Основи екології
(Математичні проблеми охорони довкілля)

Шинкаренко Г.А.

19 лютого 2006 р.

Передмова

Цей навчальний посібник містить дещо розширений матеріал семестрового курсу "Основи екології", який в різних варіантах читається автором з 1997 року студентам четвертого курсу факультету прикладної математики та інформатики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Пережиті людством у останньому столітті неконтрольовані екологічні катаклізми (озонові діри, глобальне потепління тощо) та катастрофи, зумовлені його ж постійним натиском на живий покрив Землі та решту її ресурсів, і занепокоєння відносно майбутнього цивілізації збудили величезну кількість прогнозів - містичних, фантастичних та наукових. З ними ми постійно знайомимось у творах мистецтва і популярній та науковій літературі, на малу частку якої ми посилаємось в цьому тексті. Як підсумок можна константувати, що найважливішими для людства проблемами (які стосуються кожного з нас) є

- *раціональне використання* (менеджмент),
- *охорона* (аналіз і контроль),
- *відновлення і примноження* (оптимальне керування)

ресурсів біосфери. Для їхнього розв'язання недостатньо мати загальне уявлення про закони, яким підпорядковуються процеси в біосфері, а необхідно вміти знаходити їхні кількісні характеристики і передбачати наслідки здійснюваних підприємств.

З огляду на те, що наші знання повинні відповідати сучасному світобаченню і бути фахово орієнтованими, вибір тематики даного курсу переслідує наступні цілі:

- по-перше, окреслити екологію, як міждисциплінарну науку про механізми взаємодії складових живої та неживої природи на Землі в період індустріального суспільства, вирішення багатьох проблем якої вимагає не лише консенсусу інтелектуалів різного фаху (включаючи політиків та урядовців) однієї нації, а й результатів активної міжнародної співпраці (глобальність проблем);
- по-друге, ознайомити слухача із фундаментальними моделями екологічних систем як теорією еволюції активних відкритих середовищ , дослідження яких вимагає суттєвого поєднання методів якісного та числового аналізу з комп'ютерними імітаційними та геоінформаційними технологіями (структури математичного моделювання проблем);
- і, по-третє, подати принципи побудови інформаційно-аналітичних систем моніторингу та підтримки прийняття управлінських рішень стосовно використання та охорони довкілля (контрольованість та керованість проблемами).

Моє ставлення до екологічних проблем остаточно визначилось під впливом світогляду Н. Моісеєва, викладеному ним в працях [80, 81] та його лекціях, які я мав щастя відвідувати. Поштовхом до моїх власних досліджень з питань математичного моделювання в проблемі охорони довкілля послужила фундаментальна монографія Г. Марчука [72] та власний досвід застосувань методу скінченних елементів в задачах механіки суцільного середовища. Безцінним надбанням для мене стала участь в проектах створення автоматизованих систем ведення державного земельного і містобудівного кадастрів та моніторигу земельних ресурсів України, які були ініційовані Львівською обласною державною адміністрацією в 1993-97 рр. І, нарешті, моя зацікавленість медичними аспектами синергетики привела до розуміння, що ми живемо в час активної математизації біології і знаходимось на порозі її великих відкрить за допомогою комп'ютерного моделювання.

Всім, хто сприяв і допомагав мені на цьому шляху пізнання, я виражаю щиру подяку і наперед вибачаюсь, якщо мені не вдалось на сторінках цього курсу донести раціональне зерно наших дискусій і результати спільної праці.

Принагідно хочу нагадати слова подружжя Медавар [77]: *Всю біологію на всіх її рівнях пронизує ... поняття про цикли. Біологічний процес в цілому - це цикли, які містять цикли, які в свою чергу містять цикли ... Самими важливими, природно, є цикли, що визначаються впливом космосу, - сезонні і добові: вся діяльність живих організмів визначається ними і пристосовує до них свої ритми.*

Кожен, хто зі шляхетними намірами входить у вічний цикл

$$\textit{Рішення} \to \textit{Дія} \to \textit{Інформація} \to \textit{Аналіз} \to \textit{Рішення} \to \ \ldots$$

заради пізнання Життя [1], знайде на сторінках цієї книги багато корисного, що поєднує математику та інформатику з гуманітарними проблемами сучасного суспільства. бажаю успіхів.

.

[1] Той, хто пізнав інших,
володіє знанням,
а хто пізнав себе, — мудрий.

(Китайська мудрість)

Зміст

Вступ

Теоретичні основи взаємодії сучасного індустріального суспільства з природою вивчає *екологія.* Назва цієї науки походить від грецького терміну “ойкос” — дім, помешкання, місцезнаходження - і певною мірою відображає прагнення проаналізувати

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{закономірності тривалого співіснування}\\ \textit{живої та неживої природи в нашому}\\ \textit{спільному помешканні - планеті Земля.}\end{array}\right. \tag{0.0.1}$$

Діяльність людини та суспільства сьогодні супроводжується все більш і більш інтенсивним використанням природних ресурсів планети, набула глобальних масштабів, створюючи цим самим сильну загрозу для

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{існування динамічної рівноваги}\\ \textit{процесів природного середовища.}\end{array}\right. \tag{0.0.2}$$

Одним із найнебезпечнічих факторів впливу людини на довкілля є його *хімічне забруднення* різноманітними продуктами діяльності або відходами промисловості. Кожен з нас може навести безліч прикладів, коли в різних масштабах

навколишнє природне середовище

поступово починало перетворюватись в

колишнє природне середовище

і, врешті-решт, у

лишне неприродне середовище.

Лише цей один аспект взаємодії людства з рештою природи показує, що "людство настільки близьке до безодні, що йому необхідно під страхом зникнення в ній відповідати за кожен крок на своєму шляху" [Сен-Марк, 1977].

1. Пов'язуючи елементи живої природи (організми, популяції, угрупування) та фізичного середовища їх перебування деякими механізмами підтримки обміну енергією та речовиною в певні системи (*екологічні системи*), екологія намагається проаналізувати їхню еволюцію під впливом

- *абіотичних факторів:* сонячна радіація, рельєф місцевості, клімат, грунт тощо;
- *біотичних факторів:* рослини, тварини, мікроорганізми;

- *антропогенних факторів:* люди, суспільство.

Якщо вектори $u(t)$ та $p(t)$ характеризують стан біологічної та фізичної складових екосистеми на момент часу t її життя, то, згрубше кажучи, в екології мова йде про побудову та дослідження систем вигляду

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} u(t) \\ p(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{11} & \mathcal{A}_{12} \\ \mathcal{A}_{21} & \mathcal{A}_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{F}_1(t) \\ \mathcal{F}_2(t) \end{bmatrix}, \tag{0.0.3}$$

де набір операторів $\{\mathcal{A}_{ij}\}$ визначає механізми енергетичного обміну (кругообігу) між складовими екосистеми, а компоненти $\{\mathcal{F}_i(t)\}$ описують міри впливу зовнішніх природних та антропогенних чинників відповідно. Оскільки тривале існування екосистеми

Слід відзначити наступні важливі обставини, пов'язані зі специфікою моделювання екологічних систем.

(!) На сьогодні існує небагато моделей, які хоча б в грубому наближенні описували основні параметри екосистем. Трудність полягає в незнанні законів внутрішньої логіки *самоорганізації живої матерії* і відсутності необхідного набору фактичних даних, що знижує адекватність математичних моделей. Вірогідність таких екомоделей в більшості випадків може бути встановлена лише на історично достеменних фактах, досить віддалених від нас в часі. Проведення належних експериментів для співставлення результатів теоретичного моделювання та даних натурних випробувань часто взагалі неможливе.

Отже, оскільки виявлення закономірностей завжди пов'язане зі збиранням і систематизацією всього багатоманіття спостережень, то питання *організації та проведення моніторингу екосистем* завжди будуть актуальними.

(!!) У більшості випадків аналіз екосистем вимагає залучення величезної кількості інформації географічного походження, яка десятиліттями традиційно накопичувалась у вигляді паперового планово-картографічного матеріалу. Тому аналіз екологічних проблем завжди буде впиратися у наявність великих *баз даних графічної та семантичної інформації*, які можуть містити неповні, а часом і помилкові характеристики і відомості відносно досліджуваних процесів та явищ.

Таким чином, один із перспективних напрямків розвитку екосистемного аналізу може бути побудований на сумісному застосуванні сучасних засобів математичного моделювання та геоінформаційних технологій.

2. З точки зору екології від прикладної математики та інформатики можна сподіватися вирішення наступних проблем:

- *побудова математичних моделей еволюції екосистем* ;
- *оцінки чутливості екосистем до зміни природних та антропогенних навантажень*;
- *створення засобів комп'ютерного імітаційного моделювання взаємодії складових екосистем* ;
- *розвиток системи моніторингу довкілля* ;
- *формування надійних критеріїв підтримки прийняття управлінських рішень* ;
- *функціонування мереж розподілених багатоцільових автоматизованих інформаційно-аналітичних систем моніторингу та охорони довкілля* .

Частина I

Концептуальні моделі екології

Ми починаємо розглядати екологію як певне вчення про взаємодію живої і неживої природи нашої планети, яке засноване на певному наборі даних про характерні явища та процеси, які попередньо систематизовані і класифіковані за певними ознаками і описані у вигляді текстів, малюнків, таблиць тощо. Таким чином впорядковані знання ми будемо називати *концептуальними моделями* екологічних систем. Більше цього, до екологічних систем ми будемо відносити лише такі динамічні системи, структури яких наділені наступними властивостями:

(!) стійкість та автономність, здатність до самоорганізації та збереження життєвих процесів;

(!!) неможливість приєднання (вилучення) окремих компоненнт без порушення якісної цілісності розглядуваної системи.

Нижче ми наводимо декілька прикладів базових екологічних систем: біосфера, біогеоценоз та біоценоз.

Біосфера нашої планети є найбільш складною екологічною системою, яка доступна людству для безпосереднього вивчення. Існування біосфери підтримується за умов стійкої природної рівноваги, зумовленої постійним притоком енергії від Сонця та її випроміненням Землею у космічний простір. Потоки цієї енергії породжують різноманітні фізичні, хімічні та біологічні процеси, які пов'язують між собою в єдине ціле атмосферу (з масою $\simeq 5.15 \cdot 10^{18}$ *кг*), океан ($\simeq 1.45 \cdot 10^{21}$ *кг*), сушу ($\simeq 5.97 \cdot 10^{24}$ *кг*) та живу речовину ($\simeq 10^{15}$ *кг*) нашої планети [2].

Межі зони життя (біосфери) планети в значній мірі визначились можливістю підтримки фотосинтезу у автотрофних рослин, оскільки майже вся маса живої речовини існує внаслідок перерозподілу енергії сонячної радіації, яка засвоєна автотрофними рослинами. Дослідження показують, що

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{процес фотосинтезу здійснюється}\\ \textit{в доволі вузькому інтервалі температур,}\\ \textit{за наявності доступної для рослин води,}\\ \textit{певних концентрацій вуглекислого газу } CO_2\\ \textit{та необхідної мінеральної речовини.}\end{array}\right. \tag{0.0.1}$$

Суттєвою умовою фотосинтезу є поглинання рослинами достатної кількості сонячної радіації в певному інтервалі довжин хвиль.

Власне біосфера планети формує довкілля людини, яке поділяють на три складові.

Атмосфера — повітряна оболонка нашої планети, яка безпосередньо контактує з космічним простором. Її основна маса зосереджена в найближчому до поверхні Землі шарі — *тропосфері* .

Гідросфера — водна оболонка нашої планети. Вона складається із тісно взаємопов'язаних частин

(!) *поверхневі води* (ріки, озера, моря, океани);

(!!) *підземні води* (сукупність всіх вод, що залягають безпосередньо у верхніх шарах земної кори).

Літосфера — зовнішня оболонка планети, яка містить земну кору (верхні горизонти земної товщі) та верхню частину мантії.

---

[2]Радіус Землі становить $\cong 6371$ *км.*

Площа суші $\cong 149 \cdot 10^6$ *км*^{2} (29 відсотків площі поверхні Землі).

Площа океанів $\cong 361 \cdot 10^6$ *км*^{2} .

Товщина атмосфери $\cong 2000$ *км*, але $\frac{2}{3}$ її маси зосереджено в тропосфері, яка має висоту $\cong 20$ *км.*

Геометрично верхня межа біосфери визначається приблизно $10-15$ *км* шаром атмосфери, а нижня знаходиться в літосфері на глибинах $3-5$ *км*. Якщо прийняти до уваги, що радіус Землі $\simeq 6371$ *км*, то можна бачити, що біосфера утворює надзвичайно тонку плівку в околі межі контакту атмосфери з літосферою.

Жива речовина біосфери (біомаса) розподілена на поверхні континентів, в грунті та верхніх шарах водойм. Густина розподілу цієї маси по поверхні планети в середньому становить $\simeq 1\ \frac{г}{см^2}$.

Таким чином, жива речовина біосфери — дивовижний атрибут нашої планети — складає надзвичайно тонку, вибагливу і делікатну плівку Землі, яка визначилась

- *місцепроходженням глобального круговороту речовини та енергії планети* ;
- *можливостями підтримки фотосинтезу у автотрофних рослин* .

Певне уявлення про складність моделювання процесів в біосфері надає наступна

Вправа 0.0.1. *Виділимо подумки просторову область* $\Omega := \Omega_r \times \Omega_\phi \times \Omega_\theta$, *яку займає біосфера Землі. Зрозуміло, що її природно описати в сферичних координатах* (r, ϕ, θ), *які пов'язані з декартовими прямокутними координатами* (x_1, x_2, x_3) *співвідношеннями*

$$\begin{cases} x_1 := r \sin\theta \cos\phi, & r \in \Omega_r := (R_-, R_+),\ R_- < R_+, \\ x_2 := r \sin\theta \sin\phi, & \phi \in \Omega_\phi := (0, 2\pi), \\ x_3 := r \cos\theta, & \theta \in \Omega_\theta := (0, \pi). \end{cases} \tag{0.0.2}$$

Координати (r, ϕ, θ) *називають сферичним радіусом, довготою та широтою відповідно. В цій системі криволінійних ортогональних координат градієнт скалярної функції* $u = u(r, \phi, \theta)$ *і дивергенція вектора* $w = (w_r(r, \phi, \theta), w_\phi(r, \phi, \theta), w_\theta(r, \phi, \theta))$ *мають вигляд*

$$\begin{cases} \nabla u := \{\frac{\partial}{\partial r} u,\ \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} u,\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} u\}, \\ \nabla .\, w := \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 w_r) + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} w_\phi + \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\, w_\theta). \end{cases} \tag{0.0.3}$$

Звідси легко визначити лапласіан скалярної функції

$$\Delta u := \nabla .\, \nabla u := \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \frac{\partial}{\partial r} u) + \frac{1}{(r \sin\theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} u + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} u). \tag{0.0.4}$$

Для майбутнього відзначимо, що елементи об'єму dv *та координатних поверхонь* $d\gamma$ *визначаються так*

$$\begin{cases} dv := r^2\ \sin\theta\, dr\, d\phi\, d\theta, \\ d\gamma := r^2\ \sin\theta\, d\phi\, d\theta \quad \text{для} \quad r = const, \\ d\gamma := r^2\ \sin\theta\, d\phi\, d\theta \quad \text{для} \quad \phi = const, \\ d\gamma := r^2\ \sin\theta\, d\phi\, d\theta \quad \text{для} \quad \theta = const. \end{cases} \tag{0.0.5}$$

Будемо припускати, що розподіл температури $u = u(r, \phi, \theta, t)$ *в об'ємі біосфери визначається добре відомим рівнянням теплоперенесення*

$$c_v \rho \frac{\partial}{\partial t} u + w .\, \nabla u - \lambda \Delta u = f \quad \text{в} \quad \Omega \times (0, T]. \tag{0.0.6}$$

Тут $\rho = \rho(r, \phi, \theta)$ — *густина маси субстанції біосфери,* $c_v = c_v(r, \phi, \theta)$ *та* $\lambda = \lambda(r, \phi, \theta)$ — *її коефіцієнти теплоємності при постійному об'ємі та теплопровідності відповідно,* $w =$

$w(r,\phi,\theta,t)$ — заданий кусково-визначений вектор швидкості руху частинок атмосфери, гідросфери та літосфери.

(!) Для завершення формулювання моделі теплового режиму біосфери у вигляді початково-крайової задачі доповніть рівняння теплоперенесення (0.0.6) належними

- *крайовими умовами на нижній та верхній межах біосфери ;*
- *умовами періодичності (оскільки обмежена сфера не має меж!);*
- *умовами теплового контакту атмосфери з сушею і поверхневими водами планети*
- *та відповідними початковими умовами .*

(!!) Побудуйте варіаційне формулювання знайденої початково-крайової задачі теплоперенесення в біосфері.

(!!!) Проаналізуйте умови коректності цього формулювання.

Відзначте для себе ті труднощі, з якими ви зіштовхнулися при виконанні цього завдання і проаналізуйте причини.

Спробуємо побудувати варіаційне рівняння теплоперенесення в біосфері. З цією метою формально домножимо рівняння (0.0.6) на довільну функцію $v = v(r,\phi,\theta)$ і проінтегруємо по області $\Omega := \Omega_r \times \Omega_\phi \times \Omega_\theta$; після інтегрування частинами одержимо рівняння

$$\left\{\begin{aligned} 0 &= \int_\Omega \{c_v\rho\frac{\partial}{\partial t}u + w.\nabla u - \lambda\Delta u - f\}vr^2 \sin\theta\, dr\, d\phi\, d\theta \\ &= \int_\Omega \{\,[\,c_v\rho\frac{\partial}{\partial t}u + w.\nabla u - f\,]v + \lambda\nabla u.\nabla v\}\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\phi\, d\theta \\ &\quad - \int_{\partial\Omega}\{\lambda\nabla u.\, nv\}\, d\gamma \end{aligned}\right. \tag{0.0.7}$$

Тепер ми введемо важливу фізичну характеристику процесу теплопровідності — вектор теплового потоку

$$q(u) := -\lambda\nabla u \quad \text{в} \;\; \Omega\times(0,T] \tag{0.0.8}$$

і перепишемо рівняння (0.0.8) в нових термінах

$$\left\{\begin{aligned} 0 &= \int_\Omega \{\,[\,c_v\rho\frac{\partial}{\partial t}u + w.\nabla u - f\,]v - q(u).\nabla v\}\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\phi\, d\theta \\ &\quad + \int_{\partial\Omega}\{vq(u).\, n\}\, d\gamma \end{aligned}\right. \tag{0.0.9}$$

Важливим прикладом екологічної системи є *басейн ріки* [3] , відокремлений контуром водорозділу від басейнів сусідніх річок. Завдяки особливостям поверхні *рельєфу* і притаманного цій території гідравлічного режиму на ній складається унікальний *мікроклімат*

[3] Річковий басейн — це площа, з якої стік атмосферних опадів надходить у головний водотік (чи відрізок водотоку) та його притоки. Річковий басейн обмежується лінією водорозділу, яка відокремлює його від сусідніх басейнів. Межа річкового басейну і межа басейну підземних вод, який знаходиться під ним, іноді не співпадають.

Басейн притоки завжди входить до складу басейну головної річки, яка безпосередньо впадає в море. Кожен водотік, навіть маленький потічок, володіє своїм водозбірним басейном. Процеси стоку вивчає гідрологія поверхневих вод, див., наприклад, Де Уіст [107].

і, як наслідок, унікальні *флора та фауна.* Така екосистема може існувати тривалий період часу і її еволюція буде відносно *автономною* від стану водозборів сусідніх рік. Тому

$$\left\{\begin{array}{l}\textit{басейн ріки з притаманними йому особливостями}\\ \textit{рельєфу, мікроклімату та біоти}\\ \textit{подає змістовний приклад біогеоценозу}\\ \textit{з яскраво вираженими властивостями}\\ \textit{самоорганізації та автономності своєї еволюції.}\end{array}\right. \tag{0.0.10}$$

Вправа 0.0.2.

Виділимо територію $\Omega \subset \mathbb{R}^2$*, рельєф якої описується заданою функцією* $x_3 = f(x_1, x_2) \geq 0$*, де* (x_1, x_2) *— географічні координати точки і* x_3 *— висота підняття денної поверхні Землі над рівнем моря.*
1. На території Ω *визначити систему кривих* $\phi_i(x_1, x_2) = 0,\ i = 1,\ \ldots\ ,$ *які описують:*
(!) контури водорозділів басейнів можливих річок;
(!!) русла можливих річок та яруг.

Якими залежностями повязані між собою просторові криві водорозділів та русел ?
2. Визначити площу поверхні рельєфу окремо взятого басейну та площу її проекції на горизонтальну площину Ox_1x_2*.*
3. Знайти довжину гідромережі басейну річки.
4. Запропонуйте свою модель даних для зберігання та аналізу інформації про морфологічну структуру водозбору.

Відзначте для себе ті труднощі, з якими ви зіштовхнулися при виконанні цього завдання і проаналізуйте їхні можливі причини.

Якщо на додаток до цього зауважити, що територія кожного регіону земної суші єдиним чином (і без перетинів) поділяється контурами водорозділів на ареали відносно незалежних екосистем, то така природна декомпозиція створює надійну основу для проведення екосистемного аналізу стану та прогнозування розвитку цього регіону.

Частина II

Методи математичного моделювання в проблемах екології

Розділ 1

Хімічне забруднення довкілля

Прогнозування наслідків мігрування певної субстанції (тепла, вологи, поживних речовин, забруднюючих домішок тощо) є важливою передумовою вирішення різноманітних проблем охорони довкілля, планування розвитку територій та сучасних технологій. Нижче всі процеси, основні характеристики яких визначаються механізмами *дифузії* розглядуваної субстанції, її *перенесення* рухомими частинками довкілля та *біохімічного розпаду*, будемо називати процесами *мігрування субстанції.*

Ще тридцять років тому К. Уатт дійшов висновку, що найбільшу загрозу для існування людства становить не перенаселення і нестача продуктів харчування, а всезростаюче хімічне забруднення довкілля.

Поряд із очевидною актуальністю і важливістю застосувань, знаходження розподілів концентрації субстанції, що нас цікавить, вимагає формулювання та аналізу належних математичних моделей, кваліфікованого використання сучасних числових методів та їхньої комп'ютерної реалізації.

