

Vysoké učení technické v Brně
Fakulta stavební
Ústav matematiky a deskriptivní geometrie

Doc. RNDr. Josef Dalík, CSc.

Numerické řešení úloh konvekce-difúze
a reakce-difúze

Teze habilitační práce

Brno 2000

Obsah

1. Úvod (5)
 2. Jednorozměrná stacionární úloha (5)
 3. Rovinný stacionární případ (13)
 4. Jednorozměrný nestacionární případ (19)
 5. Rovinný nestacionární případ (22)
- Použitá literatura (26)
- Abstract (28)

Josef Dalík se narodil v roce 1949 v Krnově. V roce 1972 ukončil s vyznamenáním studium oboru odborná matematika na Fakultě přírodovědecké Masarykovy University v Brně. Po absolvování základní vojenské služby a po krátkém působení v n.p. INCOTEX Brno absolvoval v letech 1974–76 studijní pobyt v brněnské pobočce Matematického ústavu ČSAV. Od 1.1.1977 je učitelem Ústavu matematiky a deskriptivní geometrie Fakulty stavební VUT v Brně. Od roku 1997 je vedoucím tohoto pracoviště.

V roce 1975 získal titul RNDr. a v roce 1979 titul CSc. v oboru algebra a teorie čísel. V roce 1982 změnil svou odbornou orientaci z teoretických základů informatiky na numerickou analýzu. V roce 1990 získal v rámci rehabilitací titul docenta v oboru přibližné a numerické metody na MU. V letech 1995 a 96 byl koordinátorem grantu GA ČR "Numerické modelování difúzních procesů v extrémních podmínkách". Od roku 1980 je recenzentem časopisu *Mathematical Reviews* a členem Americké matematické společnosti. V současné době se podílí na řešení jednoho grantu GA ČR a dvou vědeckovýzkumných záměrů vedených na Fakultě stavební VUT.

Pedagogické práci se věnuje od roku 1975. Nejprve na Fakultě elektrotechnické a od roku 1977 na Fakultě stavební VUT v Brně. Od roku 1979 byl pověřován nejen cvičeními, ale i přednáškami z matematiky a později i z programování a numerických metod. Vyučuje numerické metody v doktorských studijních programech a přednáší matematiku na oboru, v němž je vyučovacím jazykem angličtina. Vytvořil koncepci několika nových předmětů z oblasti informatiky a numerických metod. Je autorem nebo spoluautorem tří skript. V roce 1998 úspěšně vyřešil pedagogický grant IMG-97-CZ-2025 programu TEMPUS.

Školní rok 1969/70 strávil na studijním pobytu na Technische Hochschule v Karlsruhe. V roce 1980 absolvoval stáž na Polytechnice v Poznani (2 měsíce) a na Universitě M. Koperníka v Toruni (1 měsíc). V roce 1991 se zúčastnil semestru Mezinárodního matematického centra S. Banacha ve Varšavě, věnovaného numerickým metodám a v roce 1998 strávil jeden měsíc v National University of Ireland, Maynooth.

1 Úvod

Numerické modelování úloh konvekce-difúze lze dnes považovat za jednu z nejrychleji se rozvíjejících oblastí numerické analýzy. Na velký počet časopiseckých publikací věnovaných tomuto tématu začíná v posledních letech navazovat i rostoucí počet monografií. Viz například Morton [3] nebo Roos, Stynes, Tobiska [4]. Tento vývoj zdůvodňuje autor díla [3] takto: ” *Accurate modelling of the interaction between convective and diffusive processes is the most ubiquitous and challenging task in the numerical approximation of partial differential equations. This is partly because of the problems themselves, their great variety and widespread occurrence, as well as their close association with singular perturbation problems and boundary layer theory.*” Cílem tohoto textu je vyložit příspěvek autora k této problematice.

Autor se začal zabývat hledáním nových algoritmů pro řešení stacionární jednorozměrné úlohy konvekce–difúze v roce 1983. Tato úloha byla vybrána jako nejjednodušší netriviální příklad, v němž se společně s I. Kopečkem snažili využít nových poznatků, získaných při analýze obecných podmínek pro algoritmickou řešitelnost lineárních diferenciálních problémů. Stručná zmínka o těchto poznacích je uvedena v [8].

