УДК 519.6; 517.925

Ю. Сінчук[1]; Г. Шинкаренко[1,2], докт. фіз.-мат. наук

[1]Львівський національний університет імені Івана Франка
[2]Політехніка опольська

АПОСТЕРІОРНИЙ ОЦІНЮВАЧ ПОХИБКИ АПРОКСИМАЦІЙ МСЕ ДЛЯ ЗАДАЧ КОНВЕКЦІЇ-ДИФУЗІЇ

У статті побудовано апостеріорний оцінювач похибок (АОП) апроксимацій методу скінченних елементів (МСЕ) для сингулярно збурених задач ковекції-дифузії-реакції. Оцінювач знайдено як розв'язок локальної задачі на залишок з використанням експоненціальних апроксимацій. Порівняно запропонований оцінювач із АОП побудованим на базі поліноміальних апроксимацій та точною похибкою. Ефективність та надійність оцінювача ілюструється числовими експериментами, проведеними на модельних задачах.

Y. Sinchuk, G. Shynkarenko

A POSTERIORI ERROR ESTIMATOR OF FEM APPROXIMATION FOR CONVECTION-DIFFUSION-REACTION PROBLEM

In this article has been constructed a posteriori errors estimator (AEE) for finite element method approximations of singularly perturbed convection-diffusion-reaction problem. The estimator is computed by solving a local residual problem using exponential approximation. Has been made a comparison of suggested estimator with AEE constructed by using polynomial basis and with exact error approximation. The efficiency and reliability of estimator is demonstrated by numerical experiments for model problem.

Вступ. Математичне моделювання процесів мігрування субстанції в рухомому суцільному середовищі часто потребує розв'язування крайових задач конвекції-дифузії-реакції, які можуть бути сингулярно збуреними через велику різницю у швидкостях конвективного і дифузійного перенесення субстанції та перебігу хімічних реакцій, що спричиняє виникнення примежових та внутрішніх шарів [1-3]. Добре відомо, що сингулярна збуреність таких задач призводить до втрати стійкості і точності класичних схем методу скінченних елементів [4].

Серед різних технологій МСЕ для усунення згаданих недоліків було запропоновано низку h-адаптивних схем, які є, по суті, рекурентними процедурами послідовного локального покращення апроксимації МСЕ на основі апостеріорного оцінювача похибки. Такі схеми дозволяють досягати наперед заданої точності наближення при мінімальних обчислювальних затратах. Детально побудова h-адаптивних схем для задач конвекції-дифузії описана у працях [5,6] та їх посиланнях.

Важливою проблемою для розробки ефективних h-адаптивних схем є побудова *надійного* апостеріорного оцінювача похибки. Надійність розуміємо в сенсі асимптотичної близькості АОП до точної похибки. Один з відомих способів побудови АОП є відшукання розв'язку локальної варіаційної задачі на залишок. Абстрагуючись від найпростішого одновимірного випадку, ми пропонуємо ідею відшукання розв'язку такої задачі методом Петрова-Гальоркіна з експоненціальними апроксимаціями (L-сплайнами). Отриманий в такий спосіб оцінювач буде давати точні значення похибки в центрах ваг скінченних елементів.

Запропонована тут ідея може бути використана в побудові АОП для задач зі змінними коефіцієнтами, а також для двовимірних задач на прямокутних областях.

Постановка задачі. Звичайним способом із використанням інтегрування частинами крайова задача для рівняння конвекції-дифузії-реакції

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ Lu := -\{\mu u'\}' + \beta u' + \sigma u = f \quad \text{в } \Omega := (0,1), \\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases} \tag{1}$$

переформульовується до задачі про варіаційне рівняння вигляду

$$\begin{cases} \textit{задано простір допустимих функцій } V, \\ \textit{білінійну форму } c(.,.): V \times V \to R \\ \textit{та білінійний функціонал } l: V \to R; \\ \textit{знайти } u \in V \textit{ такий, що} \\ c(u,v) = < l, v > \qquad \forall v \in V, \end{cases} \tag{2}$$

з такими структурними елементами:

$$\begin{cases} V := H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v(0) = v(1) = 0\}, \\ c(u,v) := \int_0^1 \mu u' v' dx + \int_0^1 \beta u' v \, dx + \int_0^1 \sigma uv \, dx, \\ < l, v > := \int_0^1 fv \, dx \qquad \forall u, v \in V. \end{cases} \tag{3}$$

Тут і далі (з метою збереження прозорості міркувань) припускаємо, що задані коефіцієнти μ, β, σ, f – додатні сталі, і, отже, задача (1) коректно поставлена.