1.1 Фундаментальні рівняння мігрування субстанції

Нехай область Ω є зв'язною обмеженою множиною точок $x = \{x_i\}_{i=1}^d$ евклідового простору $\mathbb{R}^d$ (в застосуваннях $d = 1, 2$ або 3) з неперервною за Ліпшицем межею Γ, і вектор $n = \{n_i(x)\}_{i=1}^d$ визначає одиничний вектор зовнішньої нормалі до межі області Ω, $n_i := cos(n, x_i)$. Розглянемо крайову задачу для еліптичного рівняння другого порядку наступного вигляду:

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\textit{задано матрицю коефіцієнтів дифузії} \quad \mu = \{\mu_{ij}(x)\}_{i,j=1}^{d}, \\
\qquad\qquad \textit{вектор швидкості конвективного перенесення} \quad \beta = \{\beta_i(x)\}_{i=1}^{d}, \\
\qquad\qquad \textit{коефіцієнт біохімічного розпаду} \ \ \sigma = \sigma(x), \\
\qquad\qquad \textit{інтенсивність розподілених джерел субстанції} \ \ f = f(x), \\
\qquad\qquad \textit{коефіцієнт взаємодії субстанції з довкіллям} \ \ \kappa = \kappa(x), \\
\qquad\qquad \textit{потік субстанції на межі області} \quad g = g(x); \\
\textit{знайти функцію} \ \ u = u(x) \ \textit{таку, що} \\
\qquad\qquad Lu := -\dfrac{\partial}{\partial x_i}\{\mu_{ij}\dfrac{\partial}{\partial x_j}u\} \\
\qquad\qquad\qquad\qquad + \beta_j \dfrac{\partial}{\partial x_j}u + \sigma u = f \qquad \textit{в} \quad \Omega, \\
\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad u = 0 \qquad \textit{на} \quad \Gamma_D \subset \Gamma, \ mes(\Gamma_D) \geq 0, \\
\qquad\qquad\qquad - n_i \mu_{ij} \dfrac{\partial}{\partial x_j}u - \kappa u = g \qquad \textit{на} \quad \Gamma_N := \Gamma \backslash \Gamma_D.
\end{array}
\right. \tag{1.1.1}
$$

Тут і далі за індексами, які повторюються, передбачається підсумовування від 1 до d. Вживаючи класичні позначення векторного аналізу, крайовій задачі (1.1.1) можна надати більш короткого запису

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\textit{знайти функцію} \ \ u = u(x) \ \textit{таку, що} \\
Lu := -\nabla . \{\mu \nabla u\} + \beta . \nabla u + \sigma u = f \qquad \textit{в} \quad \Omega, \\
\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad u = 0 \qquad \textit{на} \quad \Gamma_D \subset \Gamma, \ mes(\Gamma_D) \geq 0, \\
\qquad\qquad - n . \mu \nabla u - \kappa u = g \qquad \textit{на} \quad \Gamma_N := \Gamma \backslash \Gamma_D.
\end{array}
\right. \tag{1.1.2}
$$

Далі з метою збереження прозорості міркувань ми будемо детально аналізувати лише частковий випадок

$$\Gamma \equiv \Gamma_D \tag{1.1.3}$$

і припускатимемо, що решта даних задачі (1.1.1) задовольняють такі умови:

- коефіцієнт біохімічного розпаду $\sigma = \sigma(x) \geq 0$ належить простору $\Sigma := L^{\infty}(\Omega)$ з нормою
$$\|\rho\|_{\infty} := \operatorname*{ess\,sup}_{x \in \Omega} |\rho(x)| \quad \forall \rho \in \Sigma; \tag{1.1.4}$$

- вектор швидкості конвективного перенесення $\beta = \{\beta_i(x)\}_{i=1}^{d}$ належить простору
$$\mathcal{B} := \{\, \gamma \in \Sigma^d \cap H(div; \Omega) : \ \nabla . \gamma = 0 \ \text{ в } \Omega \,\}, \tag{1.1.5}$$
який наділено нормою
$$\|\gamma\|_{\mathcal{B}} := \Big\{ \sum_{i=1}^{d} \|\gamma_i\|_{\infty}^2 \Big\}^{\frac{1}{2}} \quad \forall \gamma \in \mathcal{B}; \tag{1.1.6}$$

- матриця коефіцієнтів дифузії субстанції $\mu = \{\mu_{ij}(x)\}_{i,j=1}^d$ належить простору $\mathcal{M} := L^\infty(\Omega)^{d\times d}$ з нормою
$$\|\,\mu\| := \Big\{ \sum_{i,j=1}^d \|\,\mu_{ij}\|_\infty^2 \Big\}^{\frac{1}{2}} \tag{1.1.7}$$
і володіє наступними властивостями симетрії та додатної визначеності
$$\begin{cases} \mu_{ij} = \mu_{ji}, \\ \mu_{ij}\xi_i\xi_j \ge \mu_0\xi_i\xi_i \quad \mu_0 = const > 0 \quad \forall \xi = \{\xi\}_{i=1}^d \in \mathbb{R}^d \\ \quad \text{майже скрізь в } \ \Omega; \end{cases} \tag{1.1.8}$$
- інтенсивність розподілених джерел $f = f(x)$ належить простору $H := L^2(\Omega)$ зі скалярним добутком та нормою
$$\begin{cases} (f,g) := \int\limits_\Omega fg\,dx \qquad \forall f,g \in H, \\ \|f\|_H := (f,f)^{\frac{1}{2}} \qquad \forall f \in H. \end{cases} \tag{1.1.9}$$

Вправа 1.1.1.

1.2 Аналіз подібності процесів мігрування

Моделювання різноманітних процесів походить від подібності перебігу досліджуваних явищ. Два процеси однієї й тієї ж природи називають *подібними*, якщо за характеристиками одного можна одержати відповідні характеристики іншого шляхом простого перерахунку, подібного переходові від однієї системи координат до іншої. При цьому умовами подібності двох явищ стає рівність певних безрозмірних параметрів, які називають *критеріями подібності* (або *числами подібності*).

1.2.1 *Критерії подібності та безрозмірні змінні*

У зв'язку з цим введемо безрозмірні числа
$$\begin{cases} Pe := \dfrac{l_0\|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\mu_0} = \dfrac{\|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\frac{\mu_0}{l_0}} = \dfrac{\{\text{швидкість конвективного перенесення}\}}{\{\text{швидкість дифузійного перенесення}\}}, \\ Fu := \dfrac{\mu_0 t_0}{l_0^2} = \dfrac{\frac{\mu_0}{l_0}}{\frac{l_0}{t_0}} = \dfrac{\{\text{швидкість дифузійного перенесення}\}}{\{\text{швидкість біохімічних реакцій}\}}, \\ Sh := \dfrac{l_0}{\|\beta\|_{\mathcal{B}} t_0} = \dfrac{\frac{l_0}{t_0}}{\|\beta\|_{\mathcal{B}}} = \dfrac{\{\text{швидкість біохімічних реакцій}\}}{\{\text{швидкість конвективного перенесення}\}}, \end{cases} \tag{1.2.1}$$
відомі в гідродинаміці під назвами *критеріїв подібності Пекле, Фур'е* та *Струхаля* відповідно. Тут за масштаб часу t_0 взято характерний час перебігу реакцій, наприклад, період напіврозпаду радіонукліда, поширення якого аналізується в довкіллі, $l_0 := diam\,\Omega$.

З наведених вище означень видно, що структура критеріїв подібності процесу мігрування субстанції визначається відношеннями швидкостей перебігу дифузії, конвекції та біохімічних реакцій, в яких приймає участь дана субстанція. Зауважимо, що між згаданими критеріями подібності існують певні залежності, наприклад,

$$Sh = \frac{1}{Pe\,Fu}. \tag{1.2.2}$$

Щоб краще окреслити можливості концепції подібності в проблемах мігрування, перейдемо в рівняннях задачі (1.1.2), (1.1.3) до безрозмірних просторових змінних $z = (z_1, \dots, z_d)$ згідно правил

$$x_i := l_0 z_i, \quad i = 1, \dots, d.$$

Після невеликої алгебри розглядуваній задачі можна надати вигляду [1]

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{знайти функцію} \ \ u = u(x) \ \textit{таку, що} \\ -\dfrac{1}{Pe}\nabla.\{\mu\nabla u\} + \beta.\nabla u + Sh\{\sigma u - f\} = 0 \qquad \textit{в} \quad \Omega, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad u = 0 \qquad \textit{на} \quad \Gamma. \end{array} \right. \tag{1.2.3}$$

Принагідно зауважимо, що доданок, який описує конвективне перенесення субстанції, можна подати в такій редакції:

$$\beta.\nabla u \equiv \|\beta\|_{\mathbb{R}^d}\,\frac{\partial u}{\partial \beta}.$$

Останній запис наочно показує, що конвективне перенесення частинок субстанції в процесі її міграції можливе лише в напрямку вектора β.

1.2.2 *Сингулярно збурені задачі мігрування: примежові та внутрішні шари*

Оператор крайової задачі (1.2.3)

$$v \ \rightarrow \ Lv := -\frac{1}{Pe}\nabla.\{\mu\nabla v\} + \beta.\nabla v + Sh\{\sigma v\} \tag{1.2.4}$$

містить лише безрозмірні коефіцієнти; тому він з єдиних позицій описує властивості цілого класу процесів мігрування субстанції в суцільному середовищі, який характеризується одними й тими ж значеннями критеріїв Пекле та Струхаля. Змінюючи значення цих критеріїв, можна досить багато сказати про досліджувані процеси. Наприклад, якщо критерій Пекле $Pe \simeq 0$, то процес мігрування субстанції реалізується, в основному, лише механізмом дифузійного перенесення і при цьому оператор задачі (1.2.3) стає *самоспряженим.*

З цих позицій ми відзначимо два екстремальні випадки.

(!) *Значення критерію Пекле* $Pe \rightarrow \infty$.

В цьому випадку в процесі мігрування домінує конвективне перенесення частинок субстанції. З огляду на однорідну крайову умову Діріхле частинки субстанції не можуть

[1] Тут ми ввели нові позначення для даних задачі такого сорту

$$\frac{1}{\|\beta\|_{\mathcal{B}}}\beta \rightarrow \beta, \quad \frac{1}{\|\mu\|}\mu \rightarrow \mu, \quad \frac{\sigma}{\|\sigma\|_\infty} \rightarrow \sigma, \quad t_0 f \rightarrow f.$$

перетнути межі області Ω і фізичні міркування приводять до висновку, що в результаті їхнього перенесення основна маса субстанції буде нагромаджуватися в тонкому шарі області Ω, який прилягає до частини межі

$$\Gamma_+ := \{z \in \Gamma : \; n(z).\, \beta(z) > 0\}.$$

Межі цього шару легко локалізуються, оскільки в їхніх околах градієнти концентрації субстанції досягатимуть величезних значень. Завдяки цій ознаці розв'язки крайових задач мігрування дістали назву *примежових шарів*, а крайові задачі з такими розв'язками дістали назву *сингулярно збурених задач.*

З формальної точки зору умова $Pe \to \infty$ приводить до появи *малих коефіцієнтів при старших похідних рівняння* і *еліптичний оператор* крайової задачі (1.2.3) з частинними похідними другого порядку *вироджується в гіперболічний оператор* з похідними першого порядку так, що її рівняння набуває вигляду

$$\|\beta\|_{\mathbb{R}^d} \frac{\partial u}{\partial \beta} + Sh\{\sigma u - f\} = 0 \qquad \text{в} \quad \Omega. \tag{1.2.5}$$

Зрозуміло, що пониження порядку диференціального оператора вимагає відповідної реконструкції його області визначення і напрямок вектора конвективного перенесення β відіграє при цьому суттєву роль. Дійсно, запис (1.2.4) за своїм виглядом нагадує звичайне диференціальне рівняння з однією незалежною змінною β (так воно й станеться, якщо одну з осей системи координат сумістити з напрямком вектора β!) і, отже, вимагає лише однієї додаткової умови, яка забезпечить єдиність його розв'язку. Відштовшуючись від крайової умови задачі (1.2.3), можна показати, що в цьому випадку вона вироджується до умови Діріхле лише на частині межі

$$u = 0 \qquad \text{на} \quad \Gamma_\beta \subset \Gamma, \tag{1.2.6}$$

де

$$\Gamma_\beta := \{z \in \Gamma : n(z).\, \beta(z) \le 0\} \subset \Gamma. \tag{1.2.7}$$

Таким чином, випадок конвективного домінуваня вимагає суттєвої перебудови формулювання вихідної моделі усталеного процесу мігрування субстанції, яка приводить до наступної редакції крайової задачі (1.2.3) [2]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти функцію} \;\; u = u(z) \;\; \text{таку, що} \\ \qquad \beta.\, \nabla u + Sh\{\sigma u - f\} = 0 \qquad \text{в} \quad \Omega, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u = 0 \qquad \text{на} \quad \Gamma_\beta. \end{array} \right. \tag{1.2.9}$$

[2]За належної заміни змінних, яка, зокрема, передбачає суміщення осі Oz_d з напрямком вектора β та перепозначення нової змінної символом $\tau \in \mathcal{T} := \{t \in \mathbb{R} : t > 0\}$, цій моделі можна надати стандартного вигляду початково-крайової задачі для гіперболічного рівняння першого порядку:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти функцію} \;\; u = u(z,\tau) \;\; \text{таку, що} \\ \|\beta\|_{\mathbb{R}^d} \{\dfrac{\partial u}{\partial \tau} + \beta^*.\, \nabla u\} + Sh\{\sigma u - f\} = 0 \qquad \text{в} \quad \Omega^* \times \mathcal{T}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u = 0 \qquad \text{на} \quad \Gamma_{\beta^*} \times \mathcal{T}, \\ \qquad\qquad\qquad u|_{\tau=0} = u_0 \qquad \text{в} \quad \Omega^* \subset \mathbb{R}^{d-1}. \end{array} \right. \tag{1.2.8}$$

Вправа 1.2.1. *Детально розгляньте одновимірний випадок задачі міграції домішок з постійними коефіцієнтами:*

(!!) *Значення критерію Струхаля* $Sh \to \infty$.

Легко помітити, що в цьому випадку градієнт концентрації субстанції та її похідні вищих порядків не відіграють жодної ролі в розподілі маси внутрі області Ω і в границі крайова задача міграції вироджується до алгебричного рівняння

$$\sigma u = f \quad \text{в} \quad \Omega.$$

Якщо, наприклад, при цьому інтенсивність розподілених джерел f є кусково визначеною функцією зі стрибками першого роду чи $\delta-$подібною функцією, то ці особливості будуть відтворені і в розподілі маси субстанції. Розв'язки таких сингулярно збурених крайових задач називають *внутрішніми шарами.*

Вправа 1.2.2.

Розглянуті нами випадки процесів мігрування субстанції для критичних значень чисел Пекле і Струхаля наочно демонструють особливості сингулярно збурених крайових задач міграції, які можуть спричиняти значні математичні труднощі аналізу, скажімо, конкретних проблем охорони довкілля від забруднення шкідливими домішками.

1.3 Якісний аналіз варіаційної задачі мігрування субстанції

1.3.1 Варіаційне формулювання задачі

Для крайових задач з еліптичними рівняннями характерне варіаційне формулювання вигляду

$$\left\{\begin{array}{l} \textit{задано гільбертів простір } V, \\ \qquad\quad \textit{білінійну форму } c(\cdot\,,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R} \textit{ та} \\ \qquad\quad \textit{лінійний функціонал } l : V \to \mathbb{R}; \\ \textit{знайти } u \in V \textit{ такий, що} \\ \qquad c(u,v) =< l, v > \quad \forall v \in V. \end{array}\right. \tag{1.3.1}$$

Крайова задача міграції субстанції (1.1.1) допускає варіаційне формулювання (1.3.1) з такими структурними елементами

$$\left\{\begin{array}{l} V := H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : \ v = 0 \ \textit{ на } \ \Gamma\}, \\ c(u,v) := a(\mu; u,v) + b\,(\beta; u,v) + s(\sigma; u,v), \\ a(\mu; u,v) := \int\limits_\Omega \nabla v.\, \mu \nabla u\, dx \ \ \forall\, \mu \in \mathcal{M}, \\ b\,(\beta; u,v) := \int\limits_\Omega v\beta.\, \nabla u\, dx \quad \forall\, \beta \in \mathcal{B}, \\ s(\sigma; u,v) := \int\limits_\Omega \sigma u v\, dx \qquad \forall\, \sigma \in \Sigma, \\ < l, v >:= \int\limits_\Omega f v\, dx \qquad \forall\, u,v \in V. \end{array}\right. \tag{1.3.2}$$

Перш ніж приступити до аналізу варіаційної задачі (1.3.1) зробимо декілька попередніх зауважень.

Визначимо на просторі допустимих функцій V напівнорму

$$|v|_V := \Big\{ \int\limits_\Omega \nabla v.\, \nabla v\, dx \Big\}^{\frac{1}{2}} = \Big\{ \int\limits_\Omega |\nabla v|^2\, dx \Big\}^{\frac{1}{2}} \qquad \forall\, v \in V \tag{1.3.3}$$

і відзначимо, що з огляду на нерівність Пуанкаре-Фрідріхса

$$l_0 |v|_V \geq \|v\|_H \qquad \forall\, v \in V, \quad l_0 := \operatorname{diam} \Omega. \tag{1.3.4}$$

Звідси безпосередньо випливає, що на просторі допустимих функцій $V = H_0^1(\Omega)$ напівнорма $|\cdot|_V : V \times V \to \mathbb{R}$ еквівалентна стандартній нормі

$$\|v\|_{H^1(\Omega)} \equiv \|v\|_{1,\Omega} := \Big\{ \int\limits_\Omega (|\nabla v|^2 + v^2)\, dx \Big\}^{\frac{1}{2}} \qquad \forall\, v \in V \tag{1.3.5}$$

простору Соболєва $H^1(\Omega)$. Іншими словами, знайдеться додатна стала $C = C(\operatorname{diam} \Omega)$ така, що

$$|v|_V \geq C(\operatorname{diam} \Omega) \|v\|_{1,\Omega} \qquad \forall\, v \in V. \tag{1.3.6}$$

У зв'язку з цією обставиною ми принагідно будемо експлуатувати напівнорму (1.3.3) як повноцінну норму простору допустимих функцій $V = H_0^1(\Omega)$. Більше цього, щоб підкреслити, що ця норма породжена лише градієнтом функції, ми іноді будемо вживати для неї ще й таке позначення

$$|v|_V \equiv \|\nabla v\|_H := \Big\{ \int\limits_\Omega |\nabla v|^2\, dx \Big\}^{\frac{1}{2}} \qquad \forall\, v \in V, \tag{1.3.7}$$

де $H := H^0(\Omega) \equiv L^2(\Omega)$.

Вправа 1.3.1.

1.3.2 *Особливості структури варіаційної задачі*

Наступні властивості подають вичерпну характеристику складників варіаційної задачі мігрування субстанції.

Лемма 1.3.1. про білінійну форму механізму дифузійного перенесення

Нехай задана матриця коефіцієнтів дифузії $\mu \in \mathcal{M} := L^\infty(\Omega)^{d\times d}$ задовольняє умови симетрії та еліптичності (1.1.8).

Тоді білінійна форма $a(\mu;\,\cdot\,,\,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ володіє такими властивостями

$$\begin{cases} a(\mu;u,v) = a(\mu;v,u) & \forall u,v \in V \qquad \textit{(симетричність)}\ , \\ |\,a(\mu;u,v)| \le \|\,\mu\|\,|u|_V\,|v|_V & \forall u,v \in V \qquad \textit{(неперервність)}\ , \\ a(\mu;v,v) \ge \mu_0|v|_V^2 & \forall v \in V \qquad \textit{(V-еліптичність)}\ . \end{cases} \tag{1.3.8}$$

Іншими словами, білінійна форма $a(\mu;\,\cdot\,,\,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ є скалярним добутком на просторі допустимих функцій і, отже, породжує норму, яка еквівалентна нормі $|\cdot|_V$.

Вправа 1.3.2. *Доведіть тільки що сформульовану лему 1.3.1.*

Лемма 1.3.2. про білінійну форму механізму біохімічних реакцій

Нехай заданий коефіцієнт біохімічного розпаду $\sigma \in \Sigma := L^\infty(\Omega)$ такий, що

$$\sigma(x) \ge \sigma_0 \ge 0 \quad \text{в} \quad \Omega. \tag{1.3.9}$$

Тоді білінійна форма $s(\sigma;\,\cdot\,,\,\cdot\,) : H \times H \to \mathbb{R}$ володіє наступними властивостями

$$\begin{cases} s(\sigma;u,v) = s(\sigma;v,u) & \forall u,v \in H \qquad \textit{(симетричність)}\ , \\ |\,s(\sigma;u,v)| \le \|\sigma\|_\infty\,\|u\|_H\,\|v\|_H & \forall u,v \in H \qquad \textit{(неперервність)}\ , \\ s(\sigma;v,v) \ge 0 & \forall v \in H \qquad \textit{(невід'ємність)}\ . \end{cases} \tag{1.3.10}$$

Вправа 1.3.3. *Доведіть тільки що сформульовану лему 1.3.2.*

Лемма 1.3.3. про білінійну форму механізму конвективного перенесення

Нехай заданий вектор швидкості конвективного перенесення

$$\beta \in \mathcal{B} := \{\, \gamma \in L^\infty(\Omega)^d \cap H(div;\Omega) :\ \nabla.\,\gamma = 0 \ \ \textit{в}\ \Omega \,\}.$$

Тоді білінійна форма $b\,(\,\beta;\,\cdot\,,\,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ володіє наступними властивостями

$$\begin{cases} b\,(\beta;u,v) = -b\,(\beta;v,u) & \forall u,v \in V \qquad \textit{(кососиметричність)}\ , \\ |\,b\,(\beta;u,v)| \le \|\,\beta\|_{\mathcal{B}}\,|u|_V\,\|v\|_H & \\ \qquad\qquad \le l_0\|\,\beta\|_{\mathcal{B}}\,|u|_V\,|v|_V & \forall u,v \in V \qquad \textit{(неперервність)}\ . \end{cases} \tag{1.3.11}$$

Доведення. Із визначення (1.3.2), умови нестисливості та інтегрування частинами одержимо

$$\begin{aligned} b(\beta; u, v) &:= \int_\Omega v\beta.\nabla u\,dx = \int_\Omega v\nabla.(u\beta)\,dx \\ &= -\int_\Omega u\beta.\nabla v\,dx \\ &= -b(\beta; v, u) \qquad \forall\, \beta \in \mathcal{B} \qquad \forall u, v \in V. \end{aligned} \tag{1.3.12}$$

Далі, ланцюжок операцій з використанням нерівності Коші-Буняковського-Шварца

$$\begin{aligned} |\,b(\beta; u, v)| &= |\int_\Omega v\beta.\nabla u\,dx| \le \sum_i \int_\Omega |\beta_i||v\frac{\partial u}{\partial x_i}|\,dx \\ &\le \sum_i \Big\{ \|\beta_i\|_\infty \int_\Omega |v\frac{\partial u}{\partial x_i}|\,dx \Big\} \\ &\le \Big\{ \sum_i \|\beta_i\|_\infty^2 \Big\}^{\frac12} \Big\{ \sum_i (\int_\Omega |v\frac{\partial u}{\partial x_i}|\,dx)^2 \Big\}^{\frac12} \\ &\le \Big\{ \sum_i \|\beta_i\|_\infty^2 \Big\}^{\frac12} \Big\{ \sum_i \int_\Omega v^2\,dx \int_\Omega |\frac{\partial u}{\partial x_i}|^2\,dx \Big\}^{\frac12} \\ &= \|\beta\|_{\mathcal{B}} \|v\|_H \|\nabla u\|_H \qquad \forall\, \beta \in \mathcal{B} \quad \forall u, v \in V \end{aligned} \tag{1.3.13}$$

приводить до першої з бажаних оцінок щодо неперервності. Щоб повністю завершити доведення леми, лишається звернутись до нерівності Пуанкаре-Фрідріхса (1.3.4).

□

Теорема 1.3.1. про енергетичну норму задачі мігрування

Нехай виконано припущення лем 1.3.1 - 1.3.3.

Тоді білінійна форма $c(\cdot\,,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ варіаційної задачі (1.3.1) про мігрування субстанції в нестисливому середовищі
(I) є неперервною на просторі допустимих функцій V, більш точно,

$$|\,c\,(u, v)| \le \big\{\, \|\mu\| + l_0\|\beta\|_{\mathcal{B}} + l_0^2\|\sigma\|_\infty \,\big\}\, \|\nabla u\|_H \,\|\nabla v\|_H \qquad \forall u, v \in V; \tag{1.3.14}$$

(II) породжує енергетичну норму

$$\|v\|_V := c(v, v)^{\frac12} = \big\{\, a(\mu; v, v) + s(\sigma; v, v) \,\big\}^{\frac12} \qquad \forall\, v \in V, \tag{1.3.15}$$

яка еквівалентна нормі $|\cdot|_V$ простору допустимих функцій V.

Більше цього,

$$\mu_0\|\nabla v\|_H^2 \le \|v\|_V^2 \le \big\{\, \|\,\mu\| + l_0^2\|\,\sigma\|_\infty \,\big\}\|\nabla v\|_H^2 \qquad \forall\, v \in V. \tag{1.3.16}$$

Доведення. □

Вправа 1.3.4.