V textu je použito standardního značení $C(\Omega)$, $C^{(k)}(\Omega)$ ($k = 1, 2, \dots$), $L_2(\Omega)$, $H^k(\Omega)$ ($k = 1, 2, \dots$), $H_0^1(\Omega)$, $L^\infty(\Omega)$ pro prostory funkcí na ohraničené (otevřené nebo uzavřené) oblasti Ω v R^n pro $n = 1, 2$ a

$$(f, g) = \int_{\Omega} f(x)g(x) dx$$

pro skalární součin funkcí f, g v $L_2(\Omega)$. Rovněž symboly $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$, $\|u\|_1$ a $\|u\|_2$ pro označení norem v prostorech $L_2(\Omega)$, $H^1(\Omega)$ a $H^2(\Omega)$ jsou běžně používané.

2 Jednorozměrná stacionární úloha

Zabývejme se nejprve okrajovou úlohou

$$-\varepsilon u'' + p u' + q u = f \quad \text{pro } x \in (a, b), \quad u(a) = 0 = u(b). \quad (1)$$

V této i ve všech dále uvažovaných úlohách mají hodnoty hledané funkce u význam teploty látky případně koncentrace nečistot v látce a fyzikální význam koeficientů rovnic je v souladu s tímto nejčastěji se vyskytujícím významem koeficientů rovnice (1):

- ε je kladná konstanta odpovídající koeficientu tepelné vodivosti případně koeficientu difúze,
- $p \in C^{(1)}(a, b)$ odpovídá rychlosti toku látky,
- $q \in L^\infty(a, b)$ odpovídá intenzitě absorpce,
- $f \in L_2(a, b)$ odpovídá intenzitě zdrojů tepla případně nečistot.

Je známo, že za předpokladu $q - 0,5p' \geq 0$ v (a, b) má úloha (1) jediné slabé řešení $u \in H_0^1(a, b) \cap H^2(a, b)$. Jestliže však převládá konvekce ($\varepsilon \ll |p|$) nebo absorpce ($\varepsilon \ll q$), pak v intervalu (a, b) zpravidla existují podintervaly malé délky, nazývané *hraniční* nebo *vnitřní vrstvy*, v nichž se hodnoty funkce u extrémně rychle mění. Existence vrstev je typická pro přesné řešení každé úlohy, která se v této kapitole objeví.

Speciální případ

$$-\varepsilon(u^\varepsilon)'' + (u^\varepsilon)' = x \quad \text{pro } x \in (0, 1), \quad u^\varepsilon(0) = 0 = u^\varepsilon(1) \quad (2)$$

úlohy (1) má přesné řešení

$$u^\varepsilon(x) = \left(\varepsilon + \frac{x}{2}\right)x - \left(\varepsilon + \frac{1}{2}\right)\frac{1 - e^{x/\varepsilon}}{1 - e^{1/\varepsilon}}.$$

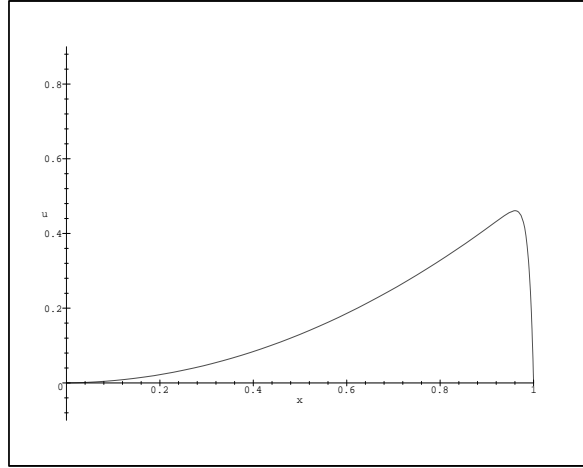
Jestliže $\varepsilon \ll 1$, pak jde o úlohu s převládající konvekcí a funkce u^ε má hraniční vrstvu v okolí bodu $x = 1$. Viz graf funkce $u^{0,01}$ na obr.1. Pro ilustraci problémů, které při numerickém řešení úloh tohoto typu vznikají, řešme úlohu (2) metodou sítí s krokem $h = 1/n$ pro některé přirozené číslo n .

