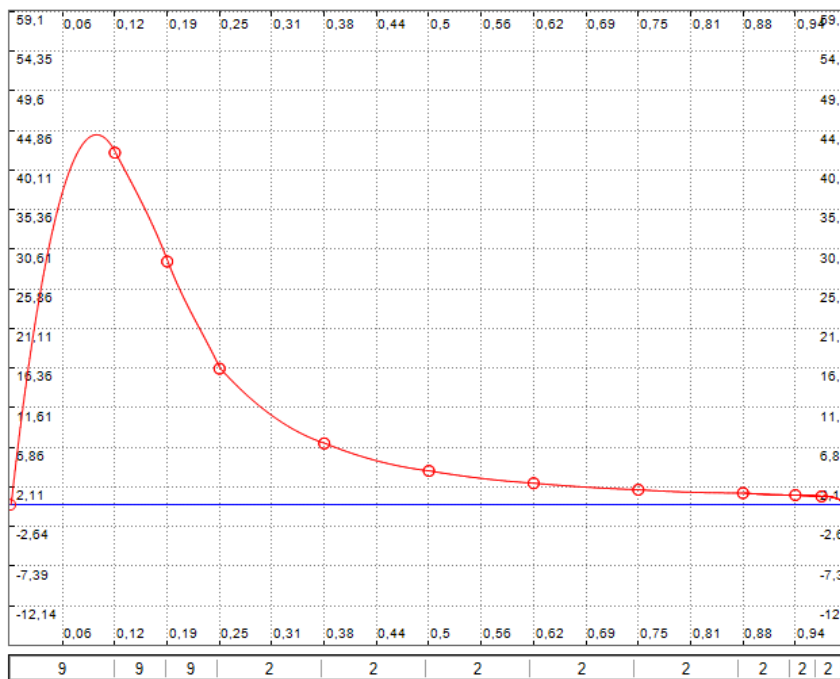


Рис. 4.4. Остаточне наближення МСЕ для задачі 2 знайдене за допомогою алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.3.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 2 (алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки).

n	N_{dof}	ϵ_n^Ω	r_n^Ω
0	3	1776,07	1224,31
1	4	1064,98	367,11
2	6	657,02	197,19
... ..			
11	29	51,12	16,04
12	33	18,46	5,77
13	44	9,38	2,83

Алгоритм на основі reference solution

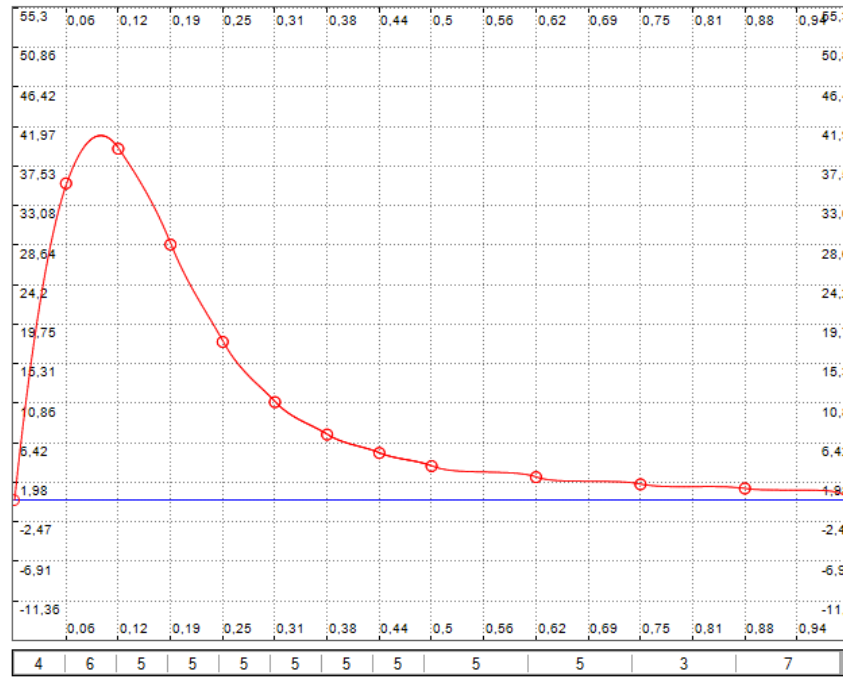


Рис. 4.5. Остаточне наближення МСЕ для задачі 2 знайдене за допомогою алгоритму на основі reference solution (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 2 (алгоритм на основі reference solution).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	3	164,66	1722,30
1	4	145,49	261,13
2	7	84,55	50,49
... ..			
15	49	25,48	14,98
16	55	25,46	14,97
17	61	8,19	4,86

Задача №3:

Вихідні дані:

$$\mu = 1, \beta = 0, \sigma = 10^5 e^x, f = 10^5, \alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Параметри алгоритму: $\delta = 2, \theta = 0.6$.

Наближення до розв'язку знайдено з точністю 5%. Максимальний порядок поліномів – 9. Отриману апроксимацію показано на рисунку 4.6. Процес послідовного уточнення апроксимації деталізовано у таблиці 4.5. Аналогічну інформацію для алгоритму на основі reference solution показано на рисунку 4.7 і у таблиці 4.6.

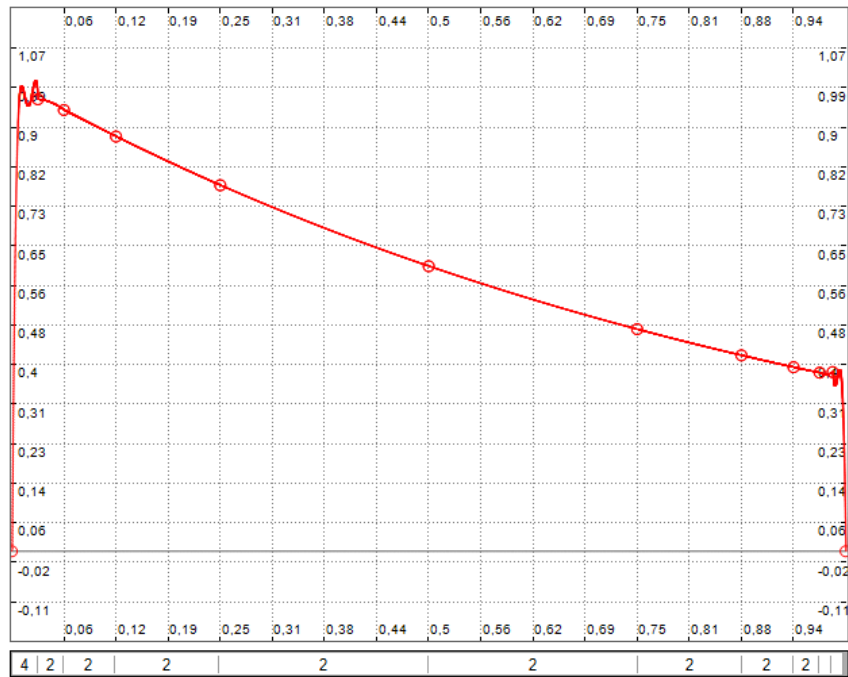


Рис. 4.6. Остаточне наближення MSE для задачі 3 знайдене за допомогою алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.5.

Збіжність апроксимацій MSE для задачі 3 (алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	3	12502,19	5898,52
1	5	3961,25	1686,32
2	9	1450,78	596,85
... ..			
5	21	63,15	25,24
6	24	23,60	9,42
7	26	9,44	3,77

Алгоритм на основі reference solution

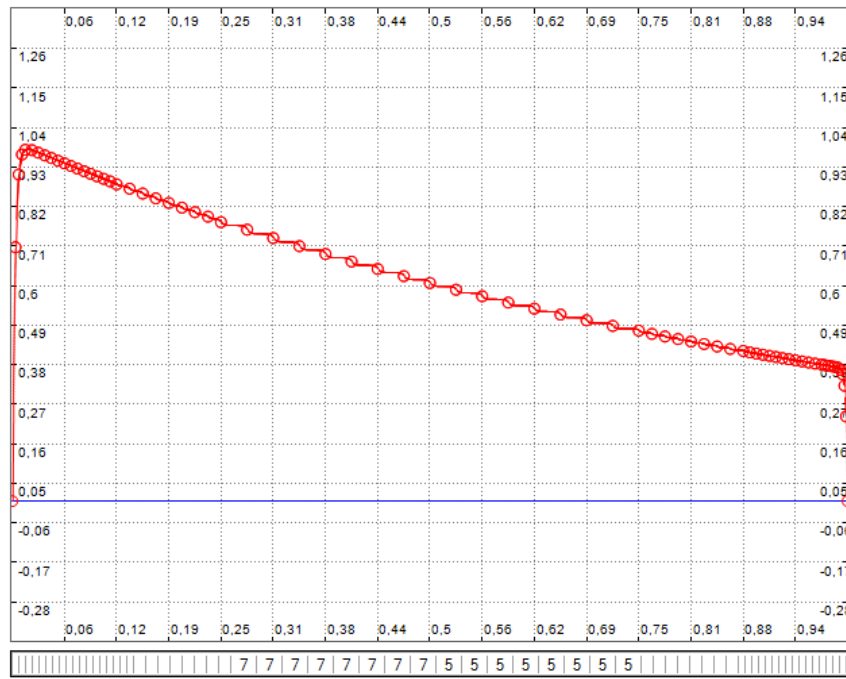


Рис. 4.7. Остаточне наближення МСЕ для задачі 3 знайдене за допомогою алгоритму на основі reference solution (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.6.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 3 (алгоритм на основі reference solution).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
... ..			
12	32	3,60	28,08
13	35	3,14	23,81
... ..			
30	333	0,77	5,52
31	379	0,70	5,04
32	437	0,58	4,19

Висновок до задачі 3:

Можна спостерігати у 4 рази меншу кількість ітерацій для побудованого алгоритму та у 16 разів меншу розмірність фінальної СЛАР.