1.3.3 *Коректність варіаційної задачі*

Тепер ми готові сформулювати ключовий результат стосовно стаціонарних процесів міграції субстанції, який, по-суті, визначає всю подальшу програму нашого дослідження.

Теорема 1.3.2. про коректність варіаційного формулювання задачі міграції субстанції

Нехай щодо даних крайової задачі міграції субстанції (1.1.1) виконуються припущення лем 1.3.1 - 1.3.3 і на додаток до цього інтенсивність розподілених джерел $f \in H = L^2(\Omega)$.

Тоді відповідна варіаційна задача (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) має єдиний розв'язок $u \in V$ *і при цьому*

$$\|\nabla u\|_H \le \frac{l_0}{\mu_0}\|f\|_H. \tag{1.3.17}$$

Доведення. З огляду на припущення лем 1.3.1 - 1.3.3 будуть вірними висновки теореми 1.3.1, які засвідчують, що білінійна форма варіаційної задачі (1.3.1) задовольняє гіпотези теореми Лакса-Мільграма-Вишика про достатні умови коректності абстрактної варіаційної задачі, див., наприклад, [?].

Лишається переконатися, що лінійний функціонал $l : V \to \mathbb{R}$, визначений у (1.3.2), є обмеженим на просторі V. Це дійсно так, оскільки

$$|< l, v >| = |(f, v)| \le \|f\|_H\|v\|_H \le l_0\|f\|_H\|\nabla v\|_H \quad \forall v \in V$$

і, отже, $\|l\|_* \le l_0\|f\|_H < +\infty$. Це й доводить правильність висновку теореми. □

Вправа 1.3.5.

1.3.4 *Закон збереження маси*

Нехай $u \in V$ є розв'язком варіаційної задачі мігрування (1.3.1). Підставивши в її рівняння $v := u$ і врахувавши кососиметричність форми $b(\beta; \cdot\,, \cdot\,)$, знаходимо рівність

$$a(\mu; u, u) + s(\sigma; u, u) =< l, u > \tag{1.3.18}$$

або згідно визначення енергетичної норми

$$\|u\|_V^2 =< l, u > . \tag{1.3.19}$$

Одержані рівності виражають собою закон збереження маси субстанції, накопиченої в області Ω. Вони дозволяють надати певну фізичну інтерпретацію формально введеному нами поняттю енергетичної норми

$$\|v\|_V := c(v, v)^{\frac{1}{2}} = \left\{\, a(\mu; v, v) + s(\sigma; v, v)\,\right\}^{\frac{1}{2}} \qquad \forall\, v \in V. \tag{1.3.20}$$

Дійсно, з останнього запису помітно, що значення величини цієї норми складається із двох доданків, перших із яких ідентифікує ту частку маси субстанції, яка бере участь в процесі дифузії, а другий – ту, яка задіяна в біохімічних реакціях з елементами довкілля. Відзначимо тут, що вся маса субстанції переноситься разом із частинками суцільного середовища, перерозподіляючи її без втрат; тому природно, що білінійна форма конвективного перенесення $b\,(\,\beta; \cdot\,, \cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ не присутня у визначенні енергетичної норми (1.3.20) – згадана норма вимірює лише втрати маси субстанції, спричинені механізмами дифузії та реакцій.

Вправа 1.3.6.

1.3.5 *Глобальна регулярність розв'язків*

Якщо відомо, що дані варіаційної задачі мігрування (1.3.1) мають більший запас гладкості, ніж ми вимагали до цього моменту, то можна сподіватися, що й її розв'язок $u \in V := H_0^1(\Omega)$ є більш регулярною функцією, наприклад, належить до простору $H^s(\Omega)$ з певним $s > 1$.

Дійсно, якщо у двовимірному випадку межа Γ є достатно гладкою кривою і

$$\mu_{ij}, \beta_i \in C^{s+1}(\overline{\Omega}), \quad \sigma \in C^s(\overline{\Omega}), \quad f \in H^s(\Omega), \quad s = 0, 1, \ \dots \ ,$$

то можна показати, що знайдеться стала $C > 0$ така, що

$$\|u\|_{s+2,\Omega} \leq C\|f\|_{s,\Omega}\,; \tag{1.3.21}$$

іншими словами, в даному випадку розв'язок задачі (1.3.1) буде належати простору $H^{s+2}(\Omega)$. Зокрема, якщо всі дані варіаційної задачі є нескінченно диференційованими функціями, то її розв'язок $u \in V \cap C^\infty(\overline{\Omega})$. Детальний аналіз цієї та подібних ситуацій розглянуто Гілбаргом, Трудінгером.

Нижче ми обмежимося коротким коментарем ситуації, коли недостатній запас гладкості даних зменшує регулярність розв'язку задачі. Він справді важливий для практики обчислень, оскільки
нерегулярність шуканого розв'язку задачі може занижувати
очікувану швидкість збіжності його числових апроксимацій.

Якщо межа Γ є недостатно гладкою (наприклад, область Ω складена з многокутників), то оцінка (1.3.21) може не виконуватися навіть для $s = 0$. Коли межа Γ має кутову точку, то розв'язок задачі або його похідні, взагалі кажучи, матимуть сингулярності в околі цього кута. Більш точно, розв'язок u варіаційної задачі (1.3.1) з гладкими даними в околі кута з розхилом ω має наступну форму

$$u(r, \varphi) = r^\gamma \alpha(\varphi) + w(r, \varphi), \quad \gamma := \frac{\pi}{\omega}, \tag{1.3.22}$$

де α і w є регулярними функціями полярних координат (r, φ) з центром у вершині розглядуваного кута. Якщо α відмінна від тотожнього нуля, то можна показати, що за умови $\omega > \pi$ функція вигляду (1.3.22) не належить простору $H^2(\Omega)$; більше цього,

$$u \in H^s(\Omega) \quad \textit{тоді і лише тоді, якщо} \quad s < 1 + \gamma = 1 + \frac{\pi}{\omega}. \tag{1.3.23}$$

Зокрема, звідси можна побачити, що оцінка (1.3.21) лишається вірною з $s = 0$, якщо область Ω є опуклим полігоном (в цьому випадку кожен із кутів $\omega < \pi$).

Вправа 1.3.7.

1.3.6 *Чутливість розв'язків до збурень даних задачі*

Проаналізуємо можливі причини втрати стійкості (неперервних та дискретизованих) задач мігрування з позицій їх чутливості до збурень швидкості руху частинок довкілля та\або швидкості перебігу біохімічних реакцій шляхом побудови належних апріорних оцінок. Особливість нашої побудови полягає у обчисленні явних залежностей таких оцінок від характеристик параметрів процесів мігрування та їх узгодженості із відомими в гідродинаміці критеріями подібності.

1. Чутливість до конвективних збурень

Добре відомо, що задачі мігрування стають сингулярно збуреними за умов значного переважання швидкості конвективного перенесення над швидкістю дифузії. Відношення згаданих швидкостей відоме в гідродинаміці під назвою критерію подібності Пекле, який ми виберемо у вигляді

$$Pe := \frac{l_0\|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\mu_0} = \frac{\|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\frac{\mu_0}{l_0}} = \frac{\{\textit{швидкість конвективного перенесення}\}}{\{\textit{швидкість дифузійного перенесення}\}}. \tag{1.3.24}$$

При числах Пекле $Pe \to \infty$ конвективне перенесення домінує в процесі мігрування субстанції й *еліптичний оператор задачі вироджується в гіперболічний оператор першого порядку.* Розв'язки таких задач будуть містити чітко *локалізовані примежові та внутрішні шари*, в межах яких нагромаджується основна частина маси субстанції. Градієнти її концентрації в околі таких шарів можуть досягати величезних значень і сильно різнитися за своєю структурою при збуреннях вектора конвективного перенесення β. Певне уявлення про наслідки таких збурень подає наступна теорема.

Теорема 1.3.3. про апрірні оцінки впливу конвективних збурень на процес міграції субстанції

Нехай щодо даних варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) виконуються припущення теореми 1.3.1 і $u \in V$ - її розв'язок. Позначимо через $u_* \in V$ розв'язок цієї задачі з вектором конвективного перенесення $\beta = 0$.

Тоді будуть істинними такі твердження.

(I)

$$\|u\|_V \le \|u_*\|_V \qquad \forall\, \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.25}$$

(II)

$$\|u_*\|_V^2 - \|u\|_V^2 = b(\beta; u, u_*) \ge 0 \qquad \forall\, \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.26}$$

(III)

$$\frac{\|u_* - u\|_V}{\|u_*\|_V} \le Pe \qquad \forall\, \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.27}$$

Доведення. Якщо $u_* \in V$ – розв'язок задачі мігрування за відсутності конвективного перенесення, тобто при $\beta = 0$, то

$$a(\mu; u_*, v) + s(\sigma; u_*, v) = < l, v > \quad \forall\, v \in V \tag{1.3.28}$$

і

$$|\nabla u_*|_H \le \mu_0^{-1} |f|_H.$$

Почленне віднімання рівнянь (1.3.1) та (1.3.28) приводить до рівності

$$b(\beta; u, v) = a(\mu; u_* - u, v) + s(\sigma; u_* - u, v) \quad \forall\, v \in V, \tag{1.3.29}$$

на якій і грунтується наше доведення цієї теореми.

Дійсно, підстановка $v = u$ в (1.3.29) показує, що

$$\|u\|_V^2 = a(\mu; u_*, u) + s(\sigma; u_*, u), \tag{1.3.30}$$

звідки за допомогою нерівності Коші-Буняковського-Шварца приходимо до оцінки (1.3.25).

Подібним чином (1.3.29) з $v = u + u_*$ після врахування кососиметричності білінійної форми конвективного перенесення приводить до

$$b(\beta; u, u + u_*) = b(\beta; u, u_*) = \|u_*\|_V^2 - \|u\|_V^2 \quad \forall \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.31}$$

Одержана рівність разом із (1.3.25) встановлює істинність (1.3.26).

Нарешті, в рівнянні (1.3.29) покладемо $v = u_* - u$; тоді на основі еквівалентності норм

$$\begin{aligned} \|u_* - u\|_V^2 = b(\beta; u, u_* - u) & \\ &= -b(\beta; u_* - u, u_*) \le \|\beta\|_{\mathcal{B}} \|\nabla(u_* - u)\|_H \|u_*\|_H \\ &\le l_0 \|\beta\|_{\mathcal{B}} \|\nabla(u_* - u)\|_H \|\nabla u_*\|_H \\ &\le \frac{l_0 \|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\mu_0} \|u_* - u\|_V \|u_*\|_V \qquad \forall \beta \in \mathcal{B} \end{aligned} \tag{1.3.32}$$

і після очевидного спрощення приходимо до висновку (1.3.27). □

Наслідок 1.3.1. про чутливість розв'язку задачі мігрування
до збурень вектора конвективного перенесення

Нехай виконано припущення теореми 1.3.3.

Тоді відносне відхилення концентрації субстанції допускає наступну оцінку

$$\frac{\|\nabla(u_* - u)\|_H}{\|\nabla u_*\|_H} \le Pe \qquad \forall \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.33}$$

Вправа 1.3.8. *Скориставшись (1.3.32) та еквівалентністю енергетичної норми $\|v\|_V$ і $\|\nabla v\|_H$, переконайтесь у правильності наслідку 1.3.1.*

Наслідок 1.3.2. про ортогональність розв'язку збуреної задачі

Розв'язок збуреної задачі ортогональний (відносно енергетичного скалярного добутку) до відхилення і при цьому вірна рівність Піфагора

$$\|u_*\|_V^2 = \|u\|_V^2 + \|u_* - u\|_V^2 \qquad \forall \beta \in \mathcal{B}. \tag{1.3.34}$$

Вправа 1.3.9. *Скориставшись (1.3.29) , переконайтесь у правильності наслідку 1.3.2.*

Наслідок 1.3.3. про відносне відхилення концентрацій,
зумовлене різницею векторів конвективного перенесення

Нехай послідовність $\{u_n\} \subset V$ визначає набір розв'язків варіаційних задач міграції субстанції, які різняться між собою лише векторами швидкостей конвективного перенесення $\{\beta^n\} \subset \mathcal{B}$.

Тоді відносне відхилення концентрацій допускає наступну оцінку

$$\frac{\|u_n - u_m\|_V}{\|u_m\|_V} \le \frac{l_0 \|\beta^n - \beta^m\|_{\mathcal{B}}}{\mu_0} \qquad \forall \beta^n, \beta^m \in \mathcal{B}. \tag{1.3.35}$$

Вправа 1.3.10. *Покажіть, що*

$$\begin{aligned} b(\beta^n - \beta^m; u_n, v) - b(\beta^m; u_n - u_m, v) \\ = a(\mu; u_n - u_m, v) + s(\sigma; u_n - u_m, v) \quad \forall v \in V, \end{aligned} \tag{1.3.36}$$

і доведіть наслідок 1.3.3.

2. Чутливість до збурень біохімічного розпаду

Проаналізуємо зміни розв'язків задачі мігрування внаслідок збурення її коефіцієнта біохімічного розпаду $\sigma = \sigma(x)$ за допущення, що умови конвективного та дифузійного перенесення субстанції залишаються сталими для обох процесів. В цій ситуації важливе значення мають критерії подібності Фур'є та Струхаля.

Теорема 1.3.4. про апріорні оцінки впливу біохімічних збурень на процес міграції субстанції

Нехай щодо даних варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) виконуються припущення теореми 1.3.1 і $u \in V$ - її розв'язок. Позначимо через $u_* \in V$ розв'язок задачі мігрування з коефіцієнтом біохімічного розпаду $\sigma = 0$.

Тоді будуть істинними такі оцінки відносних відхилень:

(I)

$$\frac{\|u_* - u\|_V}{\|u_*\|_V} \leq \frac{1}{Fu} = ShPe \qquad \forall\, \sigma \in \Sigma. \tag{1.3.37}$$

(II)

$$\frac{\|\nabla u_*\|_H - \|\nabla u\|_H}{\|\nabla u\|_H} \leq \frac{1}{Fu} + 2Pe = \{2 + Sh\}Pe \qquad \forall\, \sigma \in \Sigma. \tag{1.3.38}$$

Доведення. Зауважимо спочатку, що різниця згаданих розв'язків $u_* - u$ задовольняє рівняння

$$b(\beta; u_* - u, v) + a(\mu; u_* - u, v) = s(\sigma; u, v) \quad \forall\, v \in V. \tag{1.3.39}$$

Підставляючи сюди $v = u_* - u$, одержимо оцінки

$$\begin{aligned} \|u_* - u\|_V^2 &= s(\sigma; u_*, u_* - u) \\ &\leq \|\sigma\| \|u_*\|_H \|u_* - u\|_H \\ &\leq \frac{l_0^2 \|\sigma\|}{\mu_0} \|u_*\|_V \|u_* - u\|_V, \end{aligned} \tag{1.3.40}$$

які й приводять нас до бажаної нерівності (1.3.37). □

Безпосередньо із наведеного вище доведення одержуємо

Наслідок 1.3.4.

$$\frac{\|\nabla(u_* - u)\|_H}{\|\nabla u_*\|_H} \leq \frac{1}{Fu} = ShPe \qquad \forall\, \sigma \in \Sigma. \tag{1.3.41}$$

1.4 Класичні апроксимації Гальоркіна

Основна ідея методу Гальоркіна полягає в перенесенні розв'язування варіаційної задачі (1.3.2) з нескінченновимірного простору допустимих функцій V в належним чином вибраний скінченновимірний підпростір $V_h \subset V$. На цьому шляху ми досягаємо величезного спрощення: варіаційна задача врешті-решт переформульовується в задачу для системи алгебричних рівнянь, методи розв'язування яких є добре розвиненими і реалізованими в потужних пакетах програм. За надані нам можливості потрібно розраховуватися — замість точного розв'язку $u \in V$ варіаційної задачі ми одержуємо лише $u_h \in V_h$, те, що з найкращих міркувань можна назвати "наближеним розв'язком" цієї задачі в просторі V.

Як тільки ми обчислили наближений розв'язок розглядуваної задачі, одразу виникає доречне запитання про якість цього результату і тут критерієм для об'єктивних оцінок може слугувати надійний аналіз похибки

$$e := u - u_h \in V$$

знайденого наближення.

1.4.1 *Абстрактна схема методу*

Розглянемо послідовність скінченновимірних підпросторів $\{V_h\}$ з простору допустимих функцій V таку, що задовольняє наступну *умову повноти*

$$\begin{cases} dimV_h = N(h) = N \to \infty \quad \textit{при} \quad h \to 0, \\ \bigcup\limits_{h>0} V_h \quad \textit{щільно вкладене в} \quad V. \end{cases} \tag{1.4.1}$$

Нижче кожен із скінченновимірних підпросторів $V_h \subset V$ будемо називати *простором апроксимацій схеми Гальоркіна*або коротше *простором апроксимацій.*

Далі, для кожного фіксованого значення *параметра дискретизації* $h > 0$ визначимо *апроксимацію Гальоркіна* u_h в просторі V_h як розв'язок наступної задачі

$$\begin{cases} \textit{знайти} \quad u_h \in V_h \textit{ таку, що} \\ c(u_h, v) =< l, v > \quad \forall v \in V_h. \end{cases} \tag{1.4.2}$$

Хоча формулювання дискретизованої задачі у вигляді (1.4.2) не підказує явно способу конструктивного відшукання її розв'язку, схема Гальоркіна, як незабаром буде показано нижче(див. п.1.6.5), надає ефективний алгоритм його обчислення як тільки зафіксовано будь-який із базисів простору апроксимацій.

Оскільки схема Гальоркіна лише переносить розв'язування варіаційної задачі в певним чином вибраний скінченновимірний підпростір простору допустимих функцій, то з огляду на теорему 1.3.2 переконуємося в істинності наступного твердження, яке демонструє, що ця процедура зберігає фундаментальні властивості вихідної варіаційної задачі.

Теорема 1.4.1. про коректність дискретизованих за Гальоркіним варіаційних задач міграції субстанції

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2).

Тоді кожна дискретизована за Гальоркіним задача (1.4.2) має єдиний розв'язок $u_h \in V_h$ і при цьому

$$\|\nabla u_h\|_H \le \frac{l_0}{\mu_0}\|f\|_H \quad \forall h > 0. \tag{1.4.3}$$

Тепер, коли ми переконалися у однозначній розв'язуваності дискретизованих за Гальоркіним варіаційних задач, саме час розглянути цю схему з позицій стійкості, апроксимативності і збіжності[3].

[3]Нагадаємо, що згідно знаменитої теореми Філіпова-Лакса із властивостей стійкості та апроксимативності числової схеми випливає збіжність її наближень до шуканого розв'язку задачі.

1.4.2 *Стійкість послідовності апроксимацій*

Зараз ми переформулюємо висновок теореми 1.4.1 про коректність дискретизованих задач (1.4.2) в термінах одного із фундаментальних понять обчислювальної математики, а саме, поняття *стійкості числової схеми.*

Наслідок 1.4.1. про стійкість схеми Гальоркіна

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) і $u \in V$ - її розв'язок. Припустимо також, що послідовність апроксимацій Гальоркіна $\{u_h\} \subset V$ побудована із розв'язків дискретних задач (1.4.2) при $h \to 0$.

Тоді схема Гальоркіна стійка, іншими словами, послідовність її апроксимацій $\{u_h\} \subset V$ утворює обмежену множину в просторі допустимих функцій V і при цьому має має місце оцінка (1.4.3).

Вправа 1.4.1. *Нехай $u \in V$ - точний розв'язок задачі (1.3.1). Доведіть, що*

$$\|\nabla u_h\|_H \le \|\nabla u\|_H \quad \forall h > 0. \tag{1.4.4}$$

Вправа 1.4.2. *Виберемо послідовність просторів апроксимацій $\{V^n\}$ з властивістю*

$$V^1 \subset V^2 \subset \ \dots \ \subset V^n \subset V^{n+1} \subset \ \dots \ \subset V$$

і нехай $u^n \in V^n, n = 1, 2, \ \dots \ ,$ - знайдена в них послідовність апроксимацій Гальоркіна.

Переконайтесь, що

$$\|\nabla u^n\|_H \le \|\nabla u^{n+1}\|_H \le \ \dots \ \le \|\nabla u\|_H \quad \forall n \in \mathbb{N}. \tag{1.4.5}$$

і

$$\|\nabla u^n\|_H \to \|\nabla u\|_H \quad \text{разом із} \quad h \to 0. \tag{1.4.6}$$

Отже, схема Гальоркіна дозволяє однозначно побудувати обмежену нескінченну послідовність наближених розв'язків $\{u_h\}_{h>0} \subset V$ варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) - (1.3.2). Добре відомо, що з такої послідовності можна вибрати хоча б одну збіжну підпослідовність. Але чи буде її границя розв'язком вихідної варіаційної задачі? Як ми побачимо нижче, для стверджувальної відповіді однієї стійкості схеми замало - потрібна ще потенціальна можливість схеми як завгодно точно відтворювати будь-який елемент простору допустимих функцій. Цю властивість ми будемо називати *апроксимативністю числової схеми.*

1.4.3 *Збіжність послідовності апроксимацій*

Ми розпочнемо з важливого допоміжного твердження.

Теорема 1.4.2. про властивості похибки схеми Гальоркіна

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) і $u \in V$ - її розв'язок.

Припустимо також, що послідовність апроксимацій Гальоркіна $\{u_h\} \subset V$ побудована із розв'язків дискретних задач (1.4.2) при $h \to 0$.

Тоді похибка апроксимації Гальоркіна

$$e_h := u - u_h \in V$$

"ортогональна"[4] *до відповідного простору апроксимацій V_h,*

$$c(u - u_h, v) = 0 \quad \forall v \in V_h \quad \forall h > 0. \tag{1.4.7}$$

Більше цього,

$$\|u - u_h\|_V \leq \inf_{v \in V_h} \|u - v\|_V + \frac{\|\beta\|}{\sqrt{\mu_0}} \inf_{v \in V_h} \|u - v\|_H \quad \forall h > 0 \tag{1.4.8}$$

або в іншій редакції

$$\|\nabla(u - u_h)\|_H \leq \left\{ \frac{\|\mu\|}{\mu_0} + ShPe \right\}^{\frac{1}{2}} \inf_{v \in V_h} \|\nabla(u - v)\|_H + \frac{\|\beta\|}{\mu_0} \inf_{v \in V_h} \|u - v\|_H \quad \forall h > 0. \tag{1.4.9}$$

Доведення. Ортогональність апроксимацій Гальоркіна, записана рівнянням (1.4.7), встановлюється почленним відніманням рівнянь варіаційих задач (1.3.1) і (1.4.2) з будь-яким $v \in V_h$.

Використовуючи ортогональність похибки апроксимацій Гальоркіна, нерівність Коші-Буняковського -Шварца і підпорядкованість норм

$$\sqrt{\mu_0}\|\nabla(u - u_h)\|_H \leq \|u - u_h\|_V \tag{1.4.10}$$

обчислюємо оцінки

$$\begin{aligned}
\|u - u_h\|_V^2 &:= c(u - u_h, u - u_h) \\
&= c(u - u_h, u - v - (u_h - v)) = c(u - u_h, u - v) \\
&= a(\mu; u - u_h, u - v) + s(\sigma; u - u_h, u - v) + b(\beta; u - u_h, u - v) \\
&\leq \|u - u_h\|_V \|u - v\|_V + \|\beta\| \|\nabla(u - u_h)\|_H \|u - v\|_H \\
&\leq \|u - u_h\|_V \|u - v\|_V + \frac{\|\beta\|}{\sqrt{\mu_0}} \|u - u_h\|_V \|u - v\|_H \qquad \forall v \in V_h,
\end{aligned} \tag{1.4.11}$$

звідки приходимо до висновку (1.4.8). □

Теорема 1.4.3. про збіжність схеми Гальоркіна

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) і $u \in V$ - її розв'язок. Припустимо також, що послідовність апроксимацій Гальоркіна $\{u_h\} \subset V$ побудована в просторах апроксимацій $\{V_h\}$, які задовольняють наступній умові апроксимативності

$$\forall v \in V \qquad \inf_{v_h \in V_h} \|\nabla(v - v_h)\|_H \to 0 \quad \text{разом із} \quad h \to 0. \tag{1.4.12}$$

Тоді послідовність апроксимацій Гальоркіна $\{u_h\} \subset V$ збігається до розв'язку $u \in V$ варіаційної задачі міграції (1.3.1), тобто

$$\|\nabla(u - u_h)\|_H \to 0 \quad \text{разом із} \quad h \to 0. \tag{1.4.13}$$

[4]Ця похибка ортогональна до простору апроксимацій в звиклому розумінні лише тоді, коли білінійна форма $c(\cdot\,,\cdot\,) : V \times V \to \mathbb{R}$ є скалярним добутком на просторі V.