Nechť $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = 1$ jsou ekvidistantní uzly s krokem h . Metoda sítí poskytne aproximaci u_i přesné hodnoty $u^\varepsilon(x_i)$ pro $i = 0, 1, \dots, n$ jako řešení systému lineárních algebraických rovnic, přiřazených postupně jednotlivým uzlům. Uzlům x_0, x_n jsou lineární rovnice přiřazeny diskretizací okrajových podmínek – v našem případě vznikne

$$u_0 = 0, \quad u_n = 0.$$

Pro $i = 1, 2, \dots, n - 1$ dosadíme x_i za x do rovnice (2) a derivace funkce u^ε aproximujeme výrazy

$$(u^\varepsilon)''(x_i) \doteq \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}, \quad (u^\varepsilon)'(x_i) \doteq \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}.$$



Obrázek 1

Výsledkem je rovnice

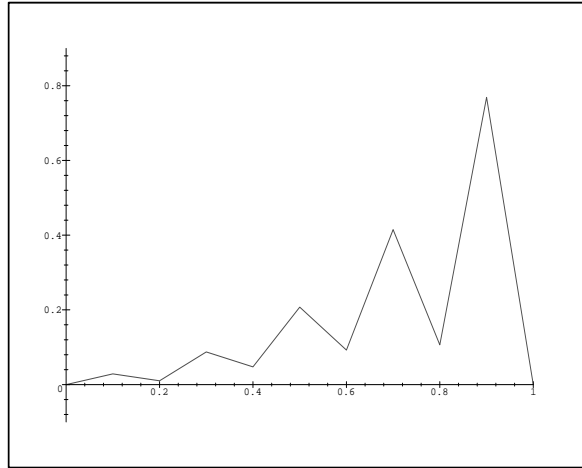
$$-\varepsilon \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = x_i,$$

z níž po vynásobení číslem $2h$ a po úpravě dostaneme

$$-\left(\frac{2\varepsilon}{h} + 1\right) u_{i-1} + \frac{4\varepsilon}{h} u_i - \left(\frac{2\varepsilon}{h} - 1\right) u_{i+1} = 2hx_i.$$

Položíme-li $u_0 = 0$ v rovnici přiřazené uzlu x_1 a $u_n = 0$ v rovnici přiřazené x_{n-1} , vznikne systém rovnic $A_\varepsilon \vec{u} = \vec{b}$, kde

$$A_\varepsilon = \begin{bmatrix} \frac{4\varepsilon}{h} & 1 - \frac{2\varepsilon}{h} & \dots & 0 \\ -1 - \frac{2\varepsilon}{h} & \frac{4\varepsilon}{h} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{4\varepsilon}{h} \end{bmatrix}, \quad \vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad \vec{b} = \begin{bmatrix} 2h^2 \\ 4h^2 \\ \vdots \\ 2(n-1)h^2 \end{bmatrix}.$$



Obrázek 2

Například pro $\varepsilon = 0,01$ a $h = 0,1$ má tento systém rovnic tvar

$$\begin{bmatrix} 0,4 & 0,8 & \dots & 0 \\ -1,2 & 0,4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0,4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,02 \\ 0,04 \\ \vdots \\ 0,18 \end{bmatrix}. \text{ Potom } \vec{u} = \begin{bmatrix} 0,0285 \\ 0,0107 \\ 0,0874 \\ 0,0474 \\ 0,2073 \\ 0,0925 \\ 0,4148 \\ 0,1063 \\ 0,7690 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Z výsledku (3), graficky znázorněného na obr.2, je zřejmé, že vypočtená aproximace \vec{u} hodnot funkce u^ε je nestabilní. Budeme říkat, že aproximace \vec{u} *osciluje*. Je dobře známo, že stabilita numerického řešení je zaručena v případě, kdy matice příslušné soustavy rovnic je monotónní.

Čtvercová matice A se nazývá *monotónní*, jestliže existuje matice A^{-1} inverzní k A a všechny prvky matice A^{-1} jsou nezáporné.

Pro rozhodnutí, zda daná čtvercová matice je monotónní, je často použí-

váno toto kritérium:

Věta 1. (Bramble, Hubbard [5]) Čtvercová matice $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ je monotonní, jsou-li splněny podmínky

$$(a) \quad i \neq j \implies a_{ij} \leq 0,$$

(b) existuje množina $I \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ taková, že

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} > 0 \iff i \in I \quad \text{a} \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} = 0 \iff i \in \{1, 2, \dots, n\} - I,$$

(c) pro každý index $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ existují indexy $j \in I$ a k_1, k_2, \dots, k_s tak, že čísla $a_{ik_1}, a_{ik_2}, \dots, a_{ik_s}$ jsou vesměs různá od nuly.