Задача №4:

Вихідні дані:

$$\mu = 1, \beta = e^{2x} - 200, \sigma = 100(\cos x + 2), f = 1000e^{-100(x-0.5)^2},$$

$$\alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Параметри алгоритму: $\delta = 0, \theta = 0.6$.

Наближення до розв'язку знайдено з точністю 5%. Максимальний порядок поліномів – 9. Отриману апроксимацію показано на рисунку 4.8. Процес послідовного уточнення апроксимації деталізовано у таблиці 4.7. Аналогічну інформацію для алгоритму на основі reference solution показано на рисунку 4.9 і у таблиці 4.8.

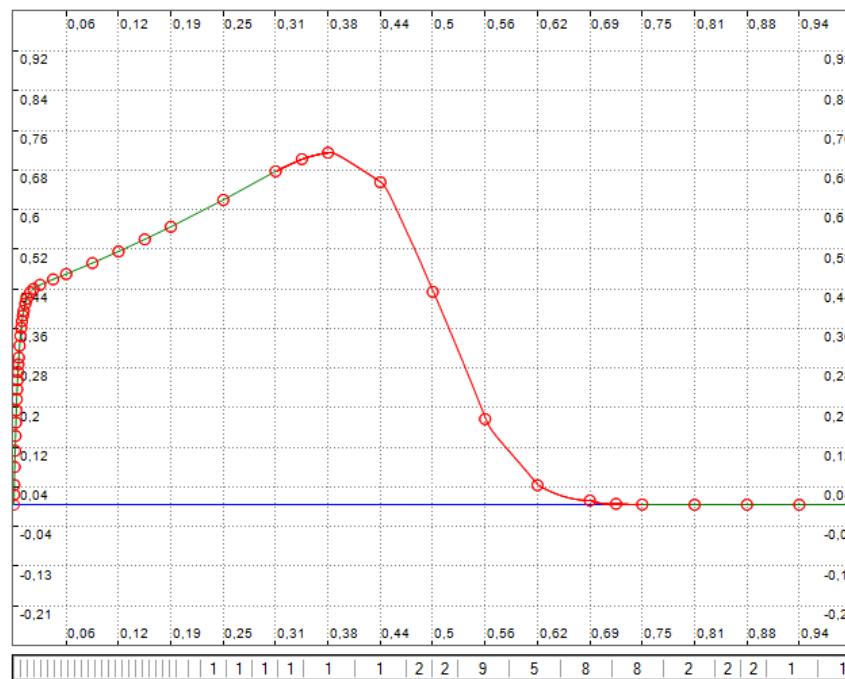


Рис. 4.8. Остаточне наближення МСЕ для задачі 4 знайдене за допомогою алгоритму на основі порівняння норм наближень до похибки (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 4 (алгоритм на основі порівняння норм наближень до похибки).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	3	65,86	47675,34
1	5	56,51	580,77
2	9	54,02	296,95
... ..			
1	68	0,55	5,72
1	72	0,49	5,07
1	77	0,43	4,51

Алгоритм на основі reference solution

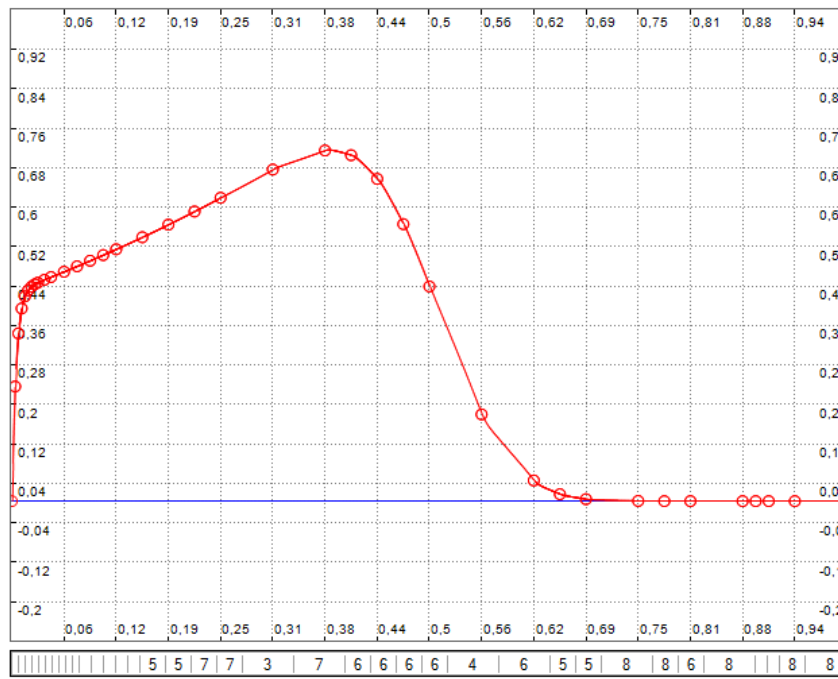


Рис. 4.9. Остаточне наближення МСЕ для задачі 4 знайдене за допомогою алгоритму на основі reference solution (знизу показано степені використаних поліномів на кожному із елементів).

Таблиця 4.8.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 4 (алгоритм на основі reference solution).

n	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
... ..			
14	39	2,11	131,42
15	46	2,10	130,70
... ..			
31	171	0,45	9,92
32	196	0,43	9,43
33	224	0,18	3,85

Висновки до задачі 4:

Можна спостерігати удвічі меншу кількість ітерацій для побудованого алгоритму та у три рази меншу розмірність остаточної СЛАР.

Окрім цього, можемо бачити, що на розглянутому прикладі алгоритм побудував «еталонну» сітку: інтенсивне використання h -адаптивності та поліномів малого порядку в околі примежового шару з великим градієнтом розв'язку та використання поліномів високого порядку (p -адаптивність) у межах зони, де розв'язок змінюється «плавно» (більша гладкість). Це добре узгоджується із теоретичними результатами щодо побудови оптимальних алгоритмів hp -адаптування.

Варто також зауважити, що білінійна форма задачі не є симетричною. Загалом для несиметричних задач алгоритм може бути некоректним, оскільки, як показує наступний приклад, послідовність індикаторів не збігається монотонно.

Задача №5:

Вихідні дані:

$$\mu = 1, \beta = 8000(x - 0.5)^2, \sigma = 400x^2, f = 400, \alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Параметри алгоритму: $\delta = 0, \theta = 0.6$.

З рисунку 4.11 стає зрозумілим, що для несиметричних задач розглянутий в алгоритмі критерій вибору між перебудовою сітки і підвищенням порядку може бути некоректним. Про гарантовану некоректність говорити не можна, бо наведений графік відображає поведінку індикатора похибки, що є оцінкою істинної похибки зверху. Питання про еквівалентність норми похибки та індикатора не досліджене.

Загальні зауваження щодо отриманих результатів:

Побудований алгоритм продемонстрував кращу ефективність порівняно із алгоритмом на основі *reference solution*. У всіх випадках застосування до симетричних задач маємо монотонну збіжність (це стосується і відносних, і абсолютних похибок). При побудові розв'язків параметри δ і θ підбиралися для досягнення кращого результату. На деяких наборах вихідних даних простежувалась доволі сильна залежність ефективності роботи алгоритму від параметра δ . Однією із невирішених є проблема автоматизації вибору δ і θ на кожній ітерації алгоритму.

Зазначимо, що зміст параметрів алгоритму такий:

- δ задає співвідношення пріоритету між поділом елемента та збільшенням його порядку: 0 – однаковий пріоритет, збільшення параметра – збільшення пріоритету для поділу, зменшення – збільшення пріоритету для підвищення порядку;
- θ визначає відсоток елементів (за рівнем індикатора похибки), що підлягає зміні.

4.2.2. Порівняльний аналіз АОП та критеріїв адаптування

У цьому підрозділі ми порівняємо результати застосування розробленого алгоритму до різних комбінацій використовуваного АОП для вибору елементів, що підлягають зміні та вибраного критерію адаптування. Розглядатимемо оцінювач на основі фундаментального розв'язку, що описаний у підрозділі 2.4,

та явний оцінювач похибки (2.29). Також розглядатимемо два критерії адаптування: «максимум» (3.15) та «середнє» (3.16).

Порівняльний аналіз проведемо на задачах 3 та 4 із попереднього підрозділу. Початкову сітку виберемо із семи рівновіддалених вузлів та допустиму точність у двох задачах приймемо рівною 1%.

Також у поданих таблицях додано два стовпця N – кількість скінченних елементів та p_n – порядок збіжності, обчислений згідно формули (3.39).

Середній порядок збіжності у таблицях обчислено з використанням методу найменших квадратів.

Порівняльний аналіз для задачі 3:

Рисунок 4.12 і таблиця 4.9 демонструють поведінку алгоритму для задачі 3 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку та явного оцінювача (2.29) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (3.15).