Доведення. Тільки що отримана нерівність (1.4.9) та щільність (чи *апроксимативність*) просторів апроксимацій, яку виражає припущення (1.4.12), дозволяє прийти до висновку, що

$$\|\nabla(u-u_h)\|_H \leq \left\{\frac{\|\mu\|}{\mu_0} + (1+Sh)Pe\right\} \inf_{v_h\in V_h} \|\nabla(u-v_h)\|_H \to 0 \quad \text{разом із} \quad h\to 0. \quad (1.4.14)$$

Це й завершує доведення теореми. □

Користуючись нагодою, відзначимо, що одержана нами в процесі доведеня оцінка (**??**) недвозначно попереджає, що збіжність послідовності апроксимацій Гальоркіна може бути дуже повільною для сингулярно збурених задач мігрування субстанції. Це власне той випадок, коли критерій подібності Пекле $Pe\to\infty$ або критерій Струхаля $Sh\to\infty$ або число обумовленості матриці коефіцієнтів дифузії $cond(\mu) := \|\mu\|\mu_0^{-1}\to\infty$.

На противагу цій ситуації, наприклад, при критерії Пекле $Pe = 0$, збіжность схеми Гальоркіна може стати дуже швидкою. Чому це так?

Вправа 1.4.3. *Дайте відповідь на останнє запитання.*

1.4.4 *Побудова дискретних рівнянь*

Проаналізуємо, в який спосіб знаходиться довільний член послідовності апроксимацій Гальоркіна.

Зафіксуємо конкретне значення параметра дискретизації $h>0$ і деталізуємо структуру дискретизованої варіаційної задачі (1.4.2). З цією метою виберемо будь-який базис

$$\phi_1(x),\ \dots\ ,\phi_N(x), \qquad N = N(h) := \dim V_h,$$

простору апроксимацій V_h і побудуємо наступну матрицю Грама $G=\{g_{ij}\}_{i,j=1}^N$ цієї системи

$$g_{ij} := \int_\Omega \nabla\phi_i\,.\,\nabla\phi_j\,dx \qquad i,j=1,\ \dots\ ,N. \quad (1.4.15)$$

Вправа 1.4.4. *Доведіть, що білінійна форма*

$$g(u,v) := \int_\Omega \nabla u\,.\,\nabla v\,dx \qquad \forall u,v\in V \quad (1.4.16)$$

визначає скалярний добуток на просторі допустимих функцій V.

Відзначимо тут, що внаслідок лінійної незалежності елементів базису $\{\phi_i\}$ матриця Грама G додатно визначена, тобто, знайдеться $\gamma_0 = \text{const} > 0$ така, що

$$\xi.\,G\xi := \sum_{i,j=1}^N g_{ij}\xi_i\xi_j \geq \gamma_0\|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} \quad \forall\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^N\in\mathbb{R}^N. \quad (1.4.17)$$

Оскільки шукана апроксимація Гальоркіна u_h належить до скінченновимірного простору V_h, то вона однозначно подається лінійною комбінацією елементів його базису

$$u_h(x) := \sum_{j=1}^N q_j\phi_j(x) \qquad \forall h>0 \quad (1.4.18)$$

з невідомими поки що коефіцієнтами

$$q = (q_1, \ \dots \ , q_N).$$

Для їхнього відшукання потрібно визначити систему із N алгебричних рівнянь.

Щоб побудувати рівняння такого сорту, підставимо лінійну комбінацію (1.4.18) у варіаційне рівняння задачі (1.4.2) і після цього послідовно приймемо в них $v := \phi_1(x), \ \dots \ , \phi_N(x)$; в результаті невеличких перетворень ми приведемо дискретизовану варіаційну задачу (1.4.2) до задачі лінійної алгебри вигляду

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{знайти вектор} \ \ q = \{q_i\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N \ \textit{такий, що} \\ \qquad \displaystyle\sum_{j=1}^N c(\phi_j, \phi_i) q_j = < l, \phi_i > \quad i = 1, \ \dots \ , N. \end{array} \right. \tag{1.4.19}$$

Оскільки одержана система лінійних алгебричних рівнянь є лише іншою формою запису коректно поставленої задачі схеми Гальоркіна (1.4.2), то

задача (1.4.19) має єдиний розв'язок $q \in \mathbb{R}^N$,
який неперервно залежить від її даних.

Вправа 1.4.5. *Доведіть, що визначник матриці* $C = \{c(\phi_j, \phi_i)\}_{j,i=1}^N$ *системи рівнянь Гальоркіна (1.4.19) відмінний від нуля.*

Відзначимо тут, що множина даних дискретної задачі повністю успадковує дані неперервної варіаційної задачі (1.3.1) і доповнює їх базисом $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ простору апроксимацій V_h. Власне конкретний вибір базису може в цілому послабити неперервну залежність апроксимацій Гальоркіна $u_h \in V_h$ від даних задачі або, в термінології числового аналізу, послабити *стійкість числових апроксимацій.* В цьому контексті стає зрозумілим, що врешті-решт погіршення якості знайдених наближень слід шукати в накопиченні похибок арифметичних операцій, які виконуються комп'ютером із неминучим заокругленням при розв'язуванні систем лінійних алгебричних рівнянь (1.4.19).

1.4.5 *Обумовленість матриці дискретних рівнянь*

Добре відомо, що точність обчислення розв'язку системи лінійних алгебричних рівнянь суттєво залежить від величини *числа обумовленості* її матриці C, яке визначається так

$$cond(C) := \|C\| \|C^{-1}\|.$$

Чим більше значення числа обумовленості матриці системи рівнянь, тим більше проявляється вплив похибок заокруглення на її розв'язуванні прямими чи ітераційними методами лінійної алгебри; так, при достатно великих значеннях $cond(C)$ можуть траплятись випадки, коли знайдений розв'язок не має нічого спільного з точним розв'язком задачі. Тому системи рівнянь з такими матрицями називають *погано обумовленими.*

В зв'язку з цим корисну характеристику структури рівнянь (1.4.19) схеми Гальоркіна подає наступний результат.

Теорема 1.4.4. про властивості матриці
системи рівнянь Гальоркіна

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2).

Тоді для будь-якого значення параметра дискретизації $h > 0$

(I) матриця $C := \{c(\phi_i, \phi_j)\}_{i,j=1}^N$ системи лінійних алгебричних рівнянь схеми Гальоркіна (1.4.19) додатно визначена [5]*, більш точно,*

$$\xi. C\xi \geq \mu_0 \gamma_0 \|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} \quad \forall \xi = \{\xi_i\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N, \tag{1.4.20}$$

де сталі $\mu_0, \gamma_0 > 0$ характеризують еліптичніть матриці коефіцієнтів дифузії $\{\mu_{ij}\}_{i,j=1}^d$ та матриці Грама $G := \{(\nabla\phi_i, \nabla\phi_j)\}_{i,j=1}^N$ вибраного базису простору апроксимацій V_h відповідно;

(II) число обумовленості матриці C системи (1.4.19) залежить від даних вихідної варіаційної задачі та вибору базису $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ простору апроксимацій наступним чином

$$\begin{aligned} cond(C) = \frac{\|c\|}{\mu_0}\frac{\|G\|}{\gamma_0} &\leq \left\{ \frac{\|\mu\|}{\mu_0} + \frac{l_0\|\beta\|_{\mathcal{B}}}{\mu_0} + \frac{l_0^2\|\sigma\|_\infty}{\mu_0} \right\} \frac{\|G\|}{\gamma_0} \\ &= \left\{ \frac{\|\mu\|}{\mu_0} + (1 + Sh)Pe \right\} cond(G). \end{aligned} \tag{1.4.21}$$

Доведення. Ланцюжок перетворень

$$\begin{aligned} \xi. C\xi &= \sum_{i,j=1}^N c(\phi_i, \phi_j)\xi_i\xi_j = c(\sum_{i=1}^N \xi_i\phi_i, \sum_{j=1}^N \xi_j\phi_j) \\ &\geq \mu_0 \| \sum_{i=1}^N \xi_i \nabla\phi_i\|^2_H = \mu_0 \sum_{i,j=1}^N \xi_i\xi_j \int_\Omega \nabla\phi_i \,.\, \nabla\phi_j \, dx \\ &= \mu_0 \sum_{i,j=1}^N g_{ij}\xi_i\xi_j \geq \mu_0\gamma_0 \|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} \qquad \forall \xi = \{\xi_i\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N \end{aligned} \tag{1.4.22}$$

доводить першу частину теореми.

Друга частина твердження є наслідком теореми 1.3.1 про енергетичну норму і таких оцінок

$$\begin{aligned} \xi. C\xi &= \sum_{i,j=1}^N c(\phi_i, \phi_j)\xi_i\xi_j = c(\sum_{i=1}^N \xi_i\phi_i, \sum_{j=1}^N \xi_j\phi_j) \\ &\leq \{ \|\mu\| + l_0^2 \|\sigma\|_\infty \} \| \sum_{i=1}^N \xi_i\nabla\phi_i\|^2_H \\ &= \{ \|\mu\| + l_0^2 \|\sigma\|_\infty \} \sum_{i,j=1}^N g_{ij}\xi_i\xi_j = \{ \|\mu\| + l_0^2\|\sigma\|_\infty \} \xi. G\xi \\ &\leq \{ \|\mu\| + l_0^2 \|\sigma\|_\infty \} \|G\| \|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} \qquad \forall \xi = \{\xi_i\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^N \end{aligned} \tag{1.4.23}$$

□

Одержана нами оцінка (1.4.21) свідчить, що причинами поганої обумовленості системи рівнянь Гальоркіна (1.4.19) можуть виступати:

1. великі значення числа обумовленості матриці коефіцієнтів дифузії μ субстанції;

[5] Зокрема, додатна визначеність матриці гарантує, що її кожне власне число має додатну дійсну частину.

2. великі значення критеріїв подібності Пекле та/або Струхаля для розглядуваного процесу мігрування субстанції;

3. великі значення числа обумовленості матриці Грама G, утвореної вибраними базисними функціями ϕ_i простору апроксимацій.

Якщо перші два фактори зумовлені об'єктивними характеристиками розглядуваного процесу мігрування субстанції, то останній слід розглядати як застереження щодо наслідків нашого суб'єктивного вибору простору апроксимацій схеми Гальоркіна. В цьому контексті відмінні приклади побудови базисів просторів апроксимацій надають різноманітні схеми методу скінченних елементів.

1.4.6 *Декомпозиція варіаційної задачі*

На цьому етапі стає очевидним той факт, що схема Гальоркіна здійснює декомпозицію розв'язку $u \in V$ варіаційної задачі міграції (1.3.1) до наступного вигляду

$$u := u_h + e_h,$$

де e_h – похибка апроксимації Гальоркіна $u_h \in V_h$. Оскільки остання ортогональна до простору апроксимацій V_h, то, вводячи його доповнення

$$\mathcal{E} := V \backslash V_h,$$

задачу міграції субстанції (1.3.1) можна конкретизувати до такої системи варіаційних рівнянь

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{задано значення параметра дискретизації } h > 0; \\ \textit{знайти } \; u := u_h + e_h \in V_h \oplus \mathcal{E} \textit{ такий, що} \\ \qquad c(u_h, v) \qquad\qquad = < l, v > \qquad \forall v \in V_h, \\ \qquad c(u_h, w) + c(e_h, w) = < l, w > \qquad \forall w \in \mathcal{E}. \end{array} \right. \tag{1.4.24}$$

Структура наведеної нами декомпозиції наочно показує, що схема Гальоркіна при розв'язуванні вихідної варіаційної задачі (1.3.1) ігнорує наявність другого рівняння в системі (1.4.24), досягаючи в цей спосіб обчислювальної ефективності у відшуканні її наближених розв'язків. Поряд з цим згадане рівняння заслуговує на увагу, якщо ми ставимо собі мету відшукати певні апостерірні характеристики похибки апроксимації Гальоркіна.

Дійсно, якщо апроксимація Гальоркіна $u_h \in V_h$ обчислена із першого рівняння (1.4.24), то друге з них дозволяє сформулювати *задачу про похибку схеми Гальоркіна*:

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{задано значення параметра дискретизації } h > 0 \\ \qquad\qquad \textit{та апроксимацію Гальоркіна } u_h \in V_h; \\ \textit{знайти похибку } \; e_h \in \mathcal{E} \textit{ таку, що} \\ \qquad c(e_h, \varepsilon) \; = < l, \varepsilon > - c(u_h, \varepsilon) \qquad \forall \varepsilon \in \mathcal{E}. \end{array} \right. \tag{1.4.25}$$

Далі щойно побудована задача про похибку апроксимацій Гальоркіна (1.4.25) буде слугувати нам основою для розвитку стабілізованих та адаптивних схем розв'язування сингулярно збурених задач міграції субстанції.

1.4.7 *Функціонал джерел похибок*

Функціонал $\rho(u_h) : V \to \mathbb{R}$ рівняння задачі про похибку (1.4.25) , визначений згідно правила

$$v \ \to < \rho(u_h), v > := < l, v > - c(u_h, v), \qquad \forall v \in V \tag{1.4.26}$$

часто називають *функціоналом джерел похибок схеми Гальоркіна.* Мотивацією такої назви слугує наступне твердження.

Теорема 1.4.5. про функціонал джерел похибок
схеми Гальоркіна

Нехай варіаційна задача міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2) коректно поставлена і $u \in V$ - її розв'язок. Припустимо також, що апроксимація Гальоркіна $u_h \in V_h$ побудована як розв'язок дискретної задачі (1.4.19) з $h > 0$.

Тоді функціонал джерел похибок $\rho(u_h) : V \to \mathbb{R}$ із (1.7.62) характеризується такими властивостями:

$$< \rho(u_h), v > \equiv 0 \qquad \forall v \in V_h, \tag{1.4.27}$$

$$< \rho(u_h), u - u_h > = \|u - u_h\|_V^2 \equiv c(u - u_h, u - u_h) \qquad \forall h > 0. \tag{1.4.28}$$

Доведення. Із визначення (1.7.62) та рівняння задачі (1.3.1) приходимо до такого двоїстого подання [6] функціоналу похибок

$$\begin{aligned} < \rho(u_h), v > = < l, v > - c(u_h, v) &= c(u, v) - c(u_h, v) \\ &= c(u - u_h, v) \qquad \forall v \in V \quad \forall h > 0. \end{aligned} \tag{1.4.29}$$

Підставляючи в праву частину щойно одержаної рівності (1.4.29) $v \in V_h$ і згадуючи про ортогональність похибки схеми Гальоркіна до простору апроксимацій (див. теорему **??**), приходимо до (1.4.27).

Ключова властивість функціоналу похибок (1.4.28) одержується із (1.4.29) за вибору $v = u - u_h$. □

Користуючись нагодою, зауважимо, що, наділяючи простір допустимих функцій V енергетичною нормою $\|\cdot\|_V$, ми за допомогою (1.4.29) легко приходимо до виразу для обчислення норми функціоналу джерел похибок апроксимацій Гальоркіна

$$\|\rho(u_h)\|_* := \sup_{0 \neq v \in V_h} \frac{|< \rho(u_h), v >|}{\|v\|_V} = \|u - u_h\|_V \quad \forall h > 0. \tag{1.4.30}$$

1.4.8 *Апостеріорні оцінки похибок*

6

1.4.9 *Послідовне уточнення апроксимацій Гальоркіна*

Тут ми розглянемо рекурентну процедуру, яка дозволяє будувати апроксимації Гальоркіна з наперед гарантованою точністю наближення до розв'язку $u \in V$ задачі мігрування субстанції (1.3.1). Вона грунтується на можливості обчислення апостеріорних оцінок похибок і містить наступні складові.

(0) Для заданого значення параметра дискретизації $h > 0$ розв'язуємо дискретизовану за Гальоркіним задачу (1.4.2). Знайдена апроксимація $u_h \in V_h$ може виявитися дуже грубою і, отже, вимагає уточнення. З цією метою приймемо значення лічильника кроків уточнення $n = 1$ і покладемо

$$u^n := u_h, \quad V^1 := V_h.$$

(1) Вибираємо скінченновимірний підпростір $\mathcal{E}^n \subset E := V \backslash V^n$ і розв'язуємо в ньому наступну варіаційну задачу про апроксимацію похибки:

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{задано} \quad \mathcal{E}^n \subset V \backslash V^n, \quad \dim \mathcal{E}^n < +\infty, \\ \qquad\qquad \textit{та апроксимацію Гальоркіна } u_h \in V_h; \\ \textit{знайти похибку } \ e^n \in \mathcal{E}^n \ \textit{таку, що} \\ \qquad\qquad c(e^n, w) \ =< \rho(u^n), w >:=< l, w > -c(u^n, w) \qquad \forall w \in \mathcal{E}^n. \end{array} \right. \tag{1.4.31}$$

(2) Обчислюємо апостеріорну оцінку знайденої похибки в такий спосіб:

$$\begin{aligned} \|e^n\|_V^2 &=< \rho(u^n), e^n > \\ &=< l, e^n > -c(u^n, e^n). \end{aligned} \tag{1.4.32}$$

(3) Уточнюємо знайдену апроксимацію Гальоркіна згідно правила

$$u^{n+1} := u^n + e^n \in V^{n+1} := V^n \oplus \mathcal{E}^n. \tag{1.4.33}$$

(4) Обчислюємо значення оцінювача похибки

$$\eta^n := \frac{\|e^n\|_V}{\|u^{n+1}\|_V} \cdot 100 \tag{1.4.34}$$

і порівнюємо його із заданою (у відсотках) відносною похибкою наближення ε.

(5) Якщо $\eta^n \le \varepsilon$, то розв'язок варіаційної задачі знайдено із гарантованою точністю; в протилежному випадку продовжуємо процес обчислень, розпочинаючи з етапу (1).

Таким чином, після виконання n кроків даного рекурентного алгоритму (1)-(5) ми знаходимо уточнену апроксимацію Гальоркіна такого вигляду

$$\left\{ \begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + e^n \\ &= u_h + \sum_{m=1}^{n} e^m \in V^{n+1} := V_h \oplus \mathcal{E}^1 \oplus \ \dots \ \oplus \mathcal{E}^n. \end{aligned} \right. \tag{1.4.35}$$

Вправа 1.4.6. *Переконайтеся, що рекурентне знаходження уточнень апроксимацій Гальоркіна описується задачею для системи варіаційних рівнянь вигляду*

$$\begin{cases} \text{задано значення параметра дискретизації } h > 0; \\ \text{знайти } \ u^{n+1} = u_h + \sum\limits_{m=1}^{n} e^m \in V_h \oplus \mathcal{E}^1 \oplus \ \dots \ \oplus \mathcal{E}^n \quad \text{такий, що} \\ \qquad c(u_h, v) \hfill =< l, v > \qquad \forall v \in V_h, \\ \\ \qquad c(u_h, v) + c(e^1, v) \hfill =< l, v > \qquad \forall v \in \mathcal{E}^1, \\ \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \ddots \qquad\qquad \vdots \\ \qquad c(u_h, v) + c(e^1, v) + \ \cdots \ + c(e^n, v) =< l, v > \qquad \forall v \in \mathcal{E}^n. \end{cases} \tag{1.4.36}$$

Покажіть, що матриця відповідної їй системи алгебричних рівнянь має всі нульові блоки вище діагоналі.

Нижче ми конкретизуємо можливості даної рекурентної схеми в контексті технології методу скінченних елементів. Комп'ютерні експерименти засвідчують, що стартуючи з доволі грубих наближень $u_h \in V_h$ рекурентна схема (1)-(4) збігається за скінченну кількість кроків за довільного наперед визначеного значення толерантності до похибки ε.

1.5 Аналіз апроксимацій методу скінченних елементів

1.5.1 *Тріангулювання області визначення розв'язку*

1.5.2 *Інтерполяційні простори апроксимацій*

Вправа 1.5.1.

1.5.3 *Обумовленість матриці системи рівнянь*

Як вже відзначалося раніше, див. оцінку (1.4.21) з теореми 1.4.4, однією із причин поганої обумовленості системи рівнянь Гальоркіна (1.4.19) може стати погана обумовленість матриці Грама G, утвореної базисними функціями ϕ_i простору апроксимацій V_h. Нагадаємо тут, що її коефіцієнти обчислюються згідно правил

$$g_{ij} := \int\limits_{\Omega} \nabla \phi_i \, . \, \nabla \phi_j \, dx \qquad i, j = 1, \ \dots \ , N. \tag{1.5.1}$$

Наша найближча мета — знайти апріорні оцінки числа обумовленості для випадку, коли базиси просторів апроксимацій побудовано за технологією методу скінченних елементів.

Основна роль у нашому аналізі належить наступному результату.

Теорема 1.5.1. про оцінки норм
на трикутному скінченному елементі

Нехай K — довільний трикутний елемент триангуляції $\mathcal{T}_h$ з системою барицентричних координат $\{L_i\}_{i=1}^3$.

Тоді будуть правильними наступні оцінки норм

$$\begin{gathered}
\tfrac{1}{12}|K|\|\xi\|^2 \le \|v\|^2_{L^2(K)} \le \tfrac{1}{3}|K|\|\xi\|^2, \qquad \|\xi\|^2 := \sum_{i=1}^{3}\xi_i^2, \\
\|\nabla v\|^2_{L^2(K)} \le \frac{6}{\rho_K^2}\|v\|^2_{L^2(K)} \qquad \forall v := \sum_{i=1}^{3}\xi_i L_i \in P_1(K).
\end{gathered} \tag{1.5.2}$$

Доведення. Для початку зауважимо, що

$$\|v\|^2_{L^2(K)} = \int\limits_K (\sum_{i=1}^{3}\xi_i L_i)^2\,dx = \frac{2|K|}{4!}\,\xi.\,M\xi,$$

де матриця

$$M := \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

є матрицею Грама системи барицентричних координат $\{L_i\}_{i=1}^3$ відносно скалярного добутку в $L^2(K)$. Як легко переконатися безпосередніми обчисленнями, власні числа цієї матриці є такими

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 1, \quad \lambda_3 = 4;$$

отже,

$$\lambda_1\|\xi\|^2 \le \xi.\,M\xi \le \lambda_3\|\xi\|^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^3,$$

звідки й випливають двосторонні оцінки з (1.5.2).