Будемо розглядати крайову задачу (1), яка допускає варіаційне формулювання вигляду (2)-(3). Поділимо рівномірно область Ω на N скінченних елементів системою вузлів $\{x_i\}$, $i = \overline{1, N-1}$. Припустимо, що на отриманій в такий спосіб сітці знайдено кусково-лінійну апроксимацію МСЕ

$$u_h \in V_h := \{v \in C(0,1) \cap H_0^1(0,1) : v|_{[x_i, x_{i+1}]} \in P_1(x_i, x_{i+1}), \quad \forall i = 0, ..., N-1\},$$

як розв'язок варіаційного рівняння

$$c(u_h, v) = < l, v > \qquad \forall v \in V_h.$$

Далі нас цікавить можливість конструктивного оцінювання похибки апроксимації u_h, знайденої методом скінченних елементів. Щоб зосередитися на проблемі якості оцінювача, припустимо, що знайдена апроксимація дає точні значення розв'язку в вузлах сітки. Тобто

$$u_i := u_h(x_i) = u(x_i), \tag{4}$$

хоча, для більшості практичних задач отримати скінченноелементну апроксимацію u_h, яка задовольняла б умові (4), складно, ми робимо таке припущення, щоб неточність апроксимації не впливала на значення оцінювача.

Локальна задача на похибку. Похибку на скінченному елементі $T := [x_i, x_{i+1}]$ будемо шукати у вигляді

$$\eta_T(x) = \chi_T(x) e_T,$$

тут $\chi_T(x)$ – функція для апроксимації похибки, а e_T – наближене значення похибки у центрі скінченного елемента $x_T := \dfrac{x_{i+1} + x_i}{2}$. За $\chi_T(x)$ можемо взяти кусково-лінійну або квадратичну функцію, так, щоб виконувалися умови

$$\chi_T(x_T) = 1,$$
$$\chi_T(x_i) = \chi_T(x_{i+1}) = 0.$$

Нехай

$$u(x) = u_h(x) + E_T(x) \qquad \forall x \in T,$$

тоді, поклавши $E_T(x) \approx \eta_T(x)$, на скінченному елементі T маємо локальну задачу на похибку

$$\begin{aligned} & c(\eta_T, \varphi) = < l, \varphi > - c(u_h, \varphi) \quad \forall \varphi \in S \\ & S := \{\varphi \in V \setminus V_h : \varphi(x_i) = \varphi(x_{i+1}) = 0, x \in T\}. \end{aligned} \tag{5}$$

Було доведено (див., наприклад, Ross, Stynes, Tobiska [4]), що вибір L*-сплайнів в якості простору тестових функцій для варіаційної задачі конвекції-дифузії з постійними коефіцієнтами гарантує, що дискретизація Петрова-Гальоркіна дасть точний розв'язок у вузлах сітки, незалежно від вибору простору апроксимацій. Тому, вибираючи відповідним чином функції $\varphi(x) = \varphi_T(x), x \in T$, ми отримаємо наступний вираз для знаходження точного значення похибки в точці x_T.

$$e_T = \frac{< l, \varphi_T > - c(u_h, \varphi_T)}{c(\chi_T, \varphi_T)}. \tag{6}$$

Зауважимо, що, маючи значення $u(x_i)$ та $u(x_T) = u_h(x_T) + e_T$, за формулою (6) ми можемо відшукати значення точного розв'язку в точці $\frac{x_i + x_T}{2}$. Це відкриває шлях до рекурентного уточнення апроксимації u_h.