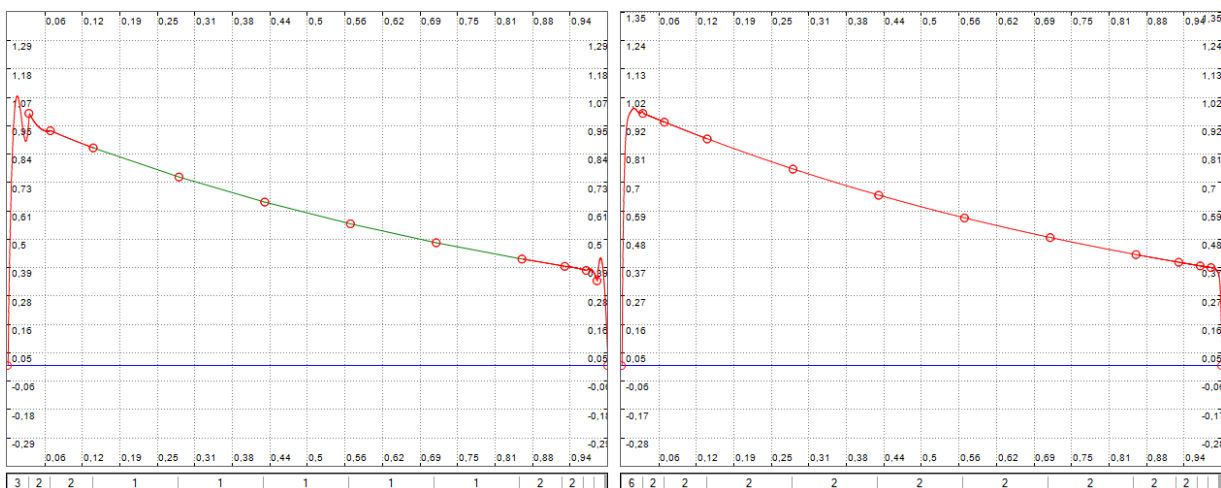


Рис. 4.12. Остаточні апроксимації MSE для задачі 3 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку (зліва) та явного оцінювача (2.29) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (3.15). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 4.9.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 3 із критерієм адаптування
«максимум» (3.15).

Оцінювач на основі фундаментального розв'язку						Явний оцінювач (2.29)					
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	P_n	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	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					

В таблиці 4.9 спостерігаємо, що оцінювач на основі фундаментального розв'язку може бути ефективнішим, проте в даному випадку він не дає монотонної збіжності на відміну від явного АОП.

Рисунок 4.13 і таблиця 4.10 демонструють поведінку алгоритму для задачі 3 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку та явного оцінювача (2.29) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (3.16).

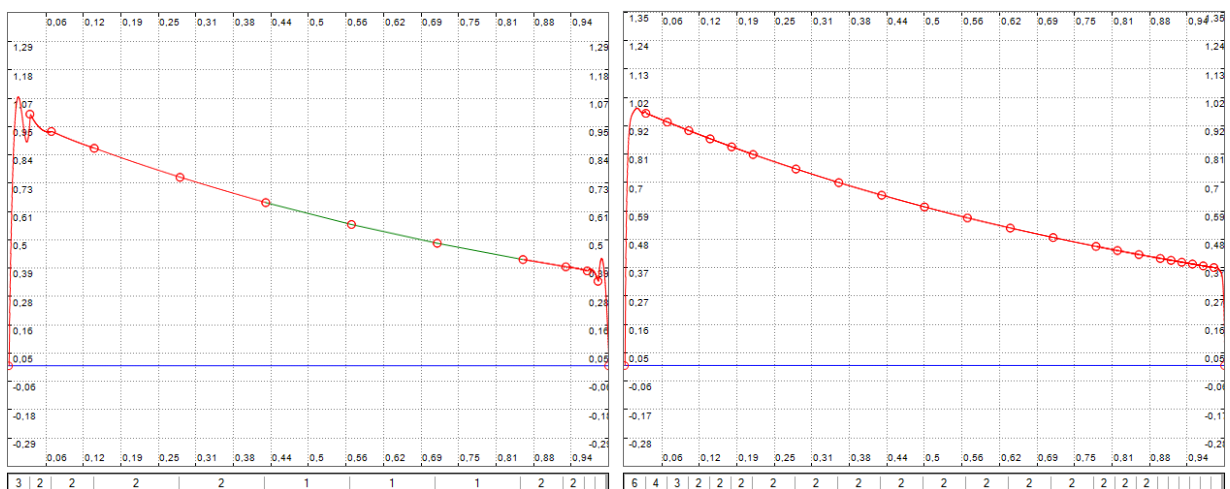


Рис. 4.13. Остаточні апроксимації МСЕ для задачі 3 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку (зліва) та явного оцінювача

(2.29) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (3.16). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 4.10.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 3 із критерієм адаптування «середнє» (3.16).

Оцінювач на основі фундаментального розв'язку						Явний оцінювач (2.29)					
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	P_n	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	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					

Результати якісно практично повторюють результати з таблиці 4.9. Більше того, для похибки також спостерігається незначне локальне підвищення на середніх ітераціях алгоритму.

Загалом, для цього прикладу робимо такі висновки:

- (i) Порівнюючи з попереднім критерієм «максимум» (див. таблицю 4.9), 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) В таблиці 4.10 показано, що порядок збіжності монотонно зростає, а отже – це може свідчити про присутність експоненційної збіжності в цьому прикладі.

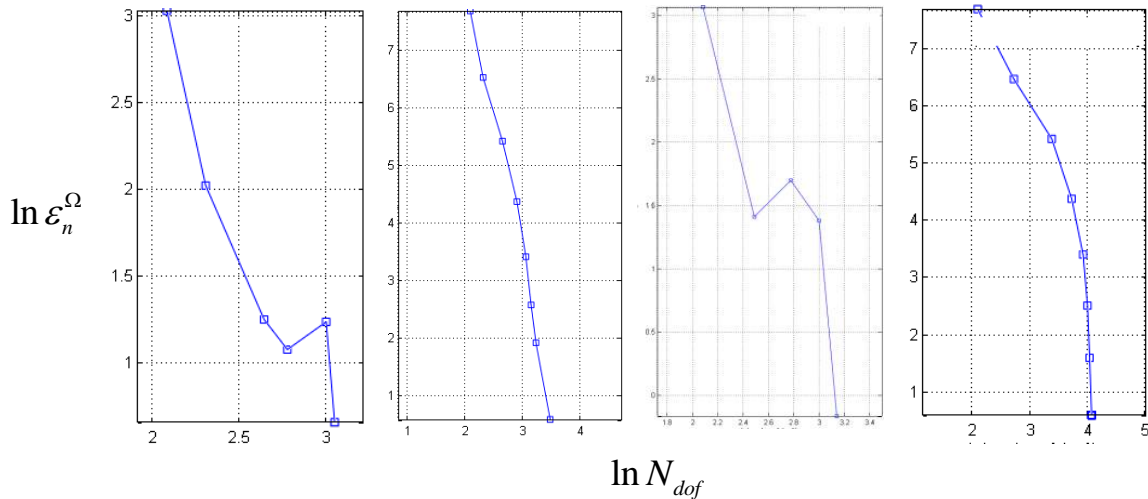


Рис. 4.14. Залежність між індикатором абсолютної похибки ε_n^Ω і кількістю степенів свободи N_{dof} у логарифмічній шкалі для задачі 3: а) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «максимум»; б) для явного оцінювача та критерію адаптування «максимум»; в) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «середнє»; г) для явного оцінювача та критерію адаптування «середнє».

Висновки з порівняльного аналізу для задачі 3:

Із числових результатів для задачі 3, наведених в таблицях 4.9 та 4.10, можемо зробити висновок, що оцінювач на основі фундаментального розв'язку є дещо ефективнішим, проте не завжди забезпечує монотонну збіжність апроксимацій.

Критерії адаптування є за своїми числовими характеристиками практично ідентичними, проте критерій «максимум», можливо, є дещо ефективнішим на практиці.

Порівняльний аналіз для задачі 4:

Рисунок 4.15 і таблиця 4.11 демонструють поведінку алгоритму для задачі 4 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку та явного оцінювача (2.29) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (3.15).

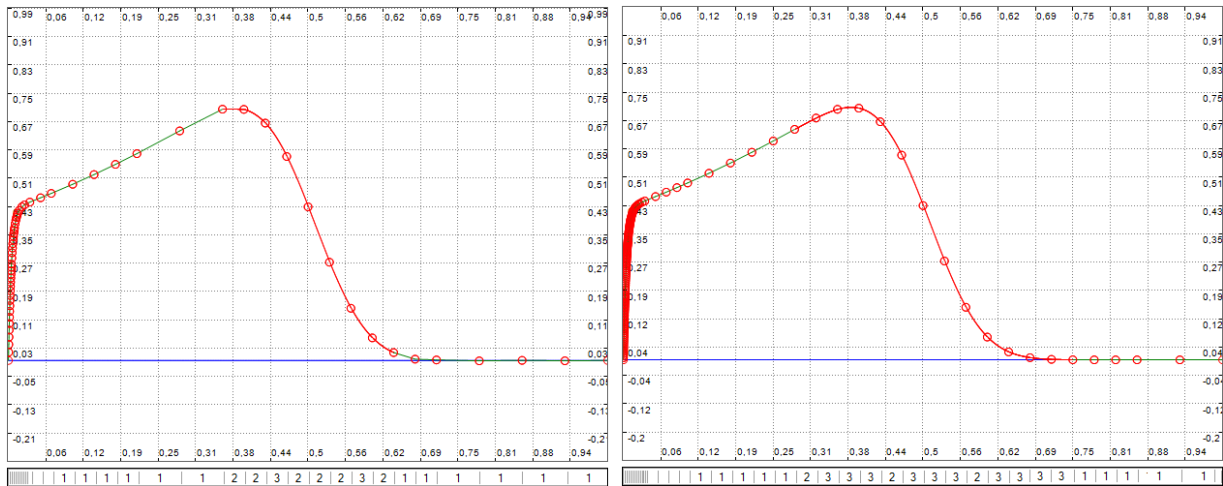


Рис. 4.15. Остаточні апроксимації MSE для задачі 4 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку (зліва) та явного оцінювача (2.29) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «максимум» (3.15). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 4.11.