Matice $A_{0,01}$ soustavy (3) nesplňuje podmínku (a), neboť například $a_{12} = 0,8 > 0$. Protože v matici A_ε je $a_{i,i+1} = 1 - 2\varepsilon/h$, je podmínka (a) splněna jen v případě $h \leq 2\varepsilon$. Tedy například pro stabilitu aproximace funkce $u^{10^{-8}}$ metodou sítí vyžaduje Věta 1, aby $h \leq 0,00000002$. Tento požadavek je prakticky neuskutečnitelný.

Protože analogie k tomuto extrémně velkému poměru mezi rychlostí toku a hodnotou koeficientu difúze se vyskytuje v mnoha důležitých diferenciálních úlohách, je pro jejich numerické řešení nutno hledat nové metody. Dobře známé a dnes rutinně používané jsou tyto dvě jednoduché úpravy metody sítí:

1. Umělá difúze. Tato metoda spočívá v nahrazení koeficientu difúze ε co nejmenší hodnotou E tak, aby $E \geq \varepsilon$ a aby modifikovaná matice soustavy byla monotonní. Například při řešení úlohy (2) pro $\varepsilon = 0,01$ s krokem $h = 0,1$ je koeficient ε zvětšen na $E = 0,05$. Příslušný systém rovnic $A_E \vec{u} = \vec{b}$ má tvar

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & \dots & 0 \\ -2 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,02 \\ 0,04 \\ \vdots \\ 0,18 \end{bmatrix}, \quad \text{takže } \vec{u} = \begin{bmatrix} 0,01 \\ 0,03 \\ 0,06 \\ 0,1 \\ 0,15 \\ 0,21 \\ 0,28 \\ 0,36 \\ 0,45 \end{bmatrix}.$$

2. Upwind. V této metodě je první derivace $(u^\varepsilon)'(x_i)$ aproximována poměrnou diferencí směrem dopředu nebo zpět místo výše uvedené centrální difference. V úloze (2), v níž látka teče v kladném směru osy x , je první derivaci nutno aproximovat zpětnou diferencí. Tedy pro $i = 1, 2, \dots, n-1$ vznikne rovnice

$$-\varepsilon \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = x_i$$

a její úpravou obdržíme

$$-u_{i-1} \left(1 + \frac{\varepsilon}{h}\right) + u_i \left(\frac{2\varepsilon}{h} + 1\right) - u_{i+1} \frac{\varepsilon}{h} = h x_i.$$

Položíme-li $\varepsilon = 0,01$ a $h = 0,1$, získáme systém rovnic

$$\begin{bmatrix} 1,2 & -0,1 & \dots & 0 \\ -1,1 & 1,2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1,2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,01 \\ 0,02 \\ \vdots \\ 0,09 \end{bmatrix} \quad \text{a tedy } \vec{u} = \begin{bmatrix} 0,0100 \\ 0,0320 \\ 0,0630 \\ 0,1040 \\ 0,1550 \\ 0,2160 \\ 0,2866 \\ 0,3634 \\ 0,4081 \end{bmatrix}.$$

Uvedené příklady ilustrují skutečnost, že metody 1, 2 poskytují stabilní aproximace řešení. Mají však tyto nedostatky:

- (n1) Chyba aproximace $|u^\varepsilon(x_i) - u_i|$ pro $i = 1, 2, \dots, n-1$ vytvořená metodou 1 nebo 2 je úměrná kroku h , zatímco stejná chyba aproximace vytvořená metodou sítí je úměrná h^2 .
- (n2) Šířka aproximací vrstev fakticky nezávisí na velikosti koeficientu difúze ε . Zpravidla je šířka aproximací vrstev podstatně větší, než šířka odpovídajících vrstev přesného řešení. Říkáme potom, že aproximace má příliš velkou *umělou difúzi*.

Problémy se stabilitou aproximace se objevují při numerickém řešení řady důležitých diferenciálních úloh včetně všech úloh z této kapitoly. Cílem dále popsané analýzy je postup pro výpočet aproximace řešení, která

- (c1) je stabilní,
 (c2) má co nejmenší umělou difúzi a
 (c3) je zatížena chybou, která je úměrná co nejvyšší mocnině kroku h .