Побудова базису тестових функцій. Про використання експоненціальних базисних функцій при побудові схем дискретизації задачі конвекції-дифузії детально можна ознайомитися в працях [7-10]. У статті ми лише розглянемо спосіб їх побудови.

Задамо $\varphi_T(x)$ в наступний спосіб

$$\varphi_T(x) := \begin{cases} 0 & x < x_i, \\ \varphi_-(x) & x_i \le x \le x_T, \\ \varphi_+(x) & x_T \le x \le x_{i+1}, \\ 0 & x > x_{i+1}. \end{cases}$$

На скінченному елементі T розглянемо задачі

$$\begin{cases} -\mu\varphi_-'' - \beta\varphi_-' + \sigma\varphi_- = 0 & на\ [x_i, x_T], \\ \varphi_-(x_i) = 0; \quad \varphi_-(x_T) = 1; \end{cases}$$

та

$$\begin{cases} -\mu\varphi_+'' - \beta\varphi_+' + \sigma\varphi_+ = 0 & на\ [x_T, x_{i+1}], \\ \varphi_+(x_T) = 1; \quad \varphi_+(x_{i+1}) = 0; \end{cases}$$

розв'язки яких мають вигляд:

$$\varphi_-(x) = \frac{\exp[x\lambda_1 + x_i\lambda_2] - \exp[x_i\lambda_1 + x\lambda_2]}{\exp[x_T\lambda_1 + x_i\lambda_2] - \exp[x_i\lambda_1 + x_T\lambda_2]} \quad x \in [x_i, x_T],$$

$$\varphi_+(x) = \frac{\exp[x_{i+1}\lambda_1 + x\lambda_2] - \exp[x\lambda_1 + x_{i+1}\lambda_2]}{\exp[x_{i+1}\lambda_1 + x_T\lambda_2] - \exp[x_T\lambda_1 + x_{i+1}\lambda_2]} \quad x \in [x_T, x_{i+1}],$$

де $\lambda_1 = \frac{-\beta - \sqrt{\beta^2 + 4\mu\sigma}}{2\mu}$ $\lambda_2 = \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 + 4\mu\sigma}}{2\mu}$ – корені характеристичного рівняння

$$\mu\lambda^2 + \beta\lambda - \sigma = 0.$$

Функції $\varphi_-(x)$ та $\varphi_+(x)$ в літературі називають *L*-сплайнами*. Графік $\varphi_T(x)\ x \in [0,1]$ для коефіцієнтів $\mu = 0.1, \beta = 1, \sigma = 1$ зображено на рис. 1.

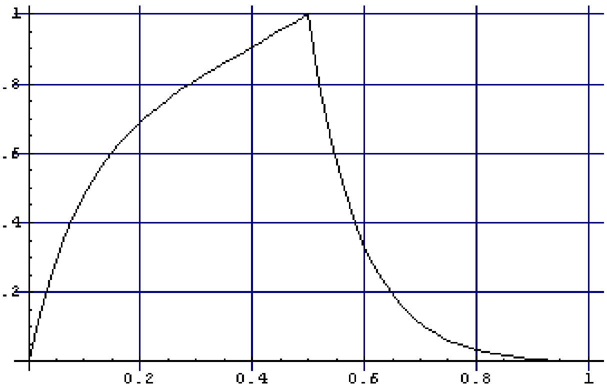

Рисунок 1 - Графік функції функції $\varphi_T(x)$

Для випадку $\sigma = 0$, власні значення

$$\lambda_1 = -\frac{\beta}{\mu}, \quad \lambda_2 = 0.$$

Тоді функції $\varphi_-(x)$ та $\varphi_+(x)$ є звичайним експоненціальним базисом (див. Сінчук, Шинкаренко [10]) вигляду

$$\varphi_-(x) = \frac{-a^{x_i} + a^x}{-a^{x_i} + a^{x_T}} \quad x \in [x_i, x_T],$$

$$\varphi_+(x) = \frac{-a^{x_{i+1}} + a^x}{-a^{x_{i+1}} + a^{x_T}} \quad x \in [x_T, x_{i+1}],$$

де $a = \exp\left[-\frac{\beta}{\mu}\right]$.