Збіжність апроксимацій MSE для задачі 4 із критерієм адаптування «максимум» (3.15).

Оцінювач на основі фундаментального розв'язку						Явний оцінювач (2.29)					
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	p_n	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	p_n
0	7	8	19,97	118,8		0	7	8	53,86	320,53	
1	12	13	16,62	96,31	0,37	1	11	12	33,56	194,66	1,16
2	15	16	3,80	27,81	7,09	2	14	15	18,85	135,13	2,58
3	17	18	5,07	48,95	-2,42	3	16	17	11,07	104,86	4,25
4	18	19	1,66	18,85	20,65	4	17	19	5,09	57,91	6,96
5	19	20	1,15	12,10	7,10	5	18	20	3,44	36,14	7,64
6	20	23	0,65	6,86	4,04	6	20	26	1,54	16,25	3,04
7	26	31	0,32	3,33	2,39	7	24	30	0,92	9,63	3,61
8	33	40	0,32	3,338	-0,00	8	35	44	0,48	5,02	1,70
9	37	44	0,27	2,88	1,59	9	56	69	0,22	2,34	1,69
10	37	46	0,21	2,26	5,51	10	85	101	0,11	1,24	1,6
11	42	53	0,15	1,57	2,53	11	138	160	0,06	0,66	1,35
12	58	69	0,08	0,93	1,98						
усереднений порядок збіжності 2,72						усереднений порядок збіжності 2,29					

Аналогічно, як і для задачі 3, отримали ситуацію, коли оцінювач на основі фундаментального розв'язку не дає монотонної збіжності.

Рисунок 4.16 і таблиця 4.12 демонструють поведінку алгоритму для задачі 4 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку та явного оцінювача (2.29) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (3.16).

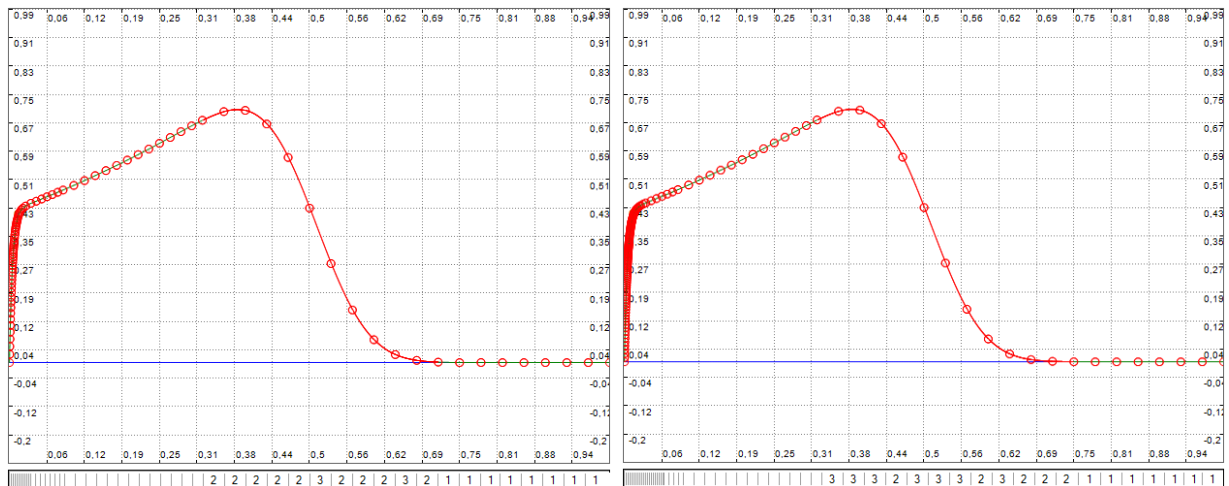


Рис. 4.16. Остаточні апроксимації МСЕ для задачі 4 при використанні оцінювача на основі фундаментального розв'язку (зліва) та явного оцінювача (2.29) (справа) в комбінації із критерієм адаптування «середнє» (3.16). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 4.12.

Збіжність апроксимацій МСЕ для задачі 4 із критерієм адаптування «середнє» (3.16).

Оцінювач на основі фундаментального розв'язку						Явний оцінювач (2.29)					
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	p_n	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	p_n
0	7	8	9,17651	54,60	-	0	7	8	53,86	320,53	
1	14	15	11,58043	67,35	0,37	1	14	15	33,33	193,88	0,76
2	25	29	10,38023	75,74	0,16	2	25	29	17,30	126,26	0,99
3	36	45	3,89025	37,63	2,23	3	37	48	8,75	84,66	1,35
4	41	51	1,96705	22,38	5,44	4	42	56	4,38	49,93	4,47
5	44	58	1,03781	10,91	4,97	5	44	60	2,19	23,11	10,02

6	49	63	0,4601	4,83	9,83	6	49	65	1,09	11,54	8,64
7	58	72	0,23279	2,43	5,10	7	60	77	0,55	5,76	4,08
8	69	83	0,11914	1,24	4,71	8	77	95	0,27	2,89	3,27
9	84	98	0,06066	0,63	4,06	9	100	119	0,14	1,48	2,96
						10	129	149	0,07	0,83	2,56
усереднений порядок збіжності 2,58						усереднений порядок збіжності 2,44					

Тут ми отримали дещо середні результати, порівняно із попередніми двома для «максимум» критерію для задачі 4.

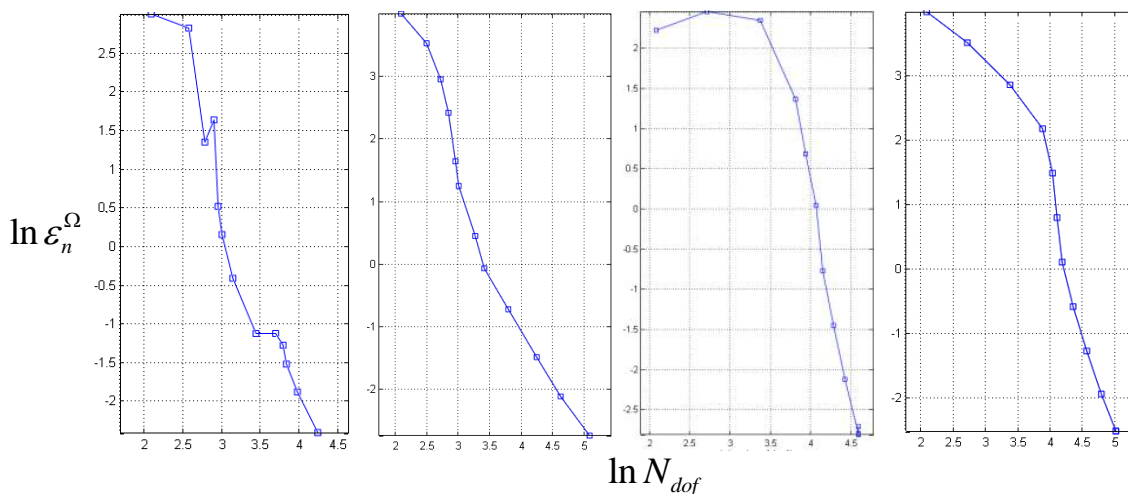


Рис. 4.17. Залежність між індикатором абсолютної похибки ε_n^Ω і кількістю степенів свободи N_{dof} у логарифмічній шкалі для задачі 4: а) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «максимум»; б) для явного оцінювача та критерію адаптування «максимум»; с) для оцінювача на основі фундаментального розв'язку та критерію адаптування «середнє»; д) для явного оцінювача та критерію адаптування «середнє».

Висновки з порівняльного аналізу для задачі 4:

Як і для задачі 3, ми бачимо, що:

- (i) загалом, найкращою щодо кількості ітерацій, елементів та степенів свободи є комбінація оцінювача на основі фундаментального розв'язку із критерієм «максимум»;
- (ii) немає істотної різниці між двома критеріями адаптування;

- (iii) явний оцінювач завжди дає змогу побудувати монотонно збіжну послідовність апроксимацій, на відміну від оцінювача на основі фундаментального розв'язку.

4.2.3. Порівняння розробленого алгоритму з h -адаптивними схемами

Розглянемо, для прикладу, задачу 3, вихідні дані якої були такими:

$$\mu = 1, \beta = 0, \sigma = 10^5 e^x, f = 10^5, \alpha = \gamma = 10^8, \bar{u}_0 = \bar{u}_L = 0, L = 1.$$

Розглянемо розроблений алгоритм із параметрами $\delta = 2, \theta = 0.6$.

Виберемо максимальний допустимий порядок поліномів 9 і шукану точність 0,5%. Оцінювачем для вибору елементів, які потрібно змінювати, виберемо оцінювач на основі фундаментального розв'язку. Критерій адаптування «максимум» (3.15). Початкова сітка містить 7 однакових елементів.