Далі, подібним чином знаходимо, що

$$\|\nabla v\|^2_{L^2(K)} = \int\limits_K (\sum_{i=1}^{3}\xi_i \nabla L_i)^2\,dx = \frac{1}{2}\,\xi.\,D\xi,$$

де матриця

$$D := \frac{1}{2|K|}\begin{pmatrix} (b_1^2+c_1^2) & (b_1b_2+c_1c_2) & (b_1b_3+c_1c_3) \\ & (b_2^2+c_2^2) & (b_2b_3+c_2c_3) \\ \textit{симетр.} & & (b_3^2+c_3^2) \end{pmatrix}.$$

Найбільше власне число цієї матриці

$$\lambda_{max} = \kappa + \sqrt{(\kappa^2 - 1)} \le 2\kappa, \quad \kappa := \frac{1}{2|K|}\sum_{i=1}^{3}(b_i^2 + c_i^2).$$

Тому

$$\begin{aligned} \|\nabla v\|^2_{L^2(K)} &= \frac{1}{2}\,\xi .\, D\xi \le \frac{1}{8|K|}\sum_{i=1}^{3}(b_i^2+c_i^2)\|\xi\|^2 \\ &\le \frac{12}{8|K|^2}\sum_{i=1}^{3}(b_i^2+c_i^2)\|v\|^2_{L^2(K)} \quad \forall v := \sum_{i=1}^{3}\xi_i L_i \in P_1(K). \end{aligned} \tag{1.5.3}$$

Якщо зауважити, що довжини сторін $|S_i|$ трикутника K обчислюються згідно правил

$$|S_i| = (b_i^2+c_i^2)^{\frac{1}{2}},$$

то

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2|K|)^2}\sum_{i=1}^{3}(b_i^2+c_i^2) &= \frac{1}{(2|K|)^2}\sum_{i=1}^{3}|S_i|^2 \\ &\le \Big(\frac{1}{2|K|}\sum_{i=1}^{3}|S_i|\Big)^2 = \frac{1}{\rho_K^2}. \end{aligned} \tag{1.5.4}$$

Нарешті, підстановка щойно одержаної оцінки (1.5.4) в (1.5.3) приводить нас до останьої нерівності в (1.5.2). □

Наслідок 1.5.1. *Розглянемо простір кусково визначених перерервних функцій*

$$V_h := \{v \in H_0^1(\Omega)\cap C(\Omega) \ : \ v|_K \in P_1(K) \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\} \tag{1.5.5}$$

з базисом $\{\phi_i\}_{i=1}^N$, *побудованим методом скінченних елементів.*

Тоді мають місце наступні оцінки

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{12}\{\min_{K\in\mathcal{T}_h}|K|\}\|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} \le \|v\|^2_H \le C\{\max_{K\in\mathcal{T}_h}|K|\}\|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N}, &\qquad \|\xi\|^2_{\mathbb{R}^N} := \sum_{i=1}^{N}\xi_i^2, \\ \|\nabla v\|^2_H \le C\frac{1}{\min\limits_{K\in\mathcal{T}_h}\rho_K^2}\|v\|^2_H &\qquad \forall v := \sum_{i=1}^{N}\xi_i\phi_i \in V_h. \end{aligned} \tag{1.5.6}$$

зі сталою $C = const > 0$, *значення якої не залежить від величин, що нас цікавлять.*

Тепер припустимо, що структура кожної із послідовності вжитих нами триангуляцій $\mathcal{T}_h = \{K\}$ задовольняє наступні умови регулярності:

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{знайдуться сталі } \ \tau_0, \tau_1 > 0 \ \textit{ такі, що} \\ \textit{для кожного значення параметра дискретизації} \quad h := \max\limits_{K\in\mathcal{T}_h} h_K \\ \qquad \rho_K := \{\textit{радіус вписаного в } K \textit{ кола}\} \ge \tau_0 h_K, \\ \qquad h_K := \ \mathrm{diam}\, K \ge \tau_1 h \qquad \forall\, K \in \mathcal{T}_h \quad \forall h > 0. \end{array} \right. \tag{1.5.7}$$

Перша із цих умов стверджує, що скінченні елементи кожної триангуляції не можуть мати, по суті, малих кутів, а друга — що всі скінченні елементи K з триангуляції $\mathcal{T}_h$ є, згрубше кажучи, одного розміру. Триангуляції з властивостями (1.5.7) називають *квазірівномірними.*

Теорема 1.5.2. про число обумовленості матриці Грама
для базисних функцій МСЕ

Припустимо, що Ω є полігональною областю в просторі $\mathbb{R}^2$ з неперервною за Ліпшицем межею Γ і $\{\mathcal{T}_h\}$ є регулярною сім'єю триангуляцій, на елементах кожної з яких побудовано простори апроксимацій вигляду

$$V_h := \{v \in H_0^1(\Omega) \cap C(\Omega) \ : \ \ v|_K \in P_m(K) \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \quad m \geq 1, \tag{1.5.8}$$

з базисами

$$\phi_1(x), \ \dots \ , \phi_N(x), \qquad N = N(h) := dim\, V_h.$$

Тоді для кожної матриці Грама G, утвореної базисними функціями ϕ_i простору апроксимацій V_h, знайдеться $C = const > 0$ така, що

$$\begin{aligned} cond(G) = \frac{\|G\|}{\gamma_0} &\leq C\{\min_{K \in \mathcal{T}_h} |K|\}^{-1} \\ &\leq Ch^{-2} \qquad \forall h > 0. \end{aligned} \tag{1.5.9}$$

Доведення. □

1.5.4 *Апріорні оцінки швидкості збіжності*

Теорема 1.5.3. про збіжність апроксимацій МСЕ
для задач міграції субстанції

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2). На додаток до цього припустимо, що Ω є полігональною областю в просторі $\mathbb{R}^d$ ($d = 2$ або 3) з неперервною за Ліпшицем межею Γ і $\{\mathcal{T}_h\}$ є регулярною сім'єю триангуляцій, на елементах кожної з яких побудовано простори апроксимацій вигляду

$$V_h := \{v \in H_0^1(\Omega) \bigcap C(\Omega) \ \ : \ \ v|_K \in P_m(K) \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \quad m \geq 1. \tag{1.5.10}$$

Тоді

(I) послідовність апроксимацій методу скінченних елементів $\{u_h\} \subset V$, кожен член $\{u_h\} \in V_h$ якої визначається однозначно із (1.4.19), збігається при $h \to 0$ до розв'язку $u \in V$ варіаційної задачі міграції (1.3.1)-(1.3.2), зокрема,

$$\|\nabla e\|_H = \|\nabla(u - u_h)\|_H \to 0 \quad \textit{при} \quad h \to 0\,; \tag{1.5.11}$$

(II) якщо при цьому розв'язок вихідної варіаційної задачі $u \in V \cap H^s(\Omega)$ з деяким $s \geq 1$, то швидкість збіжності апроксимацій методу скінченних елементів характеризується наступною апріорною оцінкою

$$\|\nabla(u - u_h)\|_H \leq \mathcal{K} h^p \|u\|_{s,\Omega}\,, \tag{1.5.12}$$

де

$$p := min\{m, s - 1\} \tag{1.5.13}$$

та

$$\mathcal{K} := \{cond(\mu) + (1 + Sh)Pe\}. \tag{1.5.14}$$

Доведення. □

1.5.5 *Апостеріорні оцінки похибок*

1.6 Стабілізовані схеми МСЕ для задач міграції

Наша мета - висвітлити основні ідеї, яким чином задачі міграції домішок з великими числами Пекле та Струхаля можуть бути задовільно розв"язані за допомогою стабілізованих схем методу скінченних елементів.

Для спрощення викладу ми припустимо, що розв'язок $u \in V$ вихідної варіаційної задачі (1.3.1)-(1.3.2) задовольняє наступну умову регулярності

$$u \in V \cap H^{m+1}(\Omega), \quad m \geq 1.$$

Тоді, як випливає із теореми 1.6.1, якість класичних апроксимацій методу скінченних елементів $u_h \in V_h$ характеризується наступною апріорною оцінкою похибки

$$\|\nabla(u - u_h)\|_H \leq \{cond(\mu) + (1 + Sh)Pe\}h^m \|u\|_{m+1,\Omega}\,. \tag{1.6.1}$$

За умов, скажімо, домінуючої конвекції, права частина цієї оцінки стає великою і числові результати демонструють паразитичні осциляції або інші недоліки наближень нефізичного походження.

1.6.1 *Узагальнення схеми Гальоркіна*

Стабілізовані методи в цьому випадку покращують апроксимації методу скінченних елементів за допомогою певного узагальнення схеми Гальоркіна, при якому, наприклад, білінійна форма та лінійний функціонал варіаційної задачі (1.3.1)-(1.3.2) замінюються відповідно на форми

$$\begin{cases} c_h(u,v) := c(u,v) + \sum\limits_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K (Lu)(\tau L_\xi v)\, dx, \\ < l_h, v >:=< l, v > + \sum\limits_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K f(\tau L_\xi v)\, dx \qquad\qquad \forall\, u, v \in V_h \end{cases} \tag{1.6.2}$$

з оператором стабілізації

$$L_\xi v := -\xi \nabla.\{\mu \nabla v\} + \beta.\nabla v + \sigma v, \qquad \xi = const, \tag{1.6.3}$$

та кусково визначеною функцією стабілізації $\tau = \tau(x)$ з властивістю

$$\tau|_K := \tau_K(x) := \lambda \frac{h_K}{|\beta(x)|}\,, \qquad \lambda = const > 0. \tag{1.6.4}$$

Таким чином, стабілізовані схеми методу скінченних елементів замінюють задачу про відшукування апроксимацій Гальоркіна (1.4.19) задачею

$$\begin{cases} \textit{задано тріангуляцію скінченних елементів} \quad \mathcal{T}_h = \{K\}, \\ \qquad \textit{пов'язаний з нею простір апроксимацій } V_h \textit{ та} \\ \qquad \textit{параметри стабілізування } \xi = const \textit{ і } \lambda = const > 0; \\ \textit{знайти апроксимацію } u_h^* \in V_h \textit{ таку, що} \\ \qquad\qquad c_h(u_h^*, v) =< l_h, v > \qquad \forall v \in V_h. \end{cases} \tag{1.6.5}$$

Підкреслимо тут, що, по суті, розглянутий нами спосіб узагальнення схеми Гальоркіна є нічим іншим як збуренням варіаційного рівняння класичної схеми Гальоркіна за допомогою додавання певних білінійних форм та лінійних функціоналів, визначених на існуючій триангуляції скінченних елементів. Таким чином, реалізація подібних узагальнених схем вимагає лише певної доробки існуючих програм для обчислення звиклих апроксимацій методу скінченних елементів. Основна специфіка цих доопрацювань, взагалі кажучи, пов'язана із необхідністю оперувати з частковими похідними другого порядку на кожному скінченному елементі.

1.6.2 *Сумісні стабілізовані схеми*

Зауважимо тут, що, використовуючи інтегрування частинами і поділ $\mathcal{T}_h = \{K\}$, рівняння задачі узагальненої схеми Гальоркіна (1.6.5) можна записати так:

$$\sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K (Lu_h^* - f)(v + \tau L_\xi v)\, dx = \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} (Lu_h^* - f, v + \tau L_\xi v)_K = 0 \qquad \forall\ v \in V_h. \tag{1.6.6}$$

Цей запис явно показує специфіку стабілізованих схем МСЕ: вони намагаються ортогоналізувати нев'язку рівняння міграції субстанції

$$\mathcal{R}(v) := (Lv - f)|_K \quad \forall\, v \in V \quad \forall\, K \in \mathcal{T}_h \tag{1.6.7}$$

не до елементів вибраного базису простору апроксимацій, а до деякої їхньої лінійної комбінації за участю кусково визначеного оператора стабілізування L_ξ та функції стабілізації τ. Найбільш відомими варіантами вибору цього оператора є такі:
(!) $\xi = 0$ — добре відома схема Брукса-Х'юза (1982), названа ними SUPG-схемою (вона повністю вилучає дифузію з оператора стабілізування);
(!!) $\xi = -1$ — DWG-схема Дугласа-Вонга (1989) (вона використовує за оператор стабілізування спряжений оператор мігрування, згрубше кажучи, змінює знак вектора конвективного перенесення на протилежний);
(!!!) $\xi = +1$ — схема збалансованого штрафування нев'язки на кожному скінченному елементі за допомогою найменших квадратів (GaLS-схема за Франка-Х'юзом (1993) або ЛНК-схема в термінології авторів статті (1999)).

Зауважимо, що всі три схеми співпадають між собою, якщо простір апроксимацій побудовано на кусково лінійних функціях Куранта. Спільною рисою цих схем є те, що їхні збурюючі доданки анулюються на розв'язку неперервної варіаційної задачі мігрування. За цією ознакою стабілізовані схеми (1.6.5) називають *строго сумісними* (з задачею (1.3.1)). Більше цього, оскільки точний розв'язок $u \in V$ приводить нев'язку до вигляду

$$\mathcal{R}(v) := L(v - u)|_K \quad \forall\, v \in V \quad \forall\, K \in \mathcal{T}_h, \tag{1.6.8}$$

то рівнянню задачі узагальненої схеми Гальоркіна (1.6.5) можна надати вигляду

$$c(u_h^*, v) + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K L(u_h^* - u)(\tau_K L_\xi v)\, dx = < l, v > \qquad \forall\ v \in V_h \tag{1.6.9}$$

або

$$\sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K L(u_h^* - u)(v + \tau_K L_\xi v)\, dx = 0 \quad \forall\ v \in V_h. \tag{1.6.10}$$

З іншого боку, за вибору функції стабілізації $\tau \to 0$, точніше, її параметра $\lambda \to 0$, сумісні стабілізовані схеми вироджуються до звиклої схеми Гальоркіна.

1.6.3 *Локалізовані найменші квадрати*

Тут ми детальніше проаналізуємо стабілізовану схему (1.6.5) з параметром $\xi = +1$. В цьому випадку варіаційне рівняння схеми має наступну структуру

$$c(u_h^*, v) + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int\limits_K \tau_K L(u_h^* - f)(Lv)\, dx =< l, v > \qquad \forall\, v \in V_h. \tag{1.6.11}$$

Збурюючий доданок цього рівняння становить лінійну комбінацію варіаційних рівнянь функціоналу найменших квадратів для зваженої мінімізації нев'язок (1.6.7) на кожному скінченному елементі K триангуляції $\mathcal{T}_h$. Відповідно ваги τ_K цієї лінійної комбінації можна інтерпретувати як штрафні множники,які призначаються за невиконання апроксимацією u_h^* рівняння міграції на кожному скінченному елементі.

З іншого боку, вибір величини таких штрафів τ_K повинен здійснюватися в такий спосіб, щоб залишати схемі (1.6.5) достатно можливостей для належного відтворення апроксимацією $u_h^* \in V_h$ структури розв'язку вихідної варіаційної задачі міграції (1.3.1)-(1.3.2). Тому в цілому схему локалізованих найменших квадратів (1.6.11) можна розглядати як певну *регуляризацію класичної схеми методу скінченних елементів за допомогою збалансованого штрафування нев'язок (1.6.7) на елементах триангуляції $\mathcal{T}_h$.*

Тепер ми хочемо дати відповідь на запитання, як для заданої триангуляції $\mathcal{T}_h = \{K\}$ та вибраного базису простору апроксимацій V_h визначити функцію стабілізування $\tau = \tau(x)$ схеми локалізованих найменших квадратів (1.6.11) в такий спосіб, щоб найкраще наблизитися до точного розв'язку $u \in V$ задачі (1.3.1)-(1.3.2) в сенсі норми $\| \,.\, \|_V$.

Теорема 1.6.1. про збіжність стабілізованої схеми
локалізованих найменших квадратів

Нехай виконуються гіпотези теореми 1.3.2 про коректність варіаційної задачі міграції субстанції (1.3.1) зі структурними складниками (1.3.2). На додаток до цього припустимо, що Ω є полігональною областю в просторі $\mathbb{R}^d$ ($d = 2$ або 3) з неперервною за Ліпшицем межею Γ і $\{\mathcal{T}_h\}$ є регулярною сім'єю триангуляцій, на елементах кожної з яких побудовано простори апроксимацій вигляду

$$V_h := \{v \in H_0^1(\Omega) \bigcap C(\Omega) \ \ : \ \ v|_K \in P_m(K) \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \quad m \geq 1. \tag{1.6.12}$$

Тоді

(I) послідовність апроксимацій методу скінченних елементів $\{u_h\} \subset V$, кожен член $\{u_h\} \in V_h$ якої визначається однозначно із (1.4.19), збігається при $h \to 0$ до розв'язку $u \in V$ варіаційної задачі міграції (1.3.1)-(1.3.2), зокрема,

$$\|\nabla e\|_H = \|\nabla(u - u_h)\|_H \to 0 \quad при \quad h \to 0\,; \tag{1.6.13}$$

(II) якщо при цьому розв'язок вихідної варіаційної задачі $u \in V \cap H^s(\Omega)$ з деяким $s \geq 1$, то швидкість збіжності апроксимацій методу скінченних елементів характеризується наступною апріорною оцінкою

$$\|\nabla(u - u_h)\|_H \leq \mathcal{K} h^p \|u\|_{s,\Omega}\,, \tag{1.6.14}$$

де

$$p := min\{m, s-1\} \tag{1.6.15}$$

та

$$\mathcal{K} := \{cond(\mu) + (1 + Sh)Pe\}. \tag{1.6.16}$$

Тоді послідовність розв'язків $\{u_h^*\}$ регуляризованих задач (1.6.11) характеризується наступною апріорною оцінкою відхилень від точного розв'язку $u \in V$ задачі міграції

$$\begin{aligned} &\|u - u_h^*\|_V^2 + \mu^{-1} \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \tau_K |Lu_h^* - f|_{0,K}^2 \\ &\qquad \le Ch^{2p}\Big\{[1 + Pe_h^2 + \mu^{-1}\sigma h^2]\, |u|_{p+1,K}^2 \\ &\qquad\qquad + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \tau_K \mu h_K^{-2} [1 + Pe_K^2 + (\mu^{-1}\sigma h_K^2)^2]\, |u|_{p+1,K}^2 \Big\} \qquad \forall\ h > 0. \end{aligned} \tag{1.6.17}$$

Доведення. Неважко побачити, що похибка схеми локалізованих найменших квадратів

$$e_h^* := u - u_h^* \tag{1.6.18}$$

задовольняє рівняння

$$c(e_h^*, v) + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int_K \tau_K (Le_h^*)(Lv)\, dx = 0 \quad \forall\ v \in V_h, \tag{1.6.19}$$

звідки

$$\begin{aligned} &c(e_h^*, e_h^*) + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \tau_K \|Le_h^*\|_{0,K}^2 \\ &\qquad = c(e_h^*, u - v) + \sum_{\mathcal{K}\in\mathcal{T}_h} \int_K \tau_K (Le_h^*)[L(u - v)]\, dx \quad \forall\ v \in V_h \quad \forall\ h > 0. \end{aligned} \tag{1.6.20}$$

Застосовуючи для оцінки доданків правої частини (1.6.20) елементарну нерівність

$$ab \le \frac{1}{4\varepsilon} a^2 + \varepsilon b^2 \quad \forall\ \varepsilon > 0 \quad \forall\ a, b \in \mathbb{R}, \tag{1.6.21}$$

приведемо її до вигляду

□

1.7 Адаптивні схеми МСЕ для задач міграції

Адаптивні схеми методу скінченних елементів ставлять собі за мету знайти наближений розв'язок $u \in V$ вихідної варіаційної задачі (1.3.1)-(1.3.2) з наперед гарантованою точністю. З огляду на цю обставину вони в загальному випадку зорієнтовані на розв'язування наступної задачі оптимізації чисельної схеми методу скінченних елементів:

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{задано допустимий рівень (толерантність) похибки } \ \varepsilon = const > 0 \\ \qquad \textit{для апроксимацій методу скінченних елементів;} \\ \textit{знайти триангуляцію зі скінченних елементів } \ \mathcal{T}_h = \{K\} \textit{ та} \\ \qquad \textit{пов'язаний з нею простір апроксимацій } \ V_h \\ \qquad \textit{такі, що дозволяють} \\ \qquad \textit{з мінімальними обчислювальними витратами} \\ \qquad \textit{знайти розв'язок } \ u_h \in V_h \textit{ рівняння} \\ \qquad\qquad c_h(u_h, v) =< l_h, v > \qquad \forall v \in V_h, \\ \qquad\qquad \textit{здатний задовольнити критерій} \\ \qquad\qquad\qquad \|u - u_h\|_V \le \varepsilon. \end{array} \right. \tag{1.7.1}$$

Цілком зрозуміло, що тільки що сформульована задача для побудови схеми МСЕ є надзвичайно складною в практичній реалізації і повинна мати серйозне математичне підгрунтя для можливості успішних застосувань до широкого кола прикладних проблем. Більше цього, такі і подібні нелінійні задачі добре розв'язуються ітераційними методами, тому одразу фундаментального значення набувають:
(i) гнучкість алгоритмів тріангулювання областей визначення шуканого розв'язку, які самі по собі можуть бути складної структури;
(ii) надійність апостеріорних оцінок похибки знайденого наближення, здатних відтворювати її розподіл між елементами тріангуляції;
(iii) .

Серед поширених часткових розв'язків задачі оптимізації (1.7.1) ми відзначимо

- $h-$*адаптивні схеми МСЕ,* які за допомогою *локального згущення-розрідження скінченних елементів* знаходять таку тріангуляцію, що здатна відтворити структуру шуканого розв'язку з апріорі зафіксованим виглядом поліноміальної апроксимації на кожному скінченному елементі ;

- $p-$*адаптивні схеми МСЕ*, які на апріорі вибраній тріангуляції належним чином *підвищують-понижують порядки поліноміальної апроксимації* на кожному скінченному елементі ;

- $hp-$*адаптивні схеми МСЕ*, які в той чи інший спосіб *комбінують* переваги одного та іншого зі згаданих вище підходів.

Зауваження 1.7.1. про становлення концепції адаптивних схем МСЕ *Адаптивні схеми МСЕ ведуть свою історію від піонерської праці Бабушки-Рейнболдта [???]. Після появи праць*

Нижче ми зупинимося лише на $h-$адаптивній схемі МСЕ, відсилаючи за іншими версіями методу скінченних елементів до праць [???].

1.7.1 Модельна задача

Щоб пояснити суть h-адаптивної схеми МСЕ в деталях, ми розпочнемо з такого прикладу

$$\begin{cases} \text{знайти функцію } u = u(x) \text{ таку, що} \\ Lu := -\{\mu u'\}' + \beta u' + \sigma u = f \qquad \text{в} \quad \Omega := (0,1), \\ \qquad\qquad u(0) = u(1) = 0. \end{cases} \tag{1.7.2}$$

Крайова задача (1.7.2) допускає варіаційне формулювання вигляду

$$\begin{cases} \text{знайти } u \in V \text{ такий, що} \\ \qquad c(u,v) = < l, v > \quad \forall v \in V. \end{cases} \tag{1.7.3}$$

з такими структурними елементами

$$\begin{cases} V := H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : \; v(0) = v(1) = 0\}, \\ c(u,v) := a(\mu; u, v) + b\,(\beta; u, v) + s(\sigma; u, v), \\ a(\mu; u, v) := \int\limits_0^1 \mu u'\, v'\, dx \;, \\ b\,(\beta; u, v) := \int\limits_0^1 \beta u'\, v\, dx \;, \\ s(\sigma; u, v) := \int\limits_0^1 \sigma u v\, dx \;, \\ < l, v > := \int\limits_0^1 f v\, dx \qquad\quad \forall\; u, v \in V. \end{cases} \tag{1.7.4}$$

1.7.2 Кусково лінійні апроксимації МСЕ

Зафіксувавши натуральне N, поділимо відрізок $[0,1]$ на скінченні елементи [7] $K_{i+\frac{1}{2}} := (x_i, x_{i+1})$ довжини $h_{i+\frac{1}{2}} := x_{i+1} - x_i$, $i = 0, \; \ldots \; , N-1$. На кожному з них виберемо лінійну апроксимацію шуканого розв'язку варіаційної задачі міграції у вигляді [8]

$$\begin{aligned} u(x) \simeq u_{i+\frac{1}{2}}(x) &:= q_i[1 - \omega_{i+\frac{1}{2}}(x)] + q_{i+1}\omega_{i+\frac{1}{2}}(x) \\ &= q_i + h_{i+\frac{1}{2}}\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)\dot{q}_{i+\frac{1}{2}} \\ &= q_{i+\frac{1}{2}} + [\omega_{i+\frac{1}{2}}(x) - \tfrac{1}{2}]h_{i+\frac{1}{2}}\dot{q}_{i+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{1.7.5}$$

$$\omega_{i+\frac{1}{2}}(x) := \frac{x - x_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} \qquad \forall x \in \bar{K}_{i+\frac{1}{2}} = [x_i, x_{i+1}], \quad i = 0, \; \ldots \; , N-1.$$

[7] Тут і далі дробовим індексом ми відзначаємо номер скінченного елемента і певні його характеристики, скажімо, $x_{i+\frac{1}{2}} := \frac{1}{2}(x_{i+1} + x_i)$ - це центр ваги скінченного елемента $K_{i+\frac{1}{2}} := [x_i, x_{i+1}]$. Подібним чином,

$$g_{i+\frac{1}{2}} \equiv \{g(x)\}_{i+\frac{1}{2}} := g(x_{i+\frac{1}{2}}).$$

[8] Легко бачити, що лінійні функції

$$L_i(x) := \omega_{i+\frac{1}{2}}(x), \quad L_{i+1}(x) := 1 - \omega_{i+\frac{1}{2}}(x)$$

утворюють систему барицентричних координат на скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}} := [x_i, x_{i+1}]$.