Обрахунок похибки. Для обчислення похибки за формулою (6) нам необхідно знаходити значення білінійних форм вигляду $c(v, \varphi_T)$, де v - деяка лінійна на елементі T функція. Після невеликих алгебричних перетворень зауважимо, що

$$c(v, \varphi_T) = \mu\left[-v(x_T)[\varphi']_T - \varphi'_-(x_i)v(x_i) + \varphi'_+(x_{i+1})v(x_{i+1})\right], \tag{7}$$

де через $[\varphi']_T := \varphi'_+(x_T) - \varphi'_-(x_T)$ позначено стрибок похідної функції $\varphi_T(x)$ в точці $x = x_T$.

Поклавши в (6)

$$u_h = u_i v_i(x) + u_{i+1}v_{i+1}(x) \quad \forall x \in T,$$

де

$$v_i(x), v_{i+1}(x) \in V_h,$$

маємо

$$e_T = \frac{< l, \varphi_T > - u_i c(v_i, \varphi_T) - u_{i+1}c(v_{i+1}, \varphi_T)}{c(\chi_T, \varphi_T)}. \tag{8}$$

З формул (7) та (8) одержимо

$$e_T = \frac{\frac{1}{\mu} < l, \varphi_T > - \{u_i[-0.5[\varphi]_T - \varphi'_-(x_i)] + u_{i+1}[-0.5[\varphi]_T - \varphi'_+(x_{i+1})]\}}{-[\varphi]_T}.$$

Зауваживши, що $u_h(x_T) = \frac{u_i + u_{i+1}}{2}$, отримаємо формулу для знаходження похибки апроксимації u_h в центрі скінченного елемента T

$$e_T = \frac{\frac{f}{\mu}\int_T \varphi_T dx + \varphi'_+(x_{i+1})u_{i+1} - \varphi'_-(x_i)u_i}{-[\varphi]_T} - u_h(x_T).$$

Результати числових експериментів. Тепер порівняємо поведінки оцінювача і точної похибки, обчислені для тестового прикладу. Розрахунок було проведено для задачі (1) з такими даними: $\mu = 0.01, \beta = 1, \sigma = 1, f = 1$.

Для характеристики АОП використано наступні позначення: $\gamma := \frac{\eta_{max}}{E_{max}}$;

$$\eta_{max} := \max_T \sqrt{\int_T \eta_T^2};$$

$$E_{max} := \max_T \sqrt{\int_T \{u(x) - u_h(x)\}^2};$$

$$\eta_\Omega := \sum_T \sqrt{\int_T \eta_T^2};$$

$$E_\Omega := \sum_T \sqrt{\int_T \{u(x) - u_h(x)\}^2}.$$

Взявши за $\chi_T(x)$ квадратичну функцію $\chi_T(x) = \frac{4(x - x_i)(x_{i+1} - x)}{(x_{i+1} - x_i)^2}$ $x \in T$, отримаємо оцінювач, характеристики якого наведено в табл. 1.

Таблиця 1 - Порівняння оцінювача на основі квадратичної функції з точною похибкою

N	η_{max}	E_{max}	η_Ω	E_Ω	γ	$\max_T e_T$
8	0.0810397	0.1060580	0.0810447	0.1060620	0.764104	0.313866
16	0.0526231	0.0601329	0.0526238	0.0601335	0.875114	0.288229
32	0.0255568	0.0267091	0.0255803	0.0267337	0.956858	0.197962
64	0.0085434	0.0086465	0.0087317	0.0088370	0.988081	0.093589
128	0.0021556	0.0021623	0.0024199	0.0024273	0.996984	0.033395

Тут число γ позначає коефіцієнт ефективності оцінювача. Власне відношення оціненої і точної похибки і є критерієм надійності побудованого АОП. З наближенням значення γ до 1 при згущенні сітки ми робимо висновок про асимптотичну точність нашого оцінювача.