Для отримання відповідної h -адаптивної схеми в алгоритмі достатньо виключити крок із p -адаптуванням. В результаті отримаємо типову схему із критерієм «максимум» і з оцінювачем на основі фундаментального розв'язку (аналогічного типу схеми розглянуто у [1, 8, 55]).

Розглянемо спершу порівняння hp - та h -адаптивних схем у випадку коли степінь поліномів на початковій сітці дорівнює 1.

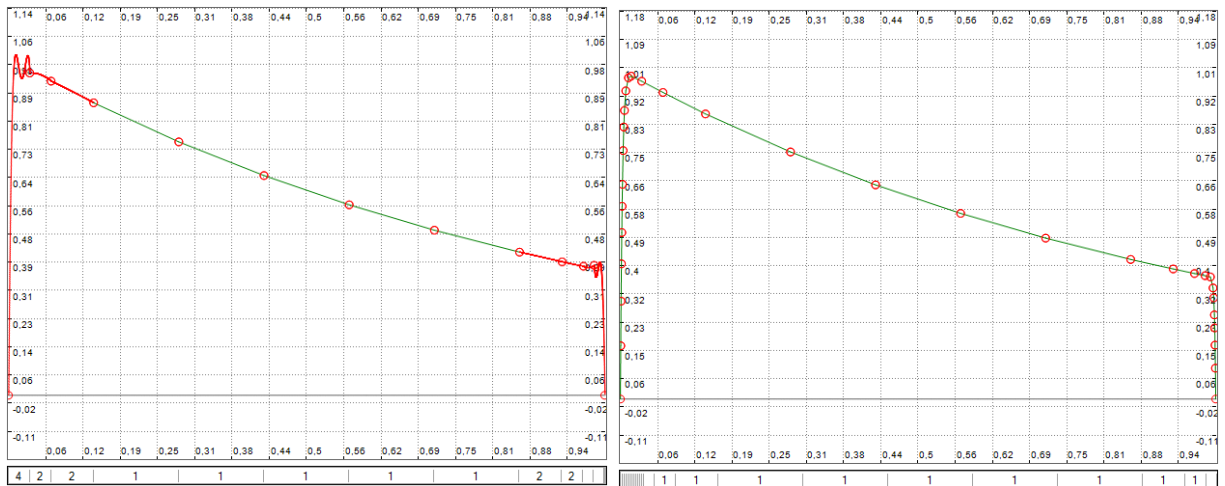


Рис. 4.18. Остаточні апроксимації MSE (при використанні лінійних поліномів на початковій сітці) для задачі 3: hp -адаптування (зліва) та h -адаптування (справа). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Збіжність hp - та h -адаптивних апроксимацій МСЕ для задачі 3 при використанні лінійних поліномів на початковій сітці.

hp -адаптування					h -адаптування				
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	7	8	10,70945	4,47	0	7	8	10,70945	4,47
1	7	10	3,74195	1,52	1	9	10	10,87574	4,43
2	9	14	3,61569	1,45	2	11	12	10,84471	4,36
3	11	18	2,76225	1,10	3	13	14	10,28079	4,12
4	12	21	2,22965	0,89	4	15	16	8,01536	3,20
5	12	23	0,92697	0,37	5	17	18	5,01392	2,00
					6	19	20	2,83715	1,13
					7	23	24	1,56042	0,62
					8	31	32	0,88874	0,35

Бачимо, що hp -адаптивний алгоритм завершує роботу на 3 ітерації швидше з меншою розмірністю остаточної СЛАР. Варто вказати на появу певних паразитичних осциляцій розв'язку в околі примежових шарів.

Розглянемо тепер порівняння hp - та h -адаптивних схем у випадку, коли степінь поліномів на початковій сітці дорівнює 2.

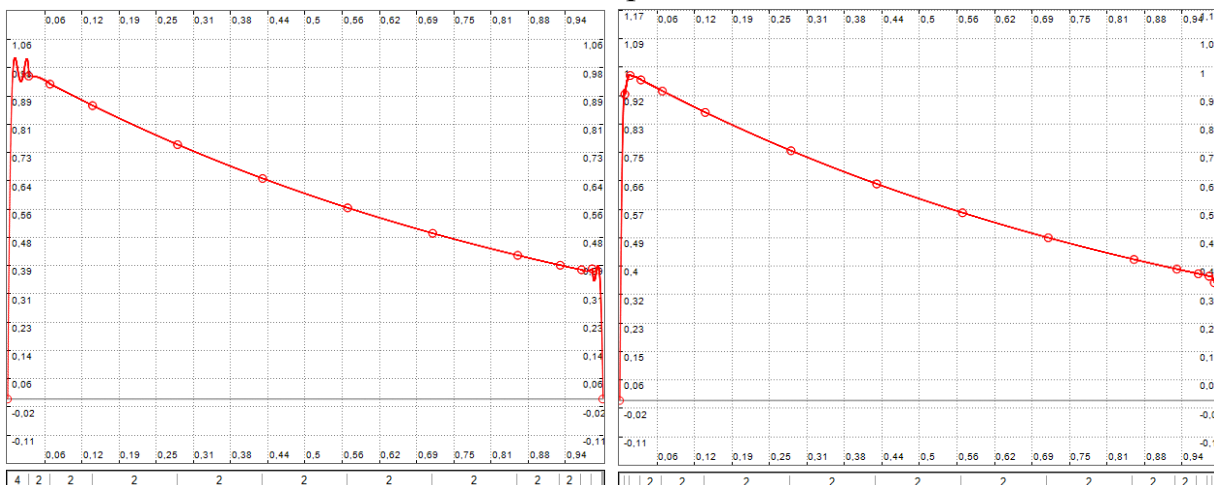


Рис. 4.19. Остаточні апроксимації МСЕ (при використанні квадратичних поліномів на початковій сітці) для задачі 3: hp -адаптування (зліва) та h -адаптування (справа). Рядки чисел під кожним графіком вказують степені використаних поліномів на кожному скінченному елементі.

Таблиця 4.14.

Збіжність hp - та h -адаптивних апроксимацій МСЕ для задачі 3 при використанні квадратичних поліномів на початковій сітці.

hp -адаптування					h -адаптування				
n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω	n	N	N_{dof}	ε_n^Ω	r_n^Ω
0	7	15	3,89401	1,58	0	7	15	3,89401	1,58
1	9	19	3,62245	1,45	1	9	19	3,62245	1,45
2	11	23	2,76193	1,10	2	11	23	2,76193	1,10
3	12	26	2,22932	0,89	3	13	27	1,30755	0,52
4	12	28	0,92626	0,37	4	15	31	0,36919	0,15

Бачимо, що h -адаптивна схема при використанні поліномів вищих порядків стає майже повністю співрозмірною із hp -адаптивною з огляду на характеристику збіжності. Це нашоує на думку про те, що hp -адаптивність усе ще залишається дещо «екзотичним» інструментом, переваги якого поки є більше потенційними, ніж практичними.

4.3. Висновки

У цьому розділі наведено результати серії обчислювальних експериментів, що показують практичну застосовність розробленого алгоритму адаптування до сингулярно збурених задач. Побудований алгоритм показав кращі результати порівняно із алгоритмом на основі reference solution та типовою h -адаптивною схемою з лінійними базисними функціями МСЕ.

ВИСНОВКИ

У даній 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Абрамов Є. Кусково-лінійні апроксимації h -адаптивного методу скінчених елементів для одновимірних крайових задач / Є. Абрамов, О. Ліпіна, Г. Шинкаренко, А. Ямелинець // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. мат. та інформ. – 2006. – Вип.11. – С. 3–18.
2. Скворцов А. Триангуляция Делоне и её применение / А. Скворцов – Изд-во Том. ун-та. – Томск, 2002. – 128 с.
3. Стренг Г. Теория метода конечных элементов / Г. Стренг, Дж. Фикс – Москва: Мир, 1977. – 352 с.
4. Цегелик Г. Чисельні методи / Г. Цегелик – Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. І.Франка, 2007. – 408 с.
5. Шахно С. Чисельні методи лінійної алгебри / С. Шахно – Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. І.Франка, 2007. – 245 с.
6. Шинкаренко Г. Основи екології / Г. Шинкаренко – Львів, 2006.
7. Шинкаренко Г. Проекційно-сіткові методи розв'язування початково-крайових задач / Г. Шинкаренко – Київ: НМК ВО, 1991. – 85 с.
8. Ainsworth M. A posteriori error estimators in finite element analysis / M. Ainsworth, J. T. Oden – Wiley, New York, 2000. – 240p.
9. Ainsworth M. hp -finite element procedures on non-uniform geometric meshes: adaptivity and constrained approximation / M. Ainsworth, B. Senior // IMA Volumes in Mathematics and its Applications, Springer-Verlag. – 1999. – P. 1-28.
10. Binev P. Fast computation in adaptive tree approximation / P. Binev, R. DeVore // Springer-Verlag. – 2004. – 24 p.
11. Binev P. Tree approximation for hp -adaptivity / P. Binev // Department of Mathematics, University of South Carolina. – Columbia, 2015. – 13p.
12. Bird R. Transport phenomena / R. Bird, W. Stewart, E. Lightfoot – John Wiley & Sons, 1976. – 896 p.
13. Brenner S. The Mathematical Theory of Finite Element Methods / S. Brenner, L. Scott – Springer, 2008, 3ed – 400 p.