Aproximace řešení některých příkladů úlohy (1) v článku [9] naznačují vlastnosti (c1) – (c3). Tyto příklady byly řešeny jistou variantou metody Petrovovy–Galerkinovy, jejíž matematická analýza byla zveřejněna v práci [12]. Metoda vychází z této *slabé formulace* úlohy (1): Najděte funkci $u \in H_0^1(a, b)$ tak, aby

$$\alpha(u, v) \equiv \int_a^b (\varepsilon u' v' + p u' v + q u v) dx = (f, v) \quad \forall v \in H_0^1(a, b). \quad (4)$$

Ke zvolenému přirozenému číslu n jsou přiřazeny

- krok diskretizace $h = (b - a)/n$,
- hrubá ekvidistantní síť $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ s krokem h ,
- jemná ekvidistantní síť $a = \bar{x}_0 < \bar{x}_1 < \dots < \bar{x}_{2n} = b$ s krokem $h/2$

a funkční prostory

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \{ \varphi \mid \varphi \text{ je lineární splajn s uzly } x_0, x_1, \dots, x_n, \varphi(a) = 0 = \varphi(b) \}, \\ \mathbf{W} &= \{ \psi \mid \psi \text{ je lineární splajn s uzly } \bar{x}_0, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_{2n}, \psi(a) = 0 = \psi(b) \}. \end{aligned}$$

Je dobře známo, že funkce $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{n-1}$ z prostoru \mathbf{V} definované předpisem

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{pro } j = i \\ 0 & \text{pro } j \neq i \end{cases}, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

tvoří bazi ve \mathbf{V} a funkce $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{2n-1}$ z prostoru \mathbf{W} definované předpisem

$$\psi_i(\bar{x}_j) = \begin{cases} 1 & \text{pro } j = i \\ 0 & \text{pro } j \neq i \end{cases}, \quad j = 0, 1, \dots, 2n$$

tvoří bazi ve \mathbf{W} . Metoda spočívá v konstrukci lineárního operátoru $\mathbf{L} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{W}$, který splňuje požadavky

- (p1) $\mathbf{L}(\varphi_i)$ je lineární kombinací funkcí $\psi_{2i-1}, \psi_{2i}, \psi_{2i+1}$ pro $i = 1, 2, \dots, n-1$,

- (p2) $\alpha(u, \mathbf{L}(v)) = A(u, v) = \int_a^b (E u' v' + p u' v + q u v) dx$ pro všechna $u, v \in \mathbf{V}$.
 Zde E je nejmenší ze všech obecně nespojitých funkcí konstantních na intervalu (x_{i-1}, x_i) pro $i = 1, 2, \dots, n$, splňujících $\varepsilon \leq E$ na (a, b) a takových, že matice $(A(\varphi_j, \varphi_i))_{i,j=1}^{n-1}$ je monotonní.

Funkce $u_h = u_1 \varphi_1 + u_2 \varphi_2 + \dots + u_{n-1} \varphi_{n-1} \in \mathbf{V}$ je pak numerickým řešením úlohy (1), jsou-li koeficienty u_1, u_2, \dots, u_{n-1} řešením systému lineárních rovnic

$$A(u_h, \varphi_i) = (f, \mathbf{L}(\varphi_i)), \quad i = 1, 2, \dots, n-1.$$

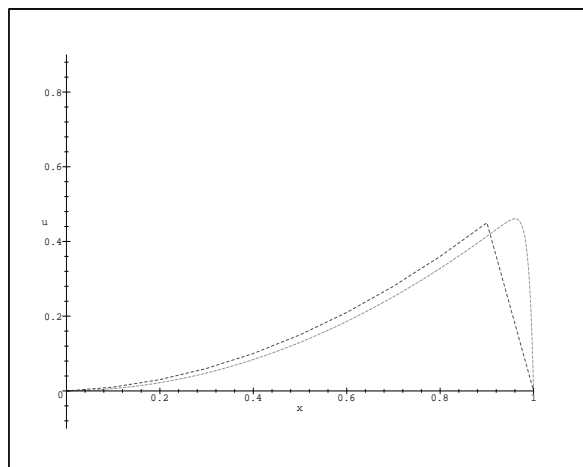
Splnění požadavku (p1) zaručuje, že matice tohoto systému rovnic je třídiagonální. Splnění podmínky (p2) pak zajišťuje jednak stabilitu vypočtené aproximace a jednak skutečnost, že šířka aproximací vrstev není větší, než je nutné vzhledem k velikosti kroku diskretizace.