Тут ми скористались позначеннями

$$\left\{ \begin{aligned} q_{i+\frac{1}{2}} &:= \tfrac{1}{2}(q_{i+1} + q_i), \\ \dot{q}_{i+\frac{1}{2}} &:= \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}}(q_{i+1} - q_i) \end{aligned} \right. \tag{1.7.6}$$

для величин, які характеризують середнє значення апроксимації $u_h(x)$ та швидкості її зміни на скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}}$.

На доповнення до (1.7.5) принагідно відзначимо, що

$$u'(x) \simeq u'_{i+\frac{1}{2}}(x) = \dot{q}_{i+\frac{1}{2}} \qquad \forall x \in K_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, \ \dots \ , N-1. \tag{1.7.7}$$

Врешті-решт, враховуючи головні крайові умови варіаційної задачі (1.7.3), одержимо, що

$$q_0 = 0, \quad q_N = 0, \tag{1.7.8}$$

і запишемо кусково лінійну апроксимацію $u_h(x)$ у такий спосіб

$$\begin{aligned} u_h(x) &:= \sum_{i=0}^{N-1} u_{i+\frac{1}{2}}(x)\} = \sum_{i=0}^{N-1} \{q_i[1 - \omega_{i+\frac{1}{2}}(x)] + q_{i+1}\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)\} \\ &= \sum_{n=1}^{N-1} q_n \phi_n(x). \end{aligned} \tag{1.7.9}$$

В останній сумі ми явно записуємо апроксимацію методу скінченних елементів як лінійну комбінацію кусково визначених базисних функцій Куранта

$$\phi_n(x) := \begin{cases} 0, & \text{якщо} \quad x \in [0, x_{n-1}], \\ \omega_{n-\frac{1}{2}}(x), & \text{якщо} \quad x \in (x_{n-1}, x_n], \\ 1 - \omega_{n+\frac{1}{2}}(x), & \text{якщо} \quad x \in (x_n, x_{n+1}], \\ 0, & \text{якщо} \quad x \in (x_{n+1}, 1] \end{cases} \qquad n = 1, \ \dots \ , N-1. \tag{1.7.10}$$

Власне ця система функцій і формує базис вибраного нами простору апроксимацій

$$V_h := \left\{ v \in V \cap C([0,1]) : v \in P_1(\overline{K}_{i+\frac{1}{2}}), i = 0, \ \dots \ , N-1. \right\},$$

показуючи, що $\dim V_h = N - 1$.

1.7.3 *Допоміжні обчислення на скінченному елементі*

Для виконання різноманітних обчислень на скінченних елементах нам будуть потрібні складові варіаційного рівняння вигляду

$$\left\{ \begin{aligned} & c_{i+\frac{1}{2}}(u, v) := \int_{x_i}^{x_{i+1}} \{\mu u' v' + \beta u' v + \sigma u v\} \, dx, \\ & < l_{i+\frac{1}{2}}, v > := \int_{x_i}^{x_{i+1}} f v \, dx, \qquad\qquad i = 0, \ \dots \ , N-1. \end{aligned} \right. \tag{1.7.11}$$

Щоб результати наших обчислень були наочними і допускали прозору фізичну інтерпретацію, ми будемо виконувати інтегрування в (1.7.11) наближено із вживанням теореми про середнє в такий спосіб

$$\begin{cases} c_{i+\frac{1}{2}}(u,v) := \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{\mu u'\,v' + \beta u'\,v + \sigma uv\}\,dx, \\ \qquad\qquad = \mu(z_1)\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u'\,v'\,dx + \beta(z_2)\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u'\,v\,dx + \sigma(z_3)\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} uv\,dx \\ \qquad\qquad \simeq \big\{\mu\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u'\,v'\,dx + \beta\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u'\,v\,dx + \sigma\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} uv\,dx\big\}_{i+\frac{1}{2}}, \\ < l_{i+\frac{1}{2}}, v >= \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} fv\,dx \\ \qquad\qquad \simeq \big\{f\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v\,dx\big\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad\qquad i=0,\ \dots\ ,N-1, \end{cases} \tag{1.7.12}$$

де точки $z_n \in K_{i+\frac{1}{2}}, \quad n=1,2,3.$

Вправа 1.7.1. *Знайти оцінки похибок для вжитих нами апроксимацій білінійної форми та лінійного функціоналу варіаційної задачі.*

Наприклад, безпосередньою перевіркою неважко переконатися, що значення цих складових на апроксимації МСЕ (1.7.5) обчислюються згідно правил

$$c_{i+\frac{1}{2}}(u_h,u_h) = \{h[\,\mu(1+\frac{1}{12}Pe\,Sh)\dot{q}^2 + \beta\dot{q}q + \sigma q^2\,]\}_{i+\frac{1}{2}} \tag{1.7.13}$$

та

$$< l_{i+\frac{1}{2}}, u_h >= (f,u_h)_{i+\frac{1}{2}} := \{hfq\}_{i+\frac{1}{2}}. \tag{1.7.14}$$

Тут ми ввели позначення

$$Pe := \frac{h\beta}{\mu}, \quad Sh := \frac{h\sigma}{\beta}$$

для сіткових критеріїв Пекле та Струхаля відповідно.

Вправа 1.7.2. *Побудувати систему рівнянь методу скінченних елементів для обчислення апроксимації (1.7.10).*

Нарешті ми розглянемо кусково квадратичну бабл-функцію $b=b(x)$, визначену в такий спосіб

$$b(x) \equiv b_{i+\frac{1}{2}}(x) := 4[1-\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)]\omega_{i+\frac{1}{2}}(x) \qquad \forall x\in[x_i,x_{i+1}],\ i=0,\ \dots\ ,N-1. \tag{1.7.15}$$

З огляду на те, що

$$\begin{cases} (b,b)_{i+\frac{1}{2}} := \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} b^2\,dx = \frac{8}{15}h_{i+\frac{1}{2}}, \\ (b',b')_{i+\frac{1}{2}} = \frac{16}{3}h^{-1}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i=0,\ \dots\ ,N-1, \end{cases} \tag{1.7.16}$$

неважко переконатися, що

$$\begin{cases} c_{i+\frac{1}{2}}(b,b) = \{\frac{16}{3}\dfrac{\mu}{h} + \frac{8}{15}\sigma h\}_{i+\frac{1}{2}}, \\ \qquad\qquad = \frac{8}{15}\{\,\dfrac{\mu}{h}(10+Pe\,Sh)\}_{i+\frac{1}{2}}, \\ < l_{i+\frac{1}{2}}, b >= \{hf\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i=0,\ \dots\ ,N-1. \end{cases} \tag{1.7.17}$$

1.7.4 *Система дискретних рівнянь*

Зараз ми обчислимо систему лінійних алгебричних рівнянь методу скінченних елементів для задачі міграції домішок,яка дозволяє знайти розв'язок u_h в просторі апроксимацій V_h з базисом Куранта (1.7.10).

Щоб це зробити, підставимо, наприклад, (1.7.5) в (1.7.11) і для початку зауважимо, що

$$\begin{aligned}
c_{i+\frac{1}{2}}(u_h, v) &= \Big\{\mu \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u_h' \, v' \, dx + \beta \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u_h' \, v \, dx + \sigma \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} u_h v \, dx\Big\}_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \Big\{\mu\dot{q} \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v' \, dx + \beta\dot{q} \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v \, dx \\
&\qquad\qquad + \sigma \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \Big[q_{i+\frac{1}{2}} + (\omega_{i+\frac{1}{2}} - \tfrac{1}{2})h_{i+\frac{1}{2}}\dot{q}_{i+\frac{1}{2}}\Big] \, v \, dx\Big\}_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \Big\{\mu\dot{q} \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v' \, dx + [\, \beta\dot{q} + \sigma(q - \tfrac{1}{2}h\dot{q})\,] \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v \, dx \\
&\qquad\qquad\qquad + \sigma\dot{q}h \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_{i+\frac{1}{2}} v \, dx\Big\}_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \Big\{\, \dot{q}\big[\, \mu \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v' \, dx + (\beta - \tfrac{1}{2}\sigma h) \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v \, dx + \sigma h \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \omega_{i+\frac{1}{2}} v \, dx \,\big] \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad + \sigma q \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} v \, dx \,\Big\}_{i+\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{1.7.18}$$

З огляду на властивості базисних функцій $\phi_i \in V_h$

$$\begin{cases} \operatorname{supp} \phi_i := [x_{i-1}, x_{i+1}] = \overline{K}_{i-\frac{1}{2}} \cap \overline{K}_{i+\frac{1}{2}}, \\ \qquad \phi_i := \omega_{i-\frac{1}{2}} \qquad \text{на} \quad \overline{K}_{i-\frac{1}{2}}, \\ \qquad \phi_i := 1 - \omega_{i+\frac{1}{2}} \quad \text{на} \quad \overline{K}_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{1.7.19}$$

рівняння Гальоркіна

$$c(u_h, \phi_i) =< l, \phi_i >, \qquad\qquad i = 1, \; \dots \; , N-1, \tag{1.7.20}$$

набувають суттєво простішої для обчислень форми

$$\begin{aligned} &c_{i-\frac{1}{2}}(u_h, \omega_{i-\frac{1}{2}}) + c_{i+\frac{1}{2}}(u_h, 1 - \omega_{i+\frac{1}{2}}) \\ &=< l_{i-\frac{1}{2}}, \omega_{i-\frac{1}{2}} > + < l_{i+\frac{1}{2}}, 1 - \omega_{i+\frac{1}{2}} >, \qquad i = 1, \; \dots \; , N-1. \end{aligned} \tag{1.7.21}$$

Останній запис показує, що знаходження коефіцієнтів кожного із рівнянь цієї системи вимагає обчислень лише на двох сусідніх скінченних елементах. Так, використовуючи (1.7.18), після нескладної алгебри знаходимо, що

$$
\begin{aligned}
&c_{i-\frac{1}{2}}(u_h,\omega_{i-\frac{1}{2}}) = \left\{ h\Big[\, \frac{\mu}{h}\left(1+\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{12}PeSh\right)\dot{q}+\tfrac{1}{2}\sigma q\,\Big] \right\}_{i-\frac{1}{2}},\\
&c_{i+\frac{1}{2}}(u_h,1-\omega_{i+\frac{1}{2}}) = \left\{ h\Big[\, \frac{\mu}{h}\left(-1+\tfrac{1}{2}Pe-\tfrac{1}{12}PeSh\right)\dot{q}+\tfrac{1}{2}\sigma q\,\Big] \right\}_{i+\frac{1}{2}},\\
&< l_{i-\frac{1}{2}},\omega_{i-\frac{1}{2}} >= \tfrac{1}{2}\{hf\}_{i-\frac{1}{2}},\\
&< l_{i+\frac{1}{2}},1-\omega_{i+\frac{1}{2}} >= \tfrac{1}{2}\{hf\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i=1,\ \dots\ ,N-1.
\end{aligned}
\tag{1.7.22}
$$

Тепер, скориставшись визначеннями (1.7.5),(1.7.6) та (1.7.22), ми надамо дискретним рівнянням (1.7.21) алгебричного вигляду

$$
\begin{aligned}
&\Big[\, \frac{\mu}{h}\left(-1-\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{6}PeSh\right)\Big]_{i-\frac{1}{2}} q_{i-1}\\
&+\left\{ \Big[\, \frac{\mu}{h}\left(1+\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{3}PeSh\right)\Big]_{i-\frac{1}{2}} + \Big[\, \frac{\mu}{h}\left(1-\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{3}PeSh\right)\Big]_{i+\frac{1}{2}} \right\} q_i\\
&\qquad + \Big[\, \frac{\mu}{h}\left(-1+\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{6}PeSh\right)\Big]_{i+\frac{1}{2}} q_{i+1},\\
&\qquad = \tfrac{1}{2}\Big\{\, [hf\,]_{i-\frac{1}{2}} + [hf\,]_{i+\frac{1}{2}} \Big\}, \qquad i=1,\ \dots\ ,N-1.
\end{aligned}
\tag{1.7.23}
$$

Одержана система лінійних алгебричних рівнянь доповнюється двома умовами (1.7.8), які показують, що істинними невідомими цієї системи залишаються лише вузлові значення $q_1,\ \dots\ ,q_{N-1}$ апроксимації методу скінченних елементів (1.7.5).

Відзначимо тут визначну властивість рівнянь методу скінченних елементів - їхня матриця має тридіагональну структуру. Іншими словами, ненульові коефіцієнти цієї матриці локалізовані лише на головній та двох сусідніх з нею діагоналях.

Інший наочний факт, який заслуговує уваги в цьому контексті, - це частковий випадок розглядуваної задачі (1.7.2) з постійними коефіцієнтами μ,β та σ. Якщо поділ на скінченні елементи рівномірний, тобто

$$h_{i+\frac{1}{2}} := x_{i+1}-x_i = h = const, \qquad i=0,\ \dots\ ,N-1,$$

то рівняння (1.7.23) набувають особливо простого запису, якому можна надати вигляду

$$\begin{aligned}\frac{\mu}{h}\Big[\ &\left(-1-\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{6}PeSh\right)\,q_{i-1}\\ &\qquad +2\left(1+\tfrac{1}{3}PeSh\right)\,q_i\\ &\qquad\qquad +\left(-1+\tfrac{1}{2}Pe+\tfrac{1}{6}PeSh\right)\,q_{i+1}\Big]\\ &=\frac{h}{2}\Big\{\ [f\,]_{i-\frac{1}{2}}+[f\,]_{i+\frac{1}{2}}\ \Big\},\qquad i=1,\ \ldots\ ,N-1,\end{aligned} \tag{1.7.24}$$

або в іншій редакції

$$\begin{aligned}h\Big[-\mu\frac{q_{i-1}-2q_i+q_{i+1}}{h^2}+\beta\frac{q_{i+1}-q_{i-1}}{2h}+\sigma\frac{q_{i-1}+4q_i+q_{i+1}}{6}\Big]\\ =\frac{h}{2}\Big\{\ [f\,]_{i-\frac{1}{2}}+[f\,]_{i+\frac{1}{2}}\ \Big\},\qquad i=1,\ \ldots\ ,N-1.\end{aligned} \tag{1.7.25}$$

Останній запис системи лінійних алгебричних рівнянь методу скінченних елементів наочно показує його звязок з методом скінченних різниць, який замінює похідні вихідного диференціального рівняння крайової задачі (1.7.2) відповідними різницевими співвідношеннями з точністю до порядку $O(h^2)$.

1.7.5 *Функціонал джерел похибок*

Лемма 1.7.1. про декомпозицію функціонала джерел похибки

Нехай апроксимацію методу скінченних елементів знайдено у вигляді

$$\begin{aligned}u_h(x) &:= \sum_{i=0}^{N-1}\{q_i[1-\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)]+q_{i+1}\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)\}\\ &=\sum_{i=0}^{N-1}\{q_{i+\frac{1}{2}}+[\omega_{i+\frac{1}{2}}(x)-\tfrac{1}{2}]\dot{q}_{i+\frac{1}{2}}\},\\ &\qquad q_0=0,\quad q_N=0\end{aligned} \tag{1.7.26}$$

з

$$\omega_{i+\frac{1}{2}}(x):=\frac{x-x_i}{\{h\}_{i+\frac{1}{2}}},\qquad supp\ \omega_{i+\frac{1}{2}}:=[x_i,x_{i+1}],\quad i=0,\ \ldots\ ,N-1. \tag{1.7.27}$$

Тоді структуру функціоналу джерел похибок характеризує наступний ланцюжок рівностей

$$\begin{aligned}<\rho(u_h),v> &:= <l,v>-c(u_h,v)\\ &=\sum_{i=0}^{N-1}\{<l_{i+\frac{1}{2}},v>-c_{i+\frac{1}{2}}(u_h,v)\}\\ &=\sum_{i=0}^{N-1}\{<\rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h),v>\},\end{aligned} \tag{1.7.28}$$

де

$$
\begin{aligned}
< \rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h), v > &:= < l_{i+\frac{1}{2}}, v > - c_{i+\frac{1}{2}}(u_h, v) \\
&= \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{(f - \beta u_h' - \sigma u_h)v - \mu u_h' \, v'\} \, dx, \qquad i = 0, \ \dots \ , N-1.
\end{aligned} \tag{1.7.29}
$$

При цьому, зокрема,

$$
< \rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h), b > = \frac{2}{3}\{h(f - \beta \dot{q} - \sigma q)\}_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3). \tag{1.7.30}
$$

Доведення. Для початку зауважимо, що

$$
\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \big[\, \omega_{i+\frac{1}{2}}(x) - \frac{1}{2} \,\big] b(x) \, dx = 0. \tag{1.7.31}
$$

Далі, наприклад, розгортаючи задану функцію $f = f(x)$ за формулою Тейлора в околі точки $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, із врахуванням останнього факту знаходимо, що

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f b \, dx &= \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{f(x_{i+\frac{1}{2}}) + [\omega_{i+\frac{1}{2}}(x) - \tfrac{1}{2}] f'(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(h^2)\} b(x) \, dx \\
&= \tfrac{2}{3}\{hf\}_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3).
\end{aligned} \tag{1.7.32}
$$

З іншого боку, з огляду на інтегрування частинами і нульові значення бабла на кінцях відрізка

$$
\begin{aligned}
< \rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h), b > &= \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{(f - \beta u_h' - \sigma u_h)b - \mu u_h' \, b'\} \, dx \\
&= \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{(f - \beta u_h' - \sigma u_h + (\mu u_h')'\} b \, dx = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \{f - L u_h\} b \, dx \\
&= (f - L u_h, b)_{i+\frac{1}{2}} = \tfrac{2}{3}\{h(f - \beta \dot{q} - \sigma q)\}_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3).
\end{aligned} \tag{1.7.33}
$$

□

1.7.6 *Апроксимація похибки МСЕ: апостеріорний оцінювач похибки*

Будемо шукати наближення до істинної похибки апроксимації $e_h := u - u_h \in V \backslash V_h$ у вигляді лінійної комбінації квадратичних бабл-функцій (1.7.15)

$$
e_h(x) \simeq \varepsilon_h(x) := \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_{i+\frac{1}{2}} b_{i+\frac{1}{2}}(x) \tag{1.7.34}
$$

з невідомими коефіцієнтами $\{\lambda_{i+\frac{1}{2}}\}_{i=0}^{N-1}$. Для їхнього знаходження скористаємося схемою Гальоркіна, яку застосуємо до задачі про похибку [9]

$$\begin{cases} \textit{задано} \quad \mathcal{E}_h \subset V \backslash V_h, \quad \dim \mathcal{E}_h = N, \\ \qquad\qquad \textit{та апроксимацію Гальоркіна } u_h \in V_h; \\ \textit{знайти функцію} \ \ \varepsilon_h \in \mathcal{E}_h \textit{ таку, що} \\ \qquad\qquad c(\varepsilon_h, v) \ =< \rho(u_h), v > \qquad \forall v \in \mathcal{E}_h. \end{cases} \tag{1.7.35}$$

Внаслідок природної ортогональності системи бабл-функцій $\{b_{i+\frac{1}{2}}(x)\}_{i=0}^{N-1}$, зумовленої тим, що

$$\operatorname{supp} b_{i+\frac{1}{2}} := [x_i, x_{i+1}], \tag{1.7.36}$$

із рівняння задачі (1.7.35) безпосередньо обчислюємо

$$\lambda_{i+\frac{1}{2}} = \varepsilon_h(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{< \rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h), b >}{c_{i+\frac{1}{2}}(b,b)}, \qquad i = 0, \ \dots \ , N-1. \tag{1.7.37}$$

Нарешті, приймаючи до уваги (1.7.17) та (1.7.30), наведемо остаточний вигляд знайденого наближення до похибки апроксимації Гальоркіна

$$\begin{cases} e_h(x) \simeq \varepsilon_h(x) := \sum\limits_{i=0}^{N-1} \lambda_{i+\frac{1}{2}} b_{i+\frac{1}{2}}(x) \\ \qquad = \sum\limits_{i=0}^{N-1} \dfrac{< \rho_{i+\frac{1}{2}}(u_h), b >}{c_{i+\frac{1}{2}}(b,b)} b_{i+\frac{1}{2}}(x) \\ \qquad = \sum\limits_{i=0}^{N-1} \dfrac{\frac{2}{3}\{h(f - \beta\dot{q} - \sigma q)\}_{i+\frac{1}{2}}}{\frac{8}{15}\{\ \dfrac{\mu}{h}(10 + Pe\,Sh)\}_{i+\frac{1}{2}}} b_{i+\frac{1}{2}}(x) \\ \qquad = \frac{5}{4} \sum\limits_{i=0}^{N-1} \left\{ \ \dfrac{h^2}{\mu} \dfrac{(f - \beta\dot{q} - \sigma q)}{(10 + Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}} b_{i+\frac{1}{2}}(x). \end{cases} \tag{1.7.38}$$

Знайдену тут кусково визначену функцію $\varepsilon_h(x)$ називають *апостеріорним оцінювачем похибки апроксимації* $u_h(x)$. Епітет *апостеріорний*, як завжди, означає, що наближення $\varepsilon_h(x)$ до істинної похибки $e_h := u - u_h \in V \backslash V_h$ можна обчислити лише після того, як знайдено апроксимацію $u_h(x)$.

Побудований оцінювач $\varepsilon_h(x)$ володіє низкою важливих обчислювальних характеристик, які тут варто відзначити.

- Згідно визначення (1.7.34)

$$\varepsilon_h(x_i) = 0, \qquad i = 0, 1, \ \dots \ N;$$

  іншими словами, структура даного оцінювача апріорі передбачає, що вузлові значення $u_h(x_i) \equiv q_i$ знайдено класичною схемою МСЕ настільки акуратно, що на цьому етапі вони не потребують уточнення.

[9] Подання наближення до похибки у вигляді (1.7.34) показує, що ми вибрали систему функцій $\{b_{i+\frac{1}{2}}(x)\}_{i=0}^{N-1}$ за базис підпростору $\mathcal{E}_h$.

- Внаслідок ортогональності базису $\{b_{i+\frac{1}{2}}(x)\}_{i=0}^{N-1}$ обчислення коефіцієнтів оцінювача $\{\lambda_{i+\frac{1}{2}}\}_{i=0}^{N-1}$ дається мінімальною ціною – для цього потрібно розв'язати систему лінійних алгебричних рівнянь з діагональною матрицею; іншими словами, кожен коефіцієнт $\lambda_{i+\frac{1}{2}}$ обчислюється незалежно від інших на окремо взятому скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}}$ вибраного поділу, що забезпечує автономність необхідних обчислень.