14. Briggs W. A multigrid tutorial / W. Briggs, V. Henson, S. McCormick – SIAM, Philadelphia, 2000. – 193 p.
15. Bürg M. Goal-oriented adaptive finite element methods for elliptic problems revisited / M. Bürg, M. Nazarov // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2015. – V.287. – P. 125-147.
16. Canuto C. Convergence and optimality of *hp*-AFEM / C. Canuto, R. Nochetto, R. Stevenson, M. Verani – arXiv, 2015. – 37 p.
17. Charney J. Numerical integration of the barotropic vorticity equation / J. Charney, R. Fjörtoft, J. von Neumann // Tellus. – 1950. – V.2, Iss.4. – P. 237-254.
18. Crank J. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type / J. Crank, P. Nicolson – Adv. Comput. Math. – 1996. – V.6, Iss.1. – P. 207-226.
19. Demkowicz L. A class of discontinuous Petrov-Galerkin methods. Part III: Adaptivity / L. Demkowicz, J. Gopalakrishnan, A. Niemi // ScienceDirect, Applied Numerical Mathematics. – 2012. – No.62. – P. 396–427.
20. Demkowicz L. Computing with *hp*-adaptive finite elements. I. One- and Two Dimensional Elliptic and Maxwell Problems / L. Demkowicz – Chapman and Hall/CRC. – 2006. – 398 p.
21. Doolan E. Uniform numerical methods for problems with initial and boundary layers / E. Doolan, J. Miller, W. Schilders – Dublin: BOOLE PRESS. – 1980. – 425 p.
22. Dorfler W. Convergence of an adaptive *hp* finite element strategy in one space dimension / W. Dorfler, V. Heuveline // ScienceDirect, Applied Numerical Mathematics. – 2007. – No.57. – P. 1108–1124.
23. 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.

24. 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.
25. 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.
26. Drebotiy R. Residual hp -adaptive FEM for 1D diffusion-convection-reaction boundary value problems / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // VI Міжнародна наукова конференція імені І. І. Ляшка «Обчислювальна та прикладна математика». Матеріали конференції. – Київ, 2013. – P. 18–21.
27. Drebotiy R. Symmetrization of diffusion-advection-reaction problem and hp -adaptive finite element approximations / R. Drebotiy, H. Shynkarenko // Visnyk of the Lviv University. – Lviv, 2015. – Issue 23. – P. 55–72.
28. 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.
29. Fasino D. Structured eigenvalue problems for rational gauss quadrature / D. Fasino, L. Gemignani // Numerical Algorithms, Springer Science. – 2007. – V. 45, Is. 1–4. – P. 195–204.
30. Flaherty J. Finite element analysis / J. Flaherty – Troy. – New York, 2000. – 323 p.
31. Gander W. Polynomial recurrence, newton correction and continued fractions / W. Gander, P. Gonnet – 15p.
32. Gautschi W. Orthogonal polynomials and Quadrature / W. Gautschi // Kent State University, Electronic Transactions on Numerical Analysis. – 1999. – Vol. 9. – P. 65–76.

33. Golub G. Calculation of gauss quadrature rules / G. Golub, J. Welsch // American Mathematical Society, Mathematics of Computation. – 1969. – Vol. 23, No. 106. – P. 221 – 230.
34. Gratsch T. A posteriori error estimation techniques in practical finite element analysis / T. Gratsch, K. Bathe // ScienceDirect, Computers and Structures. – 2005. – No.83. – P. 235–265.
35. Gui W. The h , p and h - p versions of the finite element method in 1 dimension. Part 3: The adaptive h - p version / W. Gui, I. Babuška // Numer. Math. 49. – 1986. – P. 659–683.
36. Hesthaven J. Nodal Discontinuous Galerkin Methods Algorithms, Analysis, and Applications / J. Hesthaven, T. Warburton – Springer-Verlag. – New York, 2008. – 502 p.
37. Houston P. Sobolev regularity estimation for hp-adaptive finite element methods / P. Houston, B. Senior, E. Süli // Numerical Mathematics and Advanced Applications (F. Brezzi, A Buffa, S. Corsaro, and A. Murli, eds.), Springer-Verlag. – Berlin, 2003. – P. 619–644.
38. Krylov V. Approximate calculation of integrals / V. Krylov – Dover Publications. – New York, Mineola, 2005. – 368 p.
39. Logan J. Transport modeling in hydrogeochemical systems / J. Logan – Springer, New York. – 2001. – 226 p.
40. Logg A. Automating the Finite Element Method / A. Logg // Sixth Winter School in Computational Mathematics Geilo: Lecture notes, March 5-10. – 2006 – 90 p.
41. Marchuk G. Mathematical Models in Environmental Problems / G. Marchuk // North Holland, Amsterdam. – 1986. – 216 p.
42. Mavriplis C. Adaptive mesh strategies for the spectral element method / C. Mavriplis // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 1994. – V.116. – P. 77–86.

43. Melenk J. A posteriori error analysis of *hp*-FEM for singularly perturbed problems / J. Melenk, T. Wihler – Swiss National Science Foundation. – 2014. – 13 p.
44. Melenk J. On robust exponential convergence of *hp*-finite element methods for problems with boundary layers / J. Melenk // ETH Zürich. – 1996. – 25 p.
45. Melenk J. *hp*-finite element methods for singular perturbations / J. Melenk – Springer. – Berlin, 2002. – 326 p.
46. Patra A. A systematic strategy for simultaneous adaptive *hp* finite element mesh modification using nonlinear programming / A. Patra, A. Gupta // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2001. – V. 190. – P. 3797–3818.
47. Rektorys K. Variational methods in mathematics, science and engineering. Second edition. / K. Rektorys – Dr. Reidel Publishing Company. – 1980. – 589 p.
48. Schwab Ch. *p* and *hp*-Finite Element Methods / Ch. Schwab – Oxford: Clarendon Press. – 1998. – 392p.
49. Segeth K. A review of some a posteriori error estimates for adaptive finite element methods // Mathematics and Computers in Simulation. – 2010. – No.80. – P. 1589–1600.
50. Söln P. Higher-Order Finite Element Methods / P. Söln, K. Segeth, I. Dolezel – Chapman & Hall. – London, 2003. – 408 p.
51. Söln P. Static Condensation, Partial Orthogonalization of Basis Functions, and ILU Preconditioning in the *hp*-FEM / P. Söln, T. Vejchodsky // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2008. – Issue 218. – P. 192–200.
52. Stroud A. Gaussian quadrature formulas / A. Stroud, D. Secrest – Prentice-Hall. – London, 1966. – 374 p.
53. Süli E. *hp*-finite element methods for hyperbolic problems / E. Süli, P. Houston, Ch. Schwab // The Mathematics of Finite Elements and Applications X. MAFELAP (J.R. Whiteman, ed.), Elsevier. – 2000. – P. 143–162.
54. Szego G. Orthogonal polynomials / G. Szego – American Mathematical Society, Providence. – Rhode Island, 1939. – 440 p.

55. Verfürth R. Adaptive Finite Element Methods / R. Verfürth – Ruhr-Universität Bochum: Lecture notes. – 2011. – 129 p.
56. Wesseling P. Introduction to multigrid methods / P. Wesseling – John Wiley and Sons. – New York, 1991. – 296 p.

ДОДАТОК А. ПОБУДОВА КВАДРАТУРНИХ ФОРМУЛ ГАУССА

При реалізації схем *hp*-адаптування виникає проблема знаходження інтегралів, зокрема, від поліномів наперед невідомого степеня. Для її вирішення доцільно використовувати формули Гаусса, оскільки вони забезпечують високу точність, при малій кількості вузлів. Навіть більше, вони дають змогу точно обчислити значення інтеграла від полінома, з використанням при цьому мінімально можливої кількості вузлів. Оскільки максимальний степінь поліномів, які використовуються для апроксимації розв'язку визначає користувач, то це унеможливорює подання вузлів і вагових коефіцієнтів формули явно, в коді програми.

Далі, на основі джерел [29, 31 – 33, 38, 52, 54], зібрано цілісне обґрунтування алгоритму Голуба-Уелша для знаходження вузлів і ваг квадратурних формул Гаусса, оригінальну ідею якого запропоновано у [33]. Розглянуто цікавий нам частковий випадок і виведено конкретні формули для обчислення коефіцієнтів матриці, яка фігурує у проблемі власних значень для обчислення вузлів квадратури.

Розглянемо попередньо загальний вигляд квадратурної формули, яку ми будемо використовувати:

$$\int_a^b f(x)\omega(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + R_n(f) \quad (\text{A.1})$$

Тут: $\omega(x) > 0$ – вагова функція, x_i – вузли, w_i – коефіцієнти квадратурної формули, $R_n(f)$ – залишковий член. Число n будемо називати *порядком* формули.

Варто зауважити, що при розгляді теоретичних аспектів ми будемо використовувати більш загальний вигляд квадратурних формул – формули з ваговою функцією, проте для потреб алгоритму адаптування буде виведено формули, придатні для обчислень лише у випадку $\omega(x) \equiv 1$.

Введемо в розгляд скалярний добуток функцій

$$(u, v) = \int_a^b u(x)v(x)\omega(x)dx \quad (\text{A.2})$$

і норму, яка з ним асоційована,

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)} \quad (\text{A.3})$$

Під *ортогональністю* функцій будемо розуміти ортогональність в сенсі щойно введеного скалярного добутку.

Можна показати [4], що для максимальної *алгебраїчної міри точності* квадратурної формули необхідно і достатньо, щоб вузли цієї формули були коренями многочлена p_n , ортогонального до всіх многочленів степеня не вище $n-1$, тобто

$$(p_n, q_{n-1}) = 0, \quad \deg(q_{n-1}) \leq n-1. \quad (\text{A.4})$$

Максимальна алгебраїчна міра точності – $2n-1$ [4]. Формули, які її реалізують, називають *квадратурними формулами Гаусса*.