V [12] jsou analyzovány dva případy úlohy (1).

1. $q \equiv 0$: Jestliže existuje kladná konstanta p_0 s vlastností $p(x) \geq p_0$ pro $x \in [a, b]$, pak je dokázáno, že $\|u - u_h\| \leq Ch^{1,5}$ a $\|u - u_h\|_1 \leq Ch$.
 V případě, že funkce p mění v intervalu (a, b) znaménko, je exponent v obou odhadech menší o 0,5.
2. $p \equiv 0$: V tomto případě jsou nalezeny odhady chyb optimálního řádu, totiž $\|u - u_h\| \leq Ch^2$ a $\|u - u_h\|_1 \leq Ch$.

V uvedených odhadech nezávisí koeficienty úměrnosti C na koeficientu ε ani na kroku h , ale obecně závisí na normách přesného řešení u v prostorech $H^1(a, b)$ a $H^2(a, b)$. Protože tyto normy jsou extrémně velké vlivem vlastností řešení u ve vrstvách, jsou v případech 1 i 2 odvozeny tzv. lokální odhady chyb, které odhadují chybu $u - u_h$ jen na jistém zvoleném podintervalu D v $[a, b]$. Koeficienty úměrnosti C pak závisí na H^1 - a H^2 -normách zúžení funkce u na jisté rozšíření D^e intervalu D . Interval D lze zvolit tak, aby vrstvy měly prázdný průnik s intervalem D^e . Tyto lokální odhady jsou stejného řádu jako odhady odpovídajících globálních chyb uvedené v 1 a 2.

Porovnání grafu přesného řešení $u_{0,01}$ úlohy (2) s grafem aproximace řešení $u_{0,01}$ získané upwindem s krokem 0,1 z obr.3 ukazuje, že tato aproximace je velmi nepřesná na celém intervalu $[0,1]$. Obr.3 je tedy dobrou ilustrací významu výše uvedeného nedostatku (n1) a požadavku (c3). Žádná z popsaných metod nemůže poskytnout dobrou aproximaci řešení uvnitř vrstvy,



Obrázek 3

neboť velký poměr mezi hodnotou kroku h a šířkou vrstvy to nedovolí. Případ, kdy může dominovat jak konvekce tak i absorpce, je pro konstantní funkce p, q prozkoumán v práci [13]. Je dokázáno, že za předpokladu

$$p = Ph^s q, \text{ kde } \begin{cases} s = 0, P = p/q & \text{pro } q \leq |p|, \\ 0 < s < 1, |P| = 1 & \text{pro } hq < |p| < q, \\ s = 1, P = p/(hq) & \text{pro } |p| \leq hq \end{cases}$$

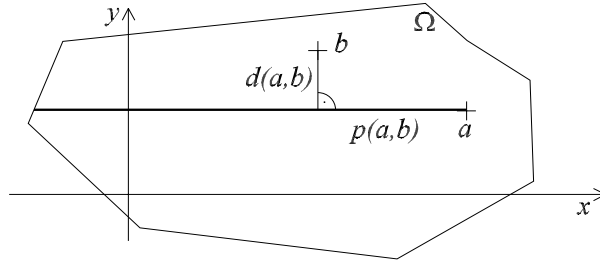
platí $\|u - u_h\| \leq Ch^{1,5+0,5s}$ a $\|u - u_h\|_1 \leq Ch$.

3 Rovinný stacionární případ

V [12] byla analogie výše popsané Petrovovy–Galerkinovy metody použita i pro řešení stacionární rovinné úlohy

$$-\varepsilon \Delta u + \vec{p} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} u + qu = f \quad \text{v } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{na } \partial\Omega, \quad (5)$$

kde $\Omega \subset R^2$ je oblast s polygonální hranicí $\partial\Omega$. Řády chyb na úrovni apriorních odhadů z jednorozměrného případu byly pouze ilustrovány pomocí výsledků experimentů. Výsledky numerických řešení této rovinné úlohy



Obrázek 4

nebyly uspokojující, neboť se v blízkosti vrstev vyskytovaly náznaky oscilací a současně byly vypočtené aproximace zatíženy umělou difúzí většího rozsahu, než bylo nutné. Viz obr.11 v [12].