В табл. 2 наведені результати обчислень для оцінювача, знайденого за схемою, запропонованою в [11], де для знаходження розв'язку варіаційної задачі (5) використано класичний метод Гальоркіна з квадратичними базисними функціями

$$\chi_T(x) = \varphi_T(x) = \frac{4(x - x_i)(x_{i+1} - x)}{(x_{i+1} - x_i)^2} \quad x \in T.$$

Таблиця 2 - Значення оцінювача, знайденого методом Гальоркіна

N	η_{max}	η_Ω	γ	$\max_T e_T$
8	0.2331890	0.2331910	2.19869	0.903139
16	0.0888538	0.0888543	1.47762	0.486672
32	0.0305683	0.0305963	1.14449	0.236781
64	0.0089777	0.0091755	1.03830	0.0983457
128	0.0021834	0.0024510	1.00977	0.0338237

Помітно, що в першій таблиці значення оцінювача є досить близькими до точної похибки. Слід відзначити, що оцінки похибок, обчислених за останньою схемою (див. табл. 2) при N=8 та N=16, сильно завищені, тоді як на густих сітках є також досить точними.

Висновки. Основним результатом даної роботи є схема побудови високоточного оцінювача похибки для одновимірної сингулярно збуреної задачі конвекції-дифузії-реакції. Наведений аналіз числових експериментів підтверджує його надійність та ефективність. На жаль, описану схему побудови оцінювача не вдалося узагальнити на двовимірну задачу з довільною геометрією області. Це пов'язано з проблемою побудови експоненціальних апроксимацій на трикутних скінченних елементах. Але запропонований підхід може ефективно використовуватися для знаходження оцінки похибок з високою точністю для задач на прямокутних областях. Це вирішує проблему ефективної реалізації адаптивних схем методу скінченних елементів для такого класу задач. Отже, дає можливість відшукання стійкої апроксимації розв'язку сингулярно збурених задач з наперед заданою точністю при оптимальних обчислювальних затратах.

Література

1. Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. - М.: Мир, 1983. - 200с.
2. Кухарський М., Савула Я., Головач Н. Стабілізація розв'язків задач адвекції дифузії з великими числами Пекле, отриманих засобами методу скінченних елементів // Моделювання та інформаційні технології. - 2002 . - Вип.15. - С. 3-14.
3. Кухарський В.М., Савула Я.Г., Чапля Є.Я. Чисельне моделювання конвективного теплопереносу в середовищі з тонким капіляром // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. - 1995. - С.51-56.
4. Roos H.-G., Stynes M., Tobiska L. Numerical Methods for Singular Singularly Perturbed Differential Equations. - Berlin: Springer, 1995. - 348 p.
5. Козаревська Ю. С., Шинкаренко Г. А. Регуляризація чисельних розв'язків варіаційних задач міграції домішок: h-адаптивний метод скінченних елементів. Частина 1. // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформ. – 2002. - Вип. 5. - С.153-164.
6. Verfurth R. A posteriori error estimator for convection-diffusion problem // Numer. Math. - 1998 - Vol. 80. - P. 641–663.
7. Мандзак Т.І., Савула Я.Г. Пониження вимірності математичної моделі адвекції-дифузії у тонкому включенні з використанням експоненційних апроксимацій // Волинський математичний вісник. Сер. прикл. матем. – 2004. – Вип. 2 (11). – С. 52-57.
8. Мандзак Т.І., Савула Я.Г. Гетерогенна крайова задача математичної моделі адвекції-дифузії у середовищі з включенням // Прикл. проблеми мех. матем. – 2006. – Вип. 3. – С. 150-158.
9. Sacco R., Stynes M. Finite element methods for convection-diffusion problems using exponential splines on triangles // Comput. Math. Appl. - 1998 - Vol. 35 No. 3, - P.35 - 45.
10. Сінчук Ю.О., Шинкаренко Г.А. Експоненціальні апроксимації МСЕ для сингулярно збурених задач конвекції-дифузії-реакції // Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. інформ. - 2007 - Вип.12. - С.112-121.
11. Абрамов Є., Ліпіна О., Шинкаренко Г., Ямелинець А. Кусково-лінійні апроксимації h-адаптивного методу скінченних елементів для одновимірних крайових задач // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформ. – 2006. - Вип.11. - С.3-18.

Одержано 17.01.2008 р.