Послідовності ортогональних многочленів

Послідовність многочленів $\{p_k \mid \deg(p_k) = k\}_{k=0}^{\infty}$ називають *послідовністю (системою) ортогональних многочленів*, якщо

$$(p_n, p_m) = 0, \quad n \neq m. \quad (\text{A.5})$$

Зауваження:

Бачимо, що многочлен p_n ортогональний до всіх многочленів степеня не вище n . А отже його корені можна використовувати як вузли квадратурної формули Гаусса.

Розглянемо деякі важливі властивості послідовностей ортогональних многочленів, які нам будуть в подальшому потрібні:

Твердження 1:

Для вибраної вагової функції існує єдина, з точністю до сталих множників, послідовність ортогональних многочленів.

Доведення:

Щоб побудувати деяку послідовність ортогональних многочленів, достатньо застосувати процес ортогоналізації Грама-Шмідта до системи многочленів $1, x, x^2, x^3, \dots, x^n, \dots$. Покажемо єдиність системи ортогональних многочленів, з точністю до сталих множників. Нехай маємо дві системи ортогональних многочленів

$$\begin{aligned} p_0, p_1, p_2, \dots, p_n, \dots \\ q_0, q_1, q_2, \dots, q_n, \dots \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Бачимо, що коректним є розвинення

$$p_n = \sum_{i=0}^n s_i q_i, \quad (\text{A.7})$$

де s_i – числа. Помноживши скалярно останню рівність на q_m , де $m < n$, отримаємо, що $s_m = 0$. Отже $p_n = s_n q_n$. \square

Зауваження:

Далі, щоб усунути неоднозначність системи ортогональних многочленів вважатимемо, що старші коефіцієнти многочленів дорівнюють одиниці.

Твердження 2:

Многочлен p_n має n простих дійсних коренів на інтервалі (a, b) .

Доведення:

Припустимо, що p_n змінює знак на інтервалі (a, b) m разів і $m < n$. Тоді існує многочлен q_m степеня m такий, що $p_n q_m \geq 0$ на (a, b) , причому на цьому інтервалі існує точка, в околі якої остання нерівність є строгою. Це суперечить тому, що $(p_n, q_m) = 0$. \square

Твердження 3: (про двокрокове рекурентне співвідношення)

Нехай $p_0, p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ – послідовність ортогональних многочленів із старшими коефіцієнтами рівними одиниці, тоді виконуються такі співвідношення:

$$\begin{aligned}
p_0(x) &\equiv 1, \\
p_1(x) &= x - \alpha_0, \\
p_n(x) &= (x - \alpha_{n-1})p_{n-1}(x) - \beta_{n-1}p_{n-2}(x), \quad n \geq 2, \\
\alpha_{n-1} &= \frac{(xp_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-1}, p_{n-1})}, \\
\beta_{n-1} &= \frac{(p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-2}, p_{n-2})}.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Доведення:

Співвідношення для p_0 та p_1 отримуються безпосередньо із алгоритму ортогоналізації Грама-Шмідта та нормування (ділення на старший коефіцієнт). Покажемо виконання третього співвідношення.

Розглянемо різницю $xp_{n-1} - p_n$. Оскільки $\deg(xp_{n-1} - p_n) = n - 1$ то можемо записати

$$xp_{n-1} - p_n = \sum_{s=0}^{n-1} \gamma_s p_s. \tag{A.9}$$

Домножимо отриману рівність скалярно на $p_k, k < n - 2$. Отримаємо, враховуючи ортогональність розглядуваних многочленів,

$$(xp_{n-1}, p_k) - \underbrace{(p_n, p_k)}_{=0} = \gamma_k (p_k, p_k). \tag{A.10}$$

Оскільки $(xp_{n-1}, p_k) = (p_{n-1}, xp_k) = 0$, то остаточно отримаємо, що $\gamma_s = 0, s < n - 2$.

Тепер, перепозначивши $\gamma_{n-1} = \alpha_{n-1}, \gamma_{n-2} = \beta_{n-1}$, отримаємо

$$xp_{n-1} - p_n = \alpha_{n-1}p_{n-1} + \beta_{n-1}p_{n-2}. \tag{A.11}$$

Перегрупувавши доданки, отримаємо потрібне рекурентне співвідношення.

Домноживши останню рівність скалярно на p_{n-1} , тривіально отримаємо поданий на початку твердження вираз для α_{n-1} . Якщо ж домножити скалярно на p_{n-2} , отримаємо

$$\beta_{n-1} = \frac{(xp_{n-1}, p_{n-2})}{(p_{n-2}, p_{n-2})}. \tag{A.12}$$

Покажемо, що $(xp_{n-1}, p_{n-2}) = (p_{n-1}, p_{n-1})$. Для цього розглянемо різницю

$$\begin{aligned} (xp_{n-1}, p_{n-2}) - (p_{n-1}, p_{n-1}) &= (p_{n-1}, xp_{n-2}) - (p_{n-1}, p_{n-1}) = \\ &= (p_{n-1}, \underbrace{xp_{n-2} - p_{n-1}}_{\deg(\dots)=n-2}) = 0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Отже $\beta_{n-1} = \frac{(p_{n-1}, p_{n-1})}{(p_{n-2}, p_{n-2})}$. \square

Введемо позначення $\tilde{p}_k = \frac{p_k}{\|p_k\|}$.

Твердження 4: (формула Крістофеля-Дарбу)

Нехай $p_0, p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ – послідовність ортогональних многочленів із старшими коефіцієнтами, що дорівнюють одиниці, тоді при $x \neq y$ виконується таке співвідношення:

$$\frac{1}{\|p_n\|^2} \cdot \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x - y} = \sum_{k=0}^n \tilde{p}_k(x)\tilde{p}_k(y). \quad (\text{A.14})$$

Доведення:

Використовуючи рекурентне співвідношення для ортогональних многочленів, можемо записати

$$\begin{aligned} p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y) &= [(x - \alpha_n)p_n(x) - \beta_n p_{n-1}(x)]p_n(y) - \\ &\quad - p_n(x)[(y - \alpha_n)p_n(y) - \beta_n p_{n-1}(y)] = \\ &= (x - y)p_n(x)p_n(y) + \beta_n[p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)]. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Враховуючи, що $\beta_n = \frac{\|p_n\|^2}{\|p_{n-1}\|^2}$, поділивши останню рівність на $(x - y)\|p_n\|^2$,

отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|p_n\|^2} \cdot \frac{p_{n+1}(x)p_n(y) - p_n(x)p_{n+1}(y)}{x - y} &= \\ &= \tilde{p}_n(x)\tilde{p}_n(y) + \frac{1}{\|p_{n-1}\|^2} \cdot \frac{p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)}{x - y}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Послідовно застосовуючи цю рівність і враховуючи, що

$$\frac{1}{\|p_0\|^2} \cdot \frac{p_1(x)p_0(y) - p_0(x)p_1(y)}{x - y} = \tilde{p}_0(x)\tilde{p}_0(y), \quad (\text{A.17})$$

отримаємо потрібну тотожність. \square

Наслідок:

Зафіксувавши у формулі Крістофеля-Дарбу x та здійснивши граничний перехід $y \rightarrow x$, отримуємо тотожність

$$\frac{1}{\|p_n\|^2} \cdot [p'_{n+1}(x)p_n(x) - p'_n(x)p_{n+1}(x)] = \sum_{k=0}^n \tilde{p}_k^2(x). \quad (\text{A.18})$$

Знаходження вузлів квадратурної формули Гаусса

Якщо $p_0, p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ – послідовність ортогональних многочленів із старшими коефіцієнтами, що дорівнюють одиниці, тоді задача знаходження вузлів квадратурної формули, яку ми розглядали на початку цього розділу, зводиться до задачі відшукування коренів многочлена p_n . У цьому пункті буде показано, як звести останню задачу до знаходження власних значень симетричної тридіагональної матриці. У наступному пункті буде показано, як на основі власних векторів цієї матриці можна ефективно знайти коефіцієнти квадратурної формули.

Нехай α_i, β_i – коефіцієнти двокрокового рекурентного співвідношення для елементів ортогональної системи $p_0, p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$. Розглянемо послідовність матриць $\{A_k\}_{k=0}^\infty$, де

$$A_k = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \dots & \dots & & & \\ & & \dots & \dots & \dots & & \\ & & & \dots & \alpha_{k-3} & \sqrt{\beta_{k-2}} & \\ & & & & \sqrt{\beta_{k-2}} & \alpha_{k-2} & \sqrt{\beta_{k-1}} \\ 0 & & & & & \sqrt{\beta_{k-1}} & \alpha_{k-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

Позначимо $T_k(\lambda) = \det(\lambda I - A_k)$ – характеристичний многочлен матриці A_k . Вважатимемо, що $T_0(\lambda) \equiv 1$. Використовуючи формулу розвинення визначника за елементами останнього рядка матриці, можна отримати такі співвідношення:

$$\begin{aligned}
T_0(\lambda) &\equiv 1, \\
T_1(\lambda) &= \lambda - \alpha_0, \\
T_n(\lambda) &= (\lambda - \alpha_{n-1})T_{n-1}(\lambda) - \beta_{n-1}T_{n-2}(\lambda), \quad n \geq 2.
\end{aligned}
\tag{A.20}$$

Оскільки останні співвідношення аналогічні до тих, якими задаються многочлени $\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$, то доходимо висновку, що $p_k(x) \equiv T_k(x)$. Отже, для знаходження вузлів квадратурної формули Гаусса порядку n потрібно знайти власні значення матриці A_n .