Tyto nedostatky společně se snahou najít apriorní odhady chyby aproximace dostatečně vysokého řádu i v rovinném případě motivovaly vznik nové numerické metody. Po dlouhém hledání, které je částečně dokumentováno v článkách [10] a [11], byla v práci [14] navržena metoda s názvem *FD4-3 metoda* pro řešení stacionární okrajové úlohy

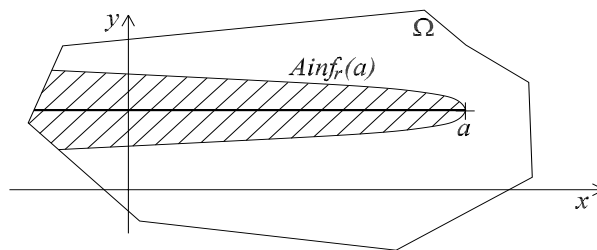
$$-\varepsilon \Delta u + \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, y) \quad \text{v } \Omega, \quad u = g \quad \text{na } \partial\Omega. \quad (6)$$

Předpoklady zaručující existenci a jednoznačnost klasického řešení úlohy (6) jsou uvedeny v [2].

Buďte $a = (a_1, a_2)$, $b = (b_1, b_2)$ libovolné body z $\bar{\Omega}$. Symbolem $|ab|$ označíme délku úsečky \overline{ab} a položíme

$$d(a, b) = |b_2 - a_2|, \quad p(a, b) = \max\{0, a_1 - b_1\}.$$

V tomto výkladu budeme hodnoty hledané funkce $u = u(x, y)$ interpretovat jako teploty. Z fyzikálního významu rovnice (6) pak plyne, že látka proudí oblastí Ω v kladném směru osy x s jednotkovou rychlostí. Tedy do bodu a se částice látky dopravují po trajektorii $U_a = \{(x, a_2) \in \Omega \mid x \leq a_1\}$, znázorněné na obr.4. Předpoklad $\varepsilon \ll 1$ znamená, že částice si teplo předávají s intenzitou podstatně menší, než je rychlost toku. Potom teplota $u(a)$ částic protékajících bodem a závisí podstatně jen na teplotě na trajektorii



Obrázek 5

U_a a v jejím blízkém okolí. Ze studia analytického řešení jisté okrajové úlohy pro rovnici (6) z článku [6] a z fyzikálních úvah v [7] plyne, že za množinu bodů, které hodnotu $u(a)$ ovlivňují do jisté "stejně míry" nebo více, lze vzít tuto *oblast vlivu*

$$\text{Ainf}_r(a) = \left\{ b \in \bar{\Omega} \mid \frac{d(a, b)^2}{\varepsilon p(a, b)} \leq r \right\}$$

s parametrem r . Viz obr.5. Oblast vlivu je zřejmě ohraničena parabolou, jejíž šířka je úměrná $\sqrt{\varepsilon}$. Se zmenšením parametru r se oblast vlivu zmenšuje o body, na nichž hodnota $u(a)$ závisí relativně nejméně.

Soustava \mathcal{T} trojúhelníků s vrcholy v $\bar{\Omega}$ se nazývá *triangulace* Ω , jestliže každé dva různé trojúhelníky z \mathcal{T}

- jsou disjunktní nebo
- mají společný právě jeden vrchol nebo
- mají společnou právě jednu stranu.

Vrcholy (Strany) trojúhelníků z \mathcal{T} budeme nazývat *vrcholy (strany) triangulace* \mathcal{T} . Libovolné dva trojúhelníky, které mají společnou právě jednu stranu, nazveme *sousedními*. Číslo

$$h = \max\{|ab| \mid \overline{ab} \text{ je strana triangulace } \mathcal{T}\}$$

se nazývá *krok (diskretizace)* \mathcal{T} . Triangulaci \mathcal{T} s krokem h budeme značit \mathcal{T}_h a položíme

$$\Omega_h = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T.$$

FD4-3 metoda je varianta metody sítí, která najde aproximaci u_a přesné hodnoty $u(a)$ pro každý vrchol a dané triangulace \mathcal{T}_h .