- Коефіцієнти $\lambda_{i+\frac{1}{2}}$ апостеріорного оцінювача похибки $\varepsilon_h(x)$ допускають наочну фізичну інтерпретацію – вони подають наближені значення шуканої похибки апроксимації МСЕ в центрах скінченних елементів, тобто

$$e_h(x_{i+\frac{1}{2}}) \simeq \lambda_{i+\frac{1}{2}} \equiv \varepsilon_h(x_{i+\frac{1}{2}}), \qquad i = 0, 1, \ \dots \ N-1.$$

- З іншого боку, як можна зауважити із обчислень в (1.7.38), коефіцієнти оцінювача

$$\lambda_{i+\frac{1}{2}} = \frac{5}{4}\left\{ \frac{h^2}{\mu}\frac{(f - \beta\dot{q} - \sigma q)}{(10 + Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots \ N-1. \tag{1.7.39}$$

  Безпосередньою перевіркою можна переконатися, що їхня розмірність співпадає з розмірністю концентрації домішки, скажімо, $\frac{kg}{m^3}$.

- Більше цього, подання (1.7.39) показує, що

$$\lambda_{i+\frac{1}{2}} = O(h^2_{i+\frac{1}{2}}).$$

  Отже, останнє співвідношення свідчить, що побудований нами апостеріорний оцінювач похибки відтворює структуру істинної похибки кусково лінійних апроксимацій МСЕ з тим самим порядком збіжності, що передбачають апріорні оцінки похибки.

- Далі, оскільки нев'язка рівняння міграції на кусково лінійній апроксимації МСЕ допускає подання

$$\begin{aligned} R_h(x) &:= f(x) - Lu_h(x) \\ &= f(x) - \beta\dot{q}_{i+\frac{1}{2}} - \sigma u_h(x) \qquad \forall x \in K_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots \ N-1, \end{aligned} \tag{1.7.40}$$

  то приходимо до наступного співвідношення між значенням оцінювача похибки в центрах скінченних елементів та нев'язкою рівняння міграції домішки

$$\varepsilon_h(x_{i+\frac{1}{2}}) \equiv \lambda_{i+\frac{1}{2}} = \frac{5}{4}\left\{ \frac{h^2}{\mu}\frac{R_h(x)}{(10 + Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots \ N-1. \tag{1.7.41}$$

Таким чином,

$$\left\{ \begin{array}{l} \textit{значення побудованого апостеріоного оцінювача похибки } (1.7.38) \\ \textit{кусково лінійної апроксимації методу скінченних елементів} \\ \textit{в центрі ваги кожного скінченного елемента} \quad K \in \mathcal{T}_h \\ \textit{залежить від величини нев'язки вихідного рівняння в цій точці} \\ \textit{з коефіцієнтом пропорційності порядку} \ \ O(h_K^2). \end{array} \right. \tag{1.7.42}$$

1.7.7 *Природне уточнення апроксимації МСЕ*

Тепер, коли ми відшукали оцінювач похибки (1.7.38) для апроксимації методу скінченних елементів (1.7.5), можна уточнити знайдений наближений розв'язок варіаційної задачі на тільки що вжитому поділі згідно правила

$$u\left(x\right)=u_h\left(x\right)+e_h\left(x\right)\simeq u_h^*\left(x\right):=u_h\left(x\right)+\varepsilon_h(x)\quad \forall x\in\Omega. \tag{1.7.43}$$

З огляду на кускову лінійність апроксимації $u_h(x)$ та вищезгадані властивості нашого оцінювача $\varepsilon_h(x)$ можна прогнозувати, що найбільший ефект такого уточнення досягається в центрах скінченних елементів $K_{i+\frac{1}{2}}$, тобто доцільно обчислити

$$u_h^*\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right):=u_h\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+\lambda_{i+\frac{1}{2}},\qquad i=0,1,\ \dots\ N-1. \tag{1.7.44}$$

Уточнене наближення $u_h^*(x)$ має *кусково квадратичну структуру*, яка успадковує від класичної апроксимації МСЕ значення у вузлах вжитого поділу $\mathcal{T}_h$. Іншими словами,

$$u_h^*=u_h+\varepsilon_h\in V_h^*:=V_h\oplus\mathcal{E}_h.$$

Вартість виконаного уточнення апроксимації МСЕ можна оцінити за допомогою обчислення звичайної відносної похибки

$$\eta_h:=\frac{\|\varepsilon_h\|_V}{\|u_h+\varepsilon_h\|_V}.$$

1.7.8 *Уточнення вузлових значень апроксимації МСЕ*

З огляду на розглянуті властивості апостеріорного оцінювача похибок ми можемо спробувати уточнити знайдені раніше вузлові значення

$$u_h(x_i)\equiv q_i,\qquad i=1,\ \dots\ ,N-1,$$

апроксимації МСЕ в наступний спосіб.

Розглянемо новий поділ відрізка $[0,1]$ зі скінченними елементами такої структури

$$K_0:=(0,x_{\frac{1}{2}}),\ K_1:=(x_{\frac{1}{2}},x_{\frac{3}{2}}),\ \dots\ ,K_i:=(x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}),\ \dots\ ,K_N:=(x_{N-\frac{1}{2}},x_N).$$

В цьому випадку, приймаючи до уваги крайові умови Діріхле, будемо шукати апостеріорний оцінювач похибки для апроксимації $u_h^*(x)$ у вигляді лінійної комбінації

$$e_h(x)\simeq\varepsilon_h(x):=\sum_{i=1}^{N-1}\lambda_i b_i(x) \tag{1.7.45}$$

бабл-функцій $b_i(x)$ такої природи

$$b_i(x):=4\frac{(x-x_{i-\frac{1}{2}})}{h_{i-\frac{1}{2}}}\frac{(x_{i+\frac{1}{2}}-x)}{h_{i+\frac{1}{2}}}\qquad\forall x\in\bar{K}_i=[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}],\quad i=1,\ \dots\ ,N-1. \tag{1.7.46}$$

З огляду на те, що

$$\begin{cases}(b,b)_i:=\int\limits_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}b^2\,dx=\dfrac{2}{3(h_{i+\frac{1}{2}}h_{i-\frac{1}{2}})^2}(h_{i+\frac{1}{2}}+h_{i-\frac{1}{2}})^3=\frac{2}{3}\dfrac{|K_i|^3}{(h_{i+\frac{1}{2}}h_{i-\frac{1}{2}})^2},\\[2ex](b',b')_i=\frac{16}{3}h_{i+\frac{1}{2}}^{-1},\qquad i=0,\ \dots\ ,N-1,\end{cases} \tag{1.7.47}$$

неважко переконатися, що

$$\left\{\begin{aligned} c_{i+\frac{1}{2}}(b,b) &= \{\tfrac{16}{3}\frac{\mu}{h} + \tfrac{8}{15}\sigma h\}_{i+\frac{1}{2}}, \\ &= \tfrac{8}{15}\{\ \frac{\mu}{h}(10 + Pe\, Sh)\}_{i+\frac{1}{2}}, \\ < l_{i+\frac{1}{2}}, b > &= \{hf\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad\qquad i = 0,\ \dots\ , N-1. \end{aligned}\right. \tag{1.7.48}$$

Використовуючи процедуру Гальоркіна, знайдемо коефіцієнти цього оцінювача у вигляді

$$\lambda_i = \varepsilon_h(x_i) = \frac{< \rho_i(u_h^*), b >}{c_i(b,b)}, \qquad i = 1,\ \dots\ , N-1. \tag{1.7.49}$$

1.7.9 *Фундаментальна властивість апостеріорного оцінювача похибки*

Зараз ми хочемо дати відповідь на ключове запитання:

$$\left\{\begin{array}{l} \textit{Наскільки акуратно побудований нами в (1.7.38)} \\ \textit{апостеріоний оцінювач похибки } \varepsilon_h(x) \\ \textit{відтворює істинну похибку } e_h := u - u_h \in V \backslash V_h \\ \textit{кусково лінійної апроксимації методу скінченних елементів } u_h \in V_h\ ? \end{array}\right. \tag{1.7.50}$$

Для початку зауважимо,що визначення (1.7.28) функціоналу джерел похибки $\rho(u_h)$ можна переформулювати до вигляду

$$\begin{aligned} < \rho(u_h), v > :=& < l, v > - c(u_h, v) \\ &= c(u,v) - c(u_h, v) \\ &= c(u - u_h), v >= c(e_h, v) \qquad \forall v \in V. \end{aligned} \tag{1.7.51}$$

Тоді з огляду на задачу про похибку (1.7.35) низка перетворень

$$\begin{aligned} \|\varepsilon_h\|_V^2 = c(\varepsilon_h, \varepsilon_h) &=< \rho(u_h), \varepsilon_h > \\ &= c(e_h, \varepsilon_h) \\ &\le \|e_h\|_V \|\varepsilon_h\|_V \quad \forall v \in V \end{aligned} \tag{1.7.52}$$

приводить до оцінки вехньої межі значень норми оцінювача

$$\|\varepsilon_h\|_V \le \|e_h\|_V \qquad \forall h > 0. \tag{1.7.53}$$

Згідно визначень оцінювача та похибки апроксимації МСЕ останню оцінку можна подати в такому записі

$$\|u_h^* - u_h\|_V \le \|u - u_h\|_V \qquad \forall h > 0. \tag{1.7.54}$$

З іншого боку, можна сподіватися,що уточнені наближення u_h^* збігаються швидше до розв'язку u ніж класичні апроксимації u_h, оскільки за побудовою

$$V_h \subset V_h^*.$$

В зв'язку з цим ми далі будемо припускати, що виконується наступна *умова насиченості*:

$$\begin{cases} \textit{знайдеться додатна стала } \gamma < 1, \\ \textit{значення якої не залежить від параметра } h, \textit{ така, що} \\ \|u - u_h^*\|_V \leq \gamma \|u - u_h\|_V. \end{cases} \tag{1.7.55}$$

З огляду на цю умову [10] та нерівність трикутника маємо, що

$$\begin{aligned} \|u - u_h\|_V = \|u - u_h^* + u_h^* - u_h\|_V \leq \|u - u_h^*\|_V + \|u_h^* - u_h\|_V \\ \leq \gamma \|u - u_h\|_V + \|u_h^* - u_h\|_V. \end{aligned} \tag{1.7.56}$$

Звідси знаходимо бажану оцінку

$$(1 - \gamma)\|u - u_h\|_V \leq \|u_h^* - u_h\|_V \qquad \forall h > 0 \tag{1.7.57}$$

або в іншому записі

$$(1 - \gamma)\|e_h\|_V \leq \|\varepsilon_h\|_V \qquad \forall h > 0. \tag{1.7.58}$$

Збираючи разом одержані оцінки, приходимо до важливого результату.

Теорема 1.7.1. про двосторонні оцінки похибки МСЕ

Нехай $u \in V$ - розв'язок варіаційної задачі (1.7.3) і $u_h \in V_h$ - його кусково лінійна апроксимація методу скінченних елементів, знайдена на поділі $\mathcal{T}_h$.Припустимо також, що (i) апостеріорний оцінювач похибки ε_h знайдено як розв'язок задачі (1.7.34) в просторі $\mathcal{E}_h$, базис якого утворюють квадратичні бабл-функції (1.7.15);
(ii) апроксимація $u_h \in V_h$ та її уточнення $u_h^* = u_h + \varepsilon_h \in V_h \oplus \mathcal{E}_h$ задовольняють умову насичення (1.7.55) для кожного $h > 0$.

Тоді взаємозв'язок між похибкою апроксимації

$$e_h := u - u_h \in V \ V_h$$

та апостеріорним оцінювачем похибки $\varepsilon_h \in \mathcal{E}_h$ характеризується наступними двосторонніми оцінками

$$\|\varepsilon_h\|_V \leq \|e_h\|_V \equiv \|u - u_h\|_V \leq \frac{1}{1 - \gamma}\|\varepsilon_h\|_V \qquad \forall h > 0. \tag{1.7.59}$$

Тільки що доведена теорема зокрема вказує на певну еквівалентність обчислення енергетичних норм оцінювача похибки та власне самої похибки апроксимацій методу скінченних елементів. Цим самим вона перетворює апостеріорні оцінювачі похибок в практично вживаний інструмент числового аналізу, який на основі даних вихідної задачі і знайдених наближених розвязків дозволяє *оперувати вірогідною інформацією про якість обчислених апроксимацій МСЕ.* Остання може успішно вжита для обгрунтуваннятих чи інших рішень стосовно проведення обчислювального експерименту.

[10] В стандартних просторах методу скінченних елементів з апроксимаціями вищих порядків можна побачити, що $\gamma = O(h^r)$ для певного $r > 0$. В цьому випадку $\gamma \to 0$ при $h \to 0$, що є більш сильною властивістю, ніж вимагається нашою умовою насиченості (1.7.55).

1.7.10 *Обчислення норм апостеріорного оцінювача: індикатори похибки*

Як свідчить теорема про двосторонні оцінки похибки, в застосуваннях важливу роль може відігравати енергетична норма апостеріорного оцінювача похибки МСЕ. Зупинимося на її обчисленні детальніше.

З огляду на визначення оцінювача (1.7.38) та (1.7.17) безпосередніми обчисленнями знаходимо, що

$$\begin{aligned}\|\varepsilon_h\|_V^2 &= c(\varepsilon_h, \varepsilon_h) \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} c_{i+\frac{1}{2}}(\varepsilon_h, \varepsilon_h) = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_{i+\frac{1}{2}}^2 c_{i+\frac{1}{2}}(b, b) \\ &= \tfrac{25}{16}\tfrac{8}{15}\sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \frac{h^2}{\mu}\frac{(f-\beta\dot{q}-\sigma q)}{(10+Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}}^2 \{\frac{\mu}{h}(10+Pe\,Sh)\}_{i+\frac{1}{2}} \\ &= \tfrac{5}{6}\sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \frac{h^3}{\mu}\frac{(f-\beta\dot{q}-\sigma q)^2}{(10+Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{1.7.60}$$

Введемо позначення

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} := \sqrt{c_{i+\frac{1}{2}}(\varepsilon_h, \varepsilon_h)} = \sqrt{\frac{5}{6}\left\{ \frac{h^3}{\mu}\frac{(f-\beta\dot{q}-\sigma q)^2}{(10+Pe\,Sh)} \right\}_{i+\frac{1}{2}}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots\ N-1, \tag{1.7.61}$$

для величин, які вимірюють значення енергетичної норми апостеріорного оцінювача похибки на кожному скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}}$. Оскільки множина дійсних чисел $\{\eta_{i+\frac{1}{2}}\}_{i=0}^{N-1}$ описує розподіл норми оцінювача на елементах вибраного поділу $\mathcal{T}_h$, то їх часто називають *індикаторами похибки апроксимації u_h на скінченних елементах* і використовують як основу для створення системи контролю якості апроксимацій МСЕ.
Відзначимо тут деякі із властивостей індикаторів.

- Якщо на кожному скінченному елементі розглянути оператори лишків вигляду

$$\mathcal{R}_{i+\frac{1}{2}}(u_h) := \left\{ |f-\beta\dot{q}-\sigma q| \right\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots\ N-1, \tag{1.7.62}$$

  то можна зауважити, що вони вимірюють *потужність неврівноважених джерел домішки, породжених апроксимацією u_h в центрах ваг скінченних елементів.* Поряд із цим значення індикаторів похибки пропорційні величинам цих лишків і на додаток

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} = \mathcal{R}_{i+\frac{1}{2}}(u_h)\left\{ \sqrt{\frac{h^3}{12\mu}} \right\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \dots\ N-1. \tag{1.7.63}$$

- Остання форма подання індикаторів показує, що

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} = \mathcal{O}(h_{i+\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}}), \qquad i = 0, 1, \ \dots\ N-1. \tag{1.7.64}$$

  Цей факт означає, що *індикатори, а отже і апостеріорний оцінювач похибки, здатні акуратно відтворювати передбачувані теорією апріорні оцінки порядку збіжності апроксимацій методу скінченних елементів.*

- Нехай на скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}}$ процес міграції домішки реалізується лише механізмом дифузії, іншими словами, $\sigma = 0,\ \beta = 0$. В цьому випадку індикатор похибки набуває вигляду

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} := \left\{ \ |f|\sqrt{\frac{h^3}{12\mu}} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}} .$$

- Припустимо, що на скінченному елементі $K_{i+\frac{1}{2}}$ відсутні джерела домішок і самі домішки є хімічно пасивними, тобто $f = 0$ і $\sigma = 0$,; тоді

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} := \left\{ \ Pe|\dot{q}|\sqrt{\frac{h\mu}{12}} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}} .$$

- Якщо домішка поширюється в нерухомому середовищі за відсутності розподілених джерел, тобто $\beta = 0$ і $f = 0$, то

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} := \left\{ \ Fu^{-1}q\sqrt{\frac{\mu}{12h}} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}} .$$

Подібним чином можна обчислити середньоквадратичну норму апостеріорного оцінювача похибки. Дійсно,

$$\begin{aligned}
\|\varepsilon_h\|_H^2 &= (\varepsilon_h, \varepsilon_h) \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} (\varepsilon_h, \varepsilon_h)_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda^2_{i+\frac{1}{2}} (b, b)_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \tfrac{25}{16} \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \ \frac{h^2}{\mu} \frac{(f - \beta\dot{q} - \sigma q)}{(10 + Pe\, Sh)} \ \right\}^2_{i+\frac{1}{2}} \{\tfrac{8}{15} h\}_{i+\frac{1}{2}} \\
&= \tfrac{5}{6} \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \ \frac{h^5}{\mu^2} \frac{(f - \beta\dot{q} - \sigma q)^2}{(10 + Pe\, Sh)^2} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}} .
\end{aligned} \tag{1.7.65}$$

Тепер ми спроможні ввести відповідні індикатори похибок апроксимації на скінченних елементах

$$\delta_{i+\frac{1}{2}} := \mathcal{R}_{i+\frac{1}{2}}(u_h) \left\{ \ \sqrt{\frac{5h}{6}} \frac{h^2}{\mu} \frac{1}{(10 + Pe\, Sh)} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}}, \qquad i = 0, 1, \ \ldots \ N-1, \tag{1.7.66}$$

які характеризують розподіл середньоквадратичної норми оцінювача між елементами вибраного поділу $\mathcal{T}_h$. Неважко побачити, що

$$\delta_{i+\frac{1}{2}} \leq \left\{ \ \frac{h^2}{\mu}\sqrt{\frac{h}{120}} \ \right\}_{i+\frac{1}{2}} \mathcal{R}_{i+\frac{1}{2}}(u_h), \qquad i = 0, 1, \ \ldots \ N-1.$$

Цікаво відзначити, що

$$\delta_{i+\frac{1}{2}} = \mathcal{O}(h^{\frac{5}{2}}_{i+\frac{1}{2}}) \,,$$

тобто порядки величин оцінювачів знову повністю узгоджуються із апріорними оцінками порядків похибок кусково лінійних апроксимацій МСЕ в середньоквадратичній нормі.

1.7.11 *Рекурентне покращення апроксимацій МСЕ: стратегія адаптування тріангуляцій*

Підсумовуючи одержані результати стосовно апостерірних оцінювачів похибок апроксимацій та їхніх індикаторів, на цьому етапі можна стверджувати, що нами побудовано надійний і зручний інструментарій для контролювання величин як глобальних, так і локальних розподілів похибок наближень до розв'язків досліджуваних варіаційних задач. Наприклад, в інженерній практиці часто вимагається обчислити наближений розвязок із наперед заданою допустимою похибкою. В цій ситуації головною метою обчислювального експерименту може стати побудова послідовності тріангуляцій скінченних елементів, які будуть рівномірно розподіляти похибки апроксимації між скінченними елементами і, як наслідок, зменшувати обчислювальі витрати. Врешті-решт індикатори похибок можуть застосовуватися в критеріях локальної модифікації тріангуляцій за допомогою згущення (а іноді й розрідження) скінченних елементів. Ця процедура природно приводить до обчислювального циклу вигляду:

$$\textit{Розв'язування} \rightarrow \textit{Оцінювання} \rightarrow \textit{Згущення} \rightarrow \textit{Розв'язування} \rightarrow \dots\ .$$

Бібліографія

[1] В.В. Алексеев, С.И. Зайцев, Т.Г. Сарыкина , *Физическое и математическое моделирование экосистем.* - С.-Петербург: Гидрометеоиздат, 1992. - 367 с.

[2] Амелькин В.В., *Дифференциальные уравнения в приложениях.* - Москва: Наука, 1987. - 160 с.

[3] А.Д. Базыкин, *Математическая биофизика взаимодействующих популяций.* - Москва: Наука, 1985. - 182 с.

[4] Бейли Н., *Математика в биологии и медицине.* - Москва: Мир, 1970. - 326 с.

[5] М. Бигон, Дж. Харпер, Таусенд., *Экология. Особи, популяции и сообщества: В 2-х т. Т. 2..* - Москва: Мир, 1989. - 477 с.

[6] Безуглая Э.Ю., *Мониторинг состояния загрязнения атмосферы в городах.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1986. - 160 с.

[7] Беллман Р., *Математические методы в медицине.* - Москва: Мир, 1987. - 239 с.

[8] Белоусов Л.В., *Биологический морфогенез.* - Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1987. - 239 с.

[9] Берлянд М.Е., *Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1985. - 272 с.

[10] О.В. Богданкевич, *Лекции по экология.* - Москва: Физматлит, 2002. - 208 с.

[11] Н.Ф. Бондаренко, *Моделирование продуктивности агроэкосистем.* - Л.: Гидрометеоиздат, 1982. - 264 с.

[12] Я. Бэр, Д. Заславски, С. Ирмей, *Физико-математические основы фильтрации воды.* - Москва: Мир, 1971. - ??? с.

[13] Бунге В., *Теоретическая география.* - Москва: Прогресс, 1967. - 280 с.

[14] М.И. Будыко, *Глобальная экология.* - Москва: Мысль, 1977. - 327 с.

[15] М.И. Будыко, *Тепловой баланс Земли.* - Л.: Гидрометеоиздат, 1978. - 40 с.

[16] М.И. Будыко, *Эволюция биосферы.* - Л.: Гидрометеоиздат, 1984. - 488 с.

[17] О.Ф. Васильев, В.И. Виссарионов, Л.И. Кубышкин, *Решение гидроэнергетических задач на ЭВМ.* - М.: Энергоатомиздат, 1987. - 160 с.

[18] В.И. Вернадский, *Химическое строение биосферы и ее окружения.* - Москва: Наука, 1965. - 205 с.

[19] В.И. Вернадский, *Биосфера.* - Москва: Мысль, 1967. - 376 с.

[20] В.И. Вернадский, *Размышления натуралиста: Пространство и время в неживой и живой природе.* - Москва: Наука, 1975. - 220 с.

[21] В.И. Вернадский, *Живое вещество.* - Москва: Наука, 1978. - 358 с.

[22] Владимиров А.М. и др., *Охрана окружающей среды.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1991. - 424 с.

[23] Вольтерра В., *Математическая теория борьбы за существование.* - Москва: Наука, 1976. - 285 с.

[24] В поисках нового мировидения: И.Пригожин, Е. и Н.Рерихи, . - Москва: Знание, 1991. - 64 с.

[25] Генсірук С.А., *Регіональне природокористування.* - Львів: Світ, 1992. - 336 с.

[26] Голубець М.А. та ін., *Конспект лекцій з курсу "Екологія та охорона природи".* - Київ: НМК ВО, 1990. - 216 с.

[27] Городній М.М. та ін., *Агроекологія.* - Київ: Вища школа, 1993. - 416 с.

[28] А.А. Горелов, *Экология. Наука. Моделирование.* - Москва: Наука, 1985. - 206 с.

[29] А.Б. Горстко, Ф.А. Сурков, *Математика и проблемы сохранения природы.* - Москва: Знание, 1975. - 62 с.