Знаходження коефіцієнтів

У цьому пункті буде показано, що коефіцієнти формули Гаусса можна виразити через відповідні власні вектори матриці A_n .

Повернемося до співвідношень (A.8). Із перших двох маємо (для зручності опускаємо позначення змінної у многочленах):

$$\begin{aligned}
x - \alpha_0 &= p_1 = \tilde{p}_1 \|p_1\|, \\
\tilde{p}_1 &= (x - \alpha_0) \cdot \frac{\|p_0\|}{\|p_1\|} \cdot \frac{1}{\|p_0\|},
\end{aligned}
\tag{A.21}$$

$\frac{1}{\sqrt{\beta_1}} \quad \tilde{p}_0$

звідки остаточно отримуємо:

$$x\tilde{p}_0 = \alpha_0\tilde{p}_0 + \sqrt{\beta_1} \cdot \tilde{p}_1. \tag{A.22}$$

Використовуючи третє співвідношення (A.8) для $k = \overline{2, n}$, маємо:

$$\begin{aligned}
xp_{k-1} &= p_k + \alpha_{k-1}p_{k-1} + \beta_{k-1}p_{k-2}, \\
xp_{k-1} &= p_k + \frac{(xp_{k-1}, p_{k-1})}{\|p_{k-1}\|^2} p_{k-1} + \frac{\|p_{k-1}\|^2}{\|p_{k-2}\|^2} p_{k-2}, \\
x\tilde{p}_{k-1} &= \frac{\|p_k\|}{\|p_{k-1}\|} \tilde{p}_k + \frac{(xp_{k-1}, p_{k-1})}{\|p_{k-1}\|^2} \tilde{p}_{k-1} + \frac{\|p_{k-1}\|}{\|p_{k-2}\|} \tilde{p}_{k-2}.
\end{aligned}
\tag{A.23}$$

Із використанням уведених позначень останню рівність можна переписати так:

$$x\tilde{p}_{k-1} = \sqrt{\beta_k} \cdot \tilde{p}_k + \alpha_{k-1}\tilde{p}_{k-1} + \sqrt{\beta_{k-1}} \cdot \tilde{p}_{k-2}. \tag{A.24}$$

Співвідношення (A.22) і (A.24) можна записати компактніше:

$$x \cdot \begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2} \\ \tilde{p}_{n-1} \end{pmatrix} = A_n \cdot \begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2} \\ \tilde{p}_{n-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sqrt{\beta_n} \cdot \tilde{p}_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.25})$$

З останнього співвідношення випливає, що власний вектор X^* матриці A_n , що відповідає власному значенню (вузлу) λ^* (кореню \tilde{p}_n), можна знайти за такою формулою:

$$X^* = \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(\lambda^*) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(\lambda^*) \\ \tilde{p}_{n-1}(\lambda^*) \end{pmatrix} \quad (\text{A.26})$$

Перейдемо безпосередньо до знаходження коефіцієнтів. Незавжди можна показати, що квадратурна формула Гаусса – це *формула інтерполяційного типу* і, знаючи її вузли, можна знайти коефіцієнти, використовуючи таку формулу [4]:

$$w_i = \frac{1}{p'_n(x_i)} \cdot \int_a^b \frac{p_n(x)}{x - x_i} \omega(x) dx. \quad (\text{A.27})$$

Ця формула малопридатна для обчислень. Виведемо ефективнішу, з точки зору обчислень, формулу.

У формулі Крістофеля-Дарбу замість n підставимо $n-1$, а замість y – вузол x_i . Як результат, врахувавши, що $p_n(x_i) = 0$, отримаємо

$$\frac{1}{\|p_{n-1}\|^2} \cdot \frac{p_n(x)p_{n-1}(x_i)}{x - x_i} = \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k(x)\tilde{p}_k(x_i) \quad (\text{A.28})$$

Проінтегрувавши останню рівність із вибраною вагою і врахувавши формулу (A.27) отримаємо:

$$w_i = \frac{\|p_{n-1}\|^2}{p_{n-1}(x_i)p'_n(x_i)}. \quad (\text{A.29})$$

Використаємо наслідок з твердження про формулу Крістофеля-Дарбу. Замість n підставимо $n-1$, а замість x – вузол x_i . Отримаємо

$$\frac{p_{n-1}(x_i)p'_n(x_i)}{\|p_{n-1}\|^2} = \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_i). \quad (\text{A.30})$$

Звідки, порівнюючи з попереднім виразом, отримуємо

$$w_i = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_i)}. \quad (\text{A.31})$$

Нехай тепер $X^{(i)}$ – довільний власний вектор, що відповідає власному значенню (вузлу) x_i . Тоді, беручи до уваги те, що всі корені x_i – прості (Твердження 2) і геометрична кратність власного значення (розмірність відповідного власного підпростору) не перевищує його алгебраїчної кратності, можна записати

$$X^{(i)} = c \cdot \begin{pmatrix} \tilde{p}_0(x_i) \\ \vdots \\ \tilde{p}_{n-2}(x_i) \\ \tilde{p}_{n-1}(x_i) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.32})$$

Розглянемо квадрат першої компоненти відповідного нормованого вектора

$$\tilde{X}^{(i)} = \frac{X^{(i)}}{\|X^{(i)}\|}:$$

$$\left(\tilde{X}_1^{(i)}\right)^2 = \frac{\tilde{p}_0^2(x_i)}{\sum_{k=0}^{n-1} \tilde{p}_k^2(x_i)} = \frac{w_i}{\int_a^b \omega(x) dx}. \quad (\text{A.33})$$

Звідси отримуємо остаточну формулу для обчислення коефіцієнтів:

$$w_i = \int_a^b \omega(x) dx \cdot \left(\tilde{X}_1^{(i)}\right)^2. \quad (\text{A.34})$$

Випадок $\omega(x) \equiv 1$

Виведемо формули для обчислення елементів матриці A_n , тобто чисел α_i, β_i , у випадку інтегрування на відрізку $[-1, 1]$ з вагою $\omega(x) \equiv 1$. Отже потрібно обчислити:

$$\alpha_{k-1} = \frac{(xp_{k-1}, p_{k-1})}{(p_{k-1}, p_{k-1})} = \frac{(xp_{k-1}, p_{k-1})}{\|p_{k-1}\|^2},$$

$$\beta_{k-1} = \frac{(p_{k-1}, p_{k-1})}{(p_{k-2}, p_{k-2})} = \frac{\|p_{k-1}\|^2}{\|p_{k-2}\|^2}.$$
(A.35)

Можна показати [4], що у випадку, який ми розглядаємо, справджується співвідношення:

$$p_k(x) = \frac{k!}{(2k)!} \cdot \frac{d^k}{dx^k} [(x^2 - 1)^k].$$
(A.36)

Зауваження:

Ці многочлени називають *многочленами Лежандра*.

З цієї формули випливає, що ненульові коефіцієнти многочлен p_k містить або лише при парних степенях x , або лише при непарних. Звідси робимо висновок, що p_k є або парною, або непарною функцією. Відповідно p_k^2 завжди є парною функцією. А отже функція xp_k^2 – непарна. Враховуючи, що проміжок інтегрування – симетричний відносно нуля, отримуємо:

$$(xp_k, p_k) = \int_{-1}^1 xp_k^2 dx = 0.$$
(A.37)

Отже $\alpha_k = 0$.

Обчислимо тепер квадрат норми многочлена p_k . Позначимо $u_k(x) = (x^2 - 1)^k$, отримаємо:

$$\|p_k\|^2 = \int_{-1}^1 p_k^2(x) dx = \left(\frac{k!}{(2k)!} \right)^2 \cdot \underbrace{\int_{-1}^1 u_k^{(k)} u_k^{(k)} dx}_I$$

$$I = \underbrace{u_k^{(k-1)} u_k^{(k)} \Big|_{-1}^1}_{=0} - \int_{-1}^1 u_k^{(k-1)} u_k^{(k+1)} dx = \dots = (-1)^k \int_{-1}^1 u_k u_k^{(2k)} dx = (-1)^k (2k)! \underbrace{\int_{-1}^1 u_k dx}_J$$

$$\begin{aligned}
 J &= \int_{-1}^1 (x-1)^k (x+1)^k dx = \underbrace{\frac{(x-1)^{k+1}}{k+1} (x+1)^k}_{=0} \Big|_{-1}^1 - \frac{k}{k+1} \int_{-1}^1 (x-1)^{k+1} (x+1)^{k-1} dx = \dots = \\
 &= (-1)^k \frac{(k!)^2}{(2k)!} \cdot \int_{-1}^1 (x-1)^{2k} dx = (-1)^k \frac{(k!)^2}{(2k)!} \cdot \frac{2^{2k+1}}{2k+1}.
 \end{aligned}$$

Отримуємо:

$$\|p_k\|^2 = \frac{(k!)^4 \cdot 2^{2k+1}}{[(2k)!]^2 \cdot (2k+1)}. \quad (\text{A.38})$$

Тепер неважко переконатися, що

$$\beta_k = \frac{k^2}{4k^2 - 1}. \quad (\text{A.39})$$

ДОДАТОК Б. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

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 Kostovski). Ivan Franko National University of Lviv, September 28-30, 2017 – Lviv, 2017. – P. 45–46.