[30] В.Г. Горшков, *Физические и биологические основы устойчивости жизни.* - Москва: ВИНИТИ, 1995. - 472 с.

[31] М.Д. Гродзинський, *Стійкість геосистем до антропогенних навантажень.* - Київ: Лікей, 1995. - 228 с.

[32] А.С. Девдариани, *Математический анализ в геоморфологии.* - Москва: Недра, 1967. - 155 с.

[33] А.Дж. Джерард, *Почвы и формы рельефа.* - Ленинград: Недра, 1984. - 208 с.

[34] В.Н. Демидов, *Моделирование взаимодействия поверхностных и подземных вод при формировании стока на речном водосборе* . - // Водные ресурсы, 2(1989)60-69.

[35] А.И. Денисова и др., *Донные отложения водохранилищ и их влияние на качество воды.* - Киев: Наукова думка, 1987. - 164 с.

[36] З.Н. Добровольская, *Математические модели для расчета динамики и качества сложных водных систем.* - // Водные ресурсы 3 (1981)33-51.

[37] Н. Долматова, *Климат в кредит. Пособие для Детей и Министров.* - Москва, 2004. - 21 с. Див. www.biodiversity.ru

[38] П. Дювиньо, Ь. Танг, *Биосфера и место в ней человека: Экологические системы и биосфера.* - Москва: Прогресс, 1973. - 268 с.

[39] Г.П. Епихов, *Об одной математической модели речного басейна.* - // Водные ресурсы 5 (1979) 68-78.

[40] Г.П. Епихов, *Алгоритм построения математической модели речного басейна с учетом взаимодействия стока в речной сети и плановой фильтрации подземных вод.* - М.: Изд. ВЦ АН СССР, 1979. - 24 с.

[41] Екологічне законодавство України, *Відп. ред. І.О. Заєць.* - Київ: Юрінком Інтер, 2001. - 416 с.

[42] М.Н. Заславский, *Эрозиоведение.* - Москва: Высшая школа, 1983. - 320 с.

[43] А.К. Запольський, А.І. Салюк, *Основи екології.* - Київ: Вища школа, 2001. - 358 с.

[44] Защита атмосферы от промышленных загрязнений: Справ. изд. В 2-х ч, *Ч.2.* - Москва: Металлургия, 1988. - 712 с.

[45] Зубов В.М., Шинкаренко Г.А., *Розв'язуваність та апроксимація варіаційних задач переносу та дифузії домішок у нестисливій атмосфері.* - Вісник Львів. ун-ту. Сер. мех.-матем., 37 (1992) 55-60.

[46] Зубов В.М., Терлецька С.Ю., Шинкаренко Г.А., *Розв'язуваність та апроксимація узагальнених розв'язків початково-крайових задач міграції атмосферних домішок.* - Вісник Львів. ун-ту. Сер. мех.-матем., 41 (1995) 62-70.

[47] В.П. Казначеев, *Учение В.И. Вернадского о биосфере и ноосфере.* - Новосибирск: Наука, 1989. - 248 с.

[48] Б. Китанович, *Планета и цивилизация в опасности.* - Москва: Мысль, 1985. - 240 с.

[49] П. Кейлоу, *Принципы эволюции.* - Москва: Мир, 1986. - 128 с.

[50] Козаревська Ю.С., *Чисельний аналіз варіаційних задач міграції домішок в нестисливих потоках із домінуючою конвекцією. Автореф. дисерт. ... канд. фіз.-мат. наук* . - Львів, 2004. - 17 с.

[51] Козаревська Ю.С., Кузик О.М., Шинкаренко Г.А., *Чисельне дослідження процесів міграції домішок та оптимальне розміщення джерел пасивних домішок у нестисливому середовищі* . - (
Львів. ун-т. -Львів, 1998. -28 с. - Доп. в ДНТБ України 13.04.98 № 187 Ук 98.

[52] Козаревська Ю.С., Шинкаренко Г.А., *Аналіз критеріїв подібності та чутливості розв"язків задач мігрування субстанції до збурень її коефіцієнтів* . - Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. інформ., 3 (2000) 116-125.

[53] Козаревська Ю.С., Шинкаренко Г.А., *Регуляризація чисельних розв"язків варіаційних задач міграції домішок: стабілізуюча схема Дугласа-Вонга* . - Волин. матем. вісник, 5(1998) 66-70.

[54] Козаревська Ю.С., Шинкаренко Г.А., Шинкаренко О.Г., *Регуляризація чисельних розв"язків варіаційних задач міграції домішок: метод найменших квадратів* . - Волин. матем. вісник, 4(1997) 67-70.

[55] Козаревська Ю.С., Шинкаренко Г.А., Шинкаренко О.Г., *Регуляризація чисельних розв"язків варіаційних задач міграції домішок: локалізовані найменші квадрати* . - Вісник Львів. ун-ту. Сер. мех.-матем., 52(1999) 59-71.

[56] Козел А.М., Фундак О.В., Шинкаренко Г.А., *Чисельне розв'язування змішаних варіаційних задач міґрування домішок методом скінченних елементів.* - Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. інформ., 4 (2002) 51-60.

[57] Козел А., Шинкаренко Г., *Ітераційне реконструювання апроксимацій Гальоркіна для задач міграції домішок методом найменших квадратів* . - Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. інформ., 9 (2004) 164-171.

[58] К.Я. Кондратьев, *Ключевые проблемы глобальной экологии.* - Москва: ВИНИТИ, 1990. - 454 с.

[59] К.Я. Кондратьев, В.Ф. Крапивин, *Моделирование глобального круговорота углерода.* - Москва: Физматгиз, 2004. - 336 с.

[60] Крапивин В.Ф., Свирежев Ю.М., Старко А.М., *Математическое моделирование глобальных биосферных процесов.* - Москва: Наука, 1982. - ??? с.

[61] И.И. Крышев, Т.Г. Сазыкина, *Математическое моделирование миграции радионуклидов в водных экосистемах.* - Москва: Энергоатомиздат, 1986. - 150 с.

[62] Кучерявий В.П., *Екологія.* - Львів: Світ, 2000. - 500 с.

[63] Кучмент Л.С., ДемидовВ.Н., Мотовилов Ю.Г., *Формирование речного стока. Физико-математические модели.* - Москва: Наука, 1983. - 216 с.

[64] Кучмент Л.С., Мотовилов Ю.Г., Назаров Н.А., *Чувствтельность гидрологических систем.* - Москва: Наука, 1990. - 144 с.

[65] Кучмент Л.С., Гельфан А.Н., *Динамико-стохастические модели формирования речного стока.* - Москва: Наука, 1993. - 103 с.

[66] Ж.А. Кюнж, Ф.М. Холли, А. Вервей, *Численные методы в задачах речной гидравлики.* - Москва: Энергоатомиздат, 1985. - 256 с.

[67] Лаврик В.І., *Методи математичного моделювання в екології.* - Київ: Вид. дім "КМ Академія", 2002. - 203 с.

[68] Ласточкин А.Н., *Рельеф земной поверхности. (Принципы и методы статической геоморфологии.).* - Ленинград: Недра, 1991. - 340 с.

[69] Л. Лукнер, В.М. Шестаков, *Моделирование миграции подземных вод.* - Ленинград: Недра, 1986. - 208 с.

[70] Марри Дж., *Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях.* - Москва: Мир, 1983. - 397 с.

[71] Марчук Г.И., *Математические модели в иммунологии.* - Москва: Наука, 1980. - 264 с.

[72] Марчук Г.И., *Математические моделирование в проблеме окружающей среды* . - Москва: Наука, 1982. - 320 с.

[73] Марчук Г.И., Кондратьев Л.Я., *Приоритеты глобальной экологии* . - Москва: Наука, 1992. - 264 с.

[74] Маслов В.П., Данилов В.Г., Волосов К.А., *Математическое моделирование процесов тепломассопереноса.* - Москва: Наука, 1987. - 352 с.

[75] Математическая биология развития / Под ред. А.И. Зотина, Е.В. Преснякова. - Москва: Наука, 1982. - ??? с.

[76] Математическое моделирование: Процессы в сложных экономических и экологических системах / Под ред. А.А. Самарского, Н.Н. Моисеева, А.А. Петрова. - Москва: Наука, 1986. - 296 с.

[77] Медавар П., Медавар Дж., *Наука о живом.* - Москва: Мир, 1983. - 207 с.

[78] Моисеев Н.Н., *Человек, среда, общество.* - Москва: Наука, 1982 - 240 с.

[79] Моисеев Н.Н., *Модели экологии и эволюции.* - Москва: Знание, 1983 - 64 с.

[80] Моисеев Н.Н., Александров В.В., Тарко А.М., *Человек и биосфера: Опыт системного анализа и эксперименты с моделями.* - Москва: Наука, 1985 - 271 с.

[81] Моисеев Н.Н., *Алгоритмы развития.* - Москва: Наука, 1987. - 302 с.

[82] Моисеев Н.Н., *Экология человечества глазами математика.* - Москва: Молодая гвардия, 1988. - 254 с.

[83] Моисеев Н.Н., *Человек и ноосфера.* - Москва: Молодая гвардия, 1990. - 349 с.

[84] И.И. Мочалов, *Владимир Иванович Вернадский (1863-1945).* - Москва: Наука, 1982 - 488 с.

[85] Г.В.Назаров, *Гидрологическая роль почвы.* - Москва: Наука, 1981. - 216 с.

[86] Назарук М.М., *Основи екології та соціоекології.* - Львів: Афіша, 2000. - 256 с.

[87] И.К. Никитин, *Сложные турбулентные течения и процессы тепломассопереноса.* - Киев: Наукова думка, 1980. - 238 с.

[88] Николис Г., Пригожин И., *Самоорганизация в неравновесных системах.* - Москва: Мир, 1979. - ??? с.

[89] Одум Ю., *Экология.* - Москва: Мир, 1986 т.1. - 328 с.; т.2. - 376 с.

[90] А. Пантл, *Методы системного анализа окружающей среды.* - Москва: Мир, 1979. - ??? с.

[91] Э. Пианка, *Эволюционная экология.* - Москва: Мир, 1981. - 399 с.

[92] В.В. Пененко, А.Е. Алоян, *Модели и методы для задач охраны окружающей среды.* - Новосибирск: Наука, 1985. - 368 с.

[93] Плотников Н.И., *Подземные воды - наше богатство.* - Москва: Недра, 1990. - 206 с.

[94] И. Пригожин, И. Стенгерс, *Порядок из хаоса: Новый диалог человека с природой.* - Москва: Прогресс, 1986. - 431 с.

[95] С.А. Реригер, *Лекции по биологической механике.* - Москва: Изд-во МГУ, 1980. - 144 с.

[96] С.А. Реригер, *О моделях биологических сплошных сред.* - // ПММ, 46(1982) 531-542.

[97] В.П. Рогунович, *Автоматизация математического моделирования движения воды и примесей в системах водотока.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1989. - 264 с.

[98] А.А. Самарский, А.П. Михайлов, *Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры.* - Москва: Физматлит, 2001. - 320 с.

[99] Свирежев Ю.М., *Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии.* - Москва: Наука, 1987. - 368 с.

[100] Сен-Марк Ф., *Социализация природы.* - Москва: Прогресс, 1977. - 435 с.

[101] Смит Дж.М., *Модели в экологии.* - Москва: Мир, 1976. - 184 с.

[102] О.Д. Сиротенко, *Математическое моделирование воднотеплового режима и продуктивности агроэкосистем.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1981. - 168 с.

[103] Сугаков В.Й., *Основи синергетики.* - Київ: Обереги, 2001. - 287 с.

[104] А.М. Тарко, М.В. Кузнецова, *Пространственно распределенная модель глобального цикла углерода в биосфере.* - // Математ. моделирование 9 (2001) 45-54.

[105] Уатт К., *Экология и управление природным ресурсами.* - Москва: Мир, 1974. - 463 с.

[106] Уильямсон М., *Анализ биологических популяций.* - Москва: Мир, 1975. - ??? с.

[107] Де Уист Р., *Гидрогеология с основами гидрологии суши. Т.1.* - Москва: Мир, 1969. - 312 с.

[108] Г. Хакен, *Синергетика.* - Москва: Мир, 1980. - 404 с.

[109] Г. Хакен, *Информация и самоорганизация : Макроскопический подход к сложным системам.* - Москва: Мир, 1991. - 240 с.

[110] М.А. Ханин, *Экстремальные принципы в биологии и физиологии.* - Москва: Наука, 1978. - 256 с.

[111] Ю.М. Хотунцев, *Человек, технологии, окружающая среда.* - Москва: Устойчивый мир, 2001. - 224 с.

[112] Чайлдс З., *Физические основы гидрологии почв.* - Ленинград: Гидрометеоиздат, 1973. - 427 с.

[113] Шинкаренко Г.А., Козаревська Ю.С., *Регуляризація чисельних розв"язків варіаційних задач міграції домішок: h-адаптивний метод скінченних елементів* . - Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. інформ., 5(2001) 153-164

[114] Э. Шредингер, *Что такое жизнь? С точки зрения физика.* - Москва: Мир, 1972. - ??? с.

[115] В. Эбелинг, А. Энгель, Р. Файстель, *Физика процессов эволюции.* - Москва: УРСС, 2001 - 324 с.

[116] М. Эббот, *Гидравлика открытого потока.* - Москва: Энергоатомиздат, 1983. - 272 с.

[117] Achchab B., Achchab S., Agouzal A., Ellaia R., *On a posteriori error estimator for primal, equilibrium and mixed approximation of diffusion equations.* - Appl. Math. Comput. 134 (2003) 83–92.

[118] Ainsworth M., *A posteriori error estimation for fully discrete hierarchic models of elliptic boundary value problems on thin domains.* - Numer. Math. 80 (1998) 325–362.

[119] Ainsworth M., Senior B., *An adaptive refinement strategy for hp-finite element computations.* - Appl. Numer. Math. 26 (1998) 165-178.

[120] M. Ainsworth, J.T. Oden, *A Posteriory Error Estimations in Finite Element Analysis.* - New York: Wiley, 2000. - 240 p.

[121] Apel T., Lube G., *Anisotropic mesh refinement in stabilized Galerkin methods.* - Numer. Math. 74 (1996) 261–282.

[122] I. Babuska, T. Strouboulis, *The Finite Element Method and its Reliability.* - Oxford: Clarendon Press, 2001. - 802 p.

[123] Behavioral Ecology. An Evolutionary Approach/ J.R. Krebs, N.B. Davies, eds. Forth edit. - Oxford: Blackwell Science, 1997. - 456 p.

[124] R.E. Bank, *A simple analysis of some a posteriory error estimates.* - Appl.Numer.Math. 26 (1998) 153-164.

[125] Becker R., Hansbo P., Larson M.G., *Energy norm a posteriori error estimation for discontinuous Galerkin methods.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 723–733.

[126] Bernardi C., Verfurth R., *Adaptive finite element methods for elliptic equations with non-smooth coefficients.* - Numer. Math. 85 (2000) 579–608.

[127] Berrone S., *Robustness in a posteriori error analysisfor FEM flow models.* - Numer. Math. 91 (2002) 389 –422.

[128] Brezzi F., Fortin M., *A minimal stabilisation procedurefor mixed finite element methods.* - Numer. Math. 89 (2001) 457 –491.

[129] Brezzi F., Marini D., Suli E., *Residual-free bubbles for advection-diffusion problems: the general error analysis.* - Numer. Math. 85 (2000) 31–47.

[130] A.N. Brooks, T.J.R. Hughes, *Streamline Upwind/ Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations.* - Comp.Methods Appl.Mech.Engrg. 32 (1982) 199-259.

[131] Castaings W., Navon I.M., *Mesh refinement strategies for solving singularly perturbed reaction-diffusion problems.* - Comput. Math. Appl.41(2001)157-176.

[132] Chen Z., Nochetto R.H., *Residual type a posteriori error estimates for elliptic obstacle problems.* - Numer. Math. 84 (2000) 527–548.

[133] R. Codina, J. Blasco, *Analysis of a stabilized finite element approximation of the transient convection-diffusion-reaction equation using orthogonal subscales.* - Comput. Visual. Sci. 4 (2002) 167–174.

[134] Dolejsi V., *Anisotropic mesh adaptation for finite volume and finite element methods on triangular meshes.* - Comput. Visual. Sci. 1 (1998) 165–178.

[135] Error-controlled Adaptive Finite Elements in Solid Mechanics/ E. Stein, ed. - Chichester: Wiley, 2003. - 424 p.

[136] Evje S., Karlsen K.H., *Viscous splitting approximation of mixedhyperbolic-parabolic convection-diffusion equations.* - Numer. Math. 83 (1999) 107–137.

[137] Frey S., Martins-Costa M.L., da Gama R.M.S., *Stabilized finite element approximations for heat conduction in a 3-D plate with dominant thermal source.* - Comput. Mech. 24 (1999) 118-126.

[138] Formaggia L., Perotto S., Zunino P., *An anisotropic a-posteriori error estimate for a convection-diffusion problem.* - Comput. Visual. Sci. 4 (2001) 99–104.

[139] Formaggia L., Perotto S., *Anisotropic error estimates for elliptic problems.* - Numer. Math. 94 (2003) 67–92.

[140] Fuenmayor F.J., Restrepo J.L., Taranco J.E., Baeza L., *Error estimation and h-adaptive refinement in the analysis of natural frequencies.* - Finite Elements Anal. Design 38 (2001) 137-153.

[141] Galeao A.C., Almeida R.C., Malta S.M.C., Loula A.F.D., *Finite element analysis of convection dominated reaction–diffusion problems.* - Appl. Numer. Math. 48 (2004) 205–222.

[142] Galiano G., Garzon M.L., Jungel A., *Semi-discretization in time and numerical convergence of solutions of a nonlinear cross-diffusion population model.* - Numer. Math. 93 (2003) 655–673.

[143] Harari I., Frey S., Franka L.P., *A note on a recent study of stabilized finite computations for heat conduction.* - Comput. Mech. 18 (2002) 63–65.

[144] John V., Maubach J.M., Tobiska L., *Nonconforming streamline-diffusion-finite-element-methods for convection-diffusion problems.* - Numer. Math. 78 (1997) 165–188.

[145] R. Knabrer, L. Angermann, *Numerical Methods for Elliptic and Parabolic Partial Differential Equations.* - New York: Springer, 2003. - 440 pp.

[146] R. Krause, E. Rank, *Multiscale computations with a combination of the h -and p -versions of the finite element method.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 3959 –3983.

[147] Kruger O., Picasso M., Scheid J.-F., *A posteriori error estimates and adaptive finite elements for a nonlinear parabolic problem related to solidification.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 535–558.

[148] Kunert G., *An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes.* - Numer. Math. 80 (2000) 471–490.

[149] Kunert G., Verfurth R., *Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes.* - Numer. Math. 86 (2000) 283–303.

[150] Kuther M., *A priori error estimates for approximate solutions to convex conservation laws.* - Numer. Math. 93 (2003) 697 –727.

[151] Lang J. , *Adaptive FEM for reaction-diffusion equations.* - Appl. Numer. Math. 26 (1998) 105-116.

[152] Liu W., Yan N., *A posteriori error estimates for control problems governed by nonlinear elliptic equations.* - Appl. Numer. Math. 47 (2003) 173–187.

[153] Liu W., Yan N., *A posteriori error estimates for optimal control problems governed by parabolic equations.* - Numer. Math. 93 (2003) 497–521.

[154] Manzi C., Rapetti F. , Formaggia L., *Function approximation on triangular grids: some numerical results using adaptive techniques.* - Appl. Numer. Math. 32 (2000) 389–399.

[155] Melbo H., Kvamsdal T., *Goal oriented error estimators for Stokes equations based on variationally consistent postprocessing.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 613–633.

[156] J.M. Melenk, *hp-Finite Element Method for Singular Perturbations.* - Berlin: Springer, 2002. - 318 p.

[157] Micheletti S., *Stabilized finite elements for semiconductor device simulation.* - Comput. Visual. Sci. 3 (2001) 177–183.

[158] Modeling, Mesh Generation and Adaptive Numerical Methods for Partial Differential Equations/ I. Babuska, ed. - New York: Springer, 1995. - 450 p.

[159] Moore P.K., *Implicit interpolation error-based error estimation for reaction-diffusion equations in two space dimensions.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 4379–4401.

[160] P. Morin, R.H. Nochetto, K.G. Siebert, *Convergence of Adaptive Finite Element Methods.* - SIAM Review, 44 (2002) 631-658.

[161] K.W. Morton, *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems.* - London: Chapman Hall, 1996. -372 p.

[162] A. Nesliturk,I. Harari, *The nearly-optimal Petrov –Galerkin method for convection–diffusion problems.* - Comput.Methods Appl.Mech.Engrg. 192 (2003) 2501–2519

[163] Oden J.T., Prudhomme S., *Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method.* - Comput. Math. Appl. 41 (2001) 735-756.

[164] Ohlberger M., *A posteriori error estimate for finite volume approximations to singularly perturbed nonlinear convection-diffusion equations.* - Numer. Math. 87 (2001) 737–761.

[165] Paulino G.H., Menezes I.F.M., Neto J.B.C., Martha L.F., *A methodology for adaptive finite element analysis: Towards an integrated computational environment.* - Comput. Mech. 23 (1999) 361-388.

[166] Quarteroni A., Valli A., *Numerical Approximation of Partial Differential Equations.* - Berlin: Springer, 1993. - ??? p.

[167] Schwab C., *A posteriori modeling error estimation for hierarchic plate models.* - Numer. Math. 74 (1996) 221–259.

[168] Ch. Schwab, *p- and hp-Finite Element Methods: Theory and Applications in Solid and Fluid Mechanics.* - Oxford: Clarendon Press, 1998. - 380 p.

[169] Siebert K.G., *An a posteriori error estimator for anisotropic refinement.* - Numer. Math. 73 (1996) 373–398.

[170] Usmani A.S., *An h-adaptive SUPG-FEM solution of the pure advection equation.* - Appl. Numer. Math. 26 (1998) 193-202.

[171] Verfurth R., *A posteriori error estimators for convection-diffusion equations.* - Numer. Math. 80 (1998) 641–663.

[172] Verfurth R., *Robust a posteriori error estimators for a singularlyperturbed reaction-diffusion equation.* - Numer. Math. 78 (1998) 479–493.

[173] R. Verfurth, *A Review of a Posteriory Error Estimation and Adaptive Mesh Refinement Techniques.* - Chichester: Wiley-Tubner, 1996. - 128 p.

[174] Wagner C., Kinzelbach W., Wittum G., *Schur-complement multigrid: A robust method for groundwater flow and transport problems.* - Numer. Math. 75 (1997) 523–545.

[175] Environment, Economics and their Mathematical Models/ J.-I. Diaz, J.-L. Lions, eds. - Paris: Masson, 1994. - 200 p.

[176] I. Javandel, C. Doughty, C.F. Tsang, *Groundwater Transport: Handbook of Mathematical Models.* - Washington: Americ. Geophys. Union, 1984. - 228 p.

[177] A. Henderson-Sellers, K. McGuffie, *A Climate Modelling Primer.* - Chichester: Wiley, 1987. - 217 p.

[178] J.G. Miller, *Living Systems. Second edit.* - Colorado: University Press of Colorado, 1995. - 1102 p.

[179] J.D. Murray, *Mathematical Biology, I: An Introduction. Fifth edit.* - Berlin: Springer, 2000. - 537 pp.

[180] J.D. Murray, *Mathematical Biology, 2. Fifth edit.* - Berlin: Springer, 2000. - 791 pp.

[181] B. Poskrobko, *Zarzadzanie srodowiskiem.* - Warszawa: PWE, 1998. - 402 p.

[182] G.L. Swartzman, S.M. Kaluzny, *Ecological Simulation Primer.* - New York: Macmillan, 1987. - 370 p.