Metoda předpokládá, že každý vrchol a , který leží na hranici $\partial\Omega_h$, leží i na hranici $\partial\Omega$. Vzhledem k okrajové podmínce je potom přirozené položit

$$u_a = g(a) \quad \text{pro každý vrchol } a \in \partial\Omega_h.$$

Označme V_h množinu všech vrcholů triangulace \mathcal{T}_h , které jsou vnitřními body oblasti Ω_h .

Ve shodě s fyzikální podstatou modelovaného procesu vyjadřuje FD4-3 metoda pro každý vrchol $a \in V_h$ aproximaci u_a jako lineární kombinaci hodnot u_x ve vrcholech $x \in \text{Ainf}_r(a)$ pro co nejmenší parametr r nezávislý na ε ani na h . Toho je dosaženo pomocí čtyřbodového schématu FDS4 nebo tříbodového schématu FDS3.

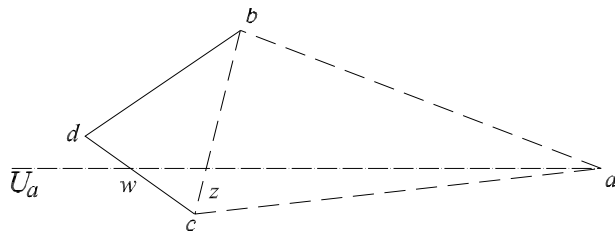
Schema FDS4 je odvozeno z rovnice (6) numerickou integrací přes jistou úsečku $\overline{xa} \subseteq U_a$ a má tvar

$$u_a = \mu(ba)u_b + \mu(ca)u_c + \mu(da)u_d + \alpha_a. \quad (7)$$

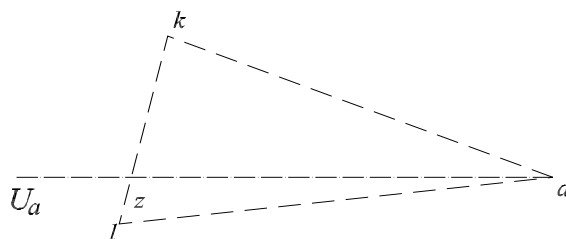
Zde \overline{bd} , \overline{dc} jsou strany triangulace, trojúhelníky \overline{abc} , \overline{bcd} jsou sousední (obecně to nejsou trojúhelníky z \mathcal{T}_h) a $U_a \cap \overline{bc} = \{z\}$. Potom platí buď $U_a \cap \overline{bd} \neq \emptyset$ nebo $U_a \cap \overline{dc} \neq \emptyset$. Protože tyto dva případy jsou ekvivalentní, uvážíme jen případ $U_a \cap \overline{dc} = \{w\}$ znázorněný na obr.6. V tomto případě

$$\begin{aligned} \mu(ba) &= \frac{2\varepsilon|wa|}{d(a,b)d(b,c)c_a}, \\ \mu(ca) &= \left\{ \frac{|wd|}{|cd|} \left(1 - \frac{2\varepsilon|za|}{d(a,b)d(a,c)} \right) + \frac{2\varepsilon|wa|}{d(b,c)d(a,c)} \right\} / c_a, \\ \mu(da) &= \frac{|cw|}{|cd|} \left(1 - \frac{2\varepsilon|za|}{d(a,b)d(a,c)} \right) / c_a, \\ \alpha_a &= \left\{ \int_{\overline{wa}} f ds + \frac{2\varepsilon}{d(a,b)d(a,c)} \left(|wz| \int_{\overline{za}} f ds - |za| \int_{\overline{wz}} f ds \right) \right\} / c_a \quad \text{a} \\ c_a &= 1 + \frac{2\varepsilon|wz|}{d(a,b)d(a,c)}. \end{aligned}$$

Trojici vrcholů b, c, d nazveme *vhodnou*, jestliže v rovnici (7) platí $\mu(xa) \geq 0$ pro $x = b, c, d$.



Obrázek 6



Obrázek 7

Je-li vrcholu a přiřazena rovnice schematem FDS3, pak má tvar

$$u_a = \mu(ka)u_k + \mu(la)u_l + \alpha_a, \quad (8)$$

kde \overline{kl} je strana triangulace s vlastností $\overline{kl} \cap U_a = \{z\}$ – viz obr.7 – a

$$\mu(ka) = \frac{|zl|}{|kl|}, \quad \mu(la) = \frac{|kz|}{|kl|}, \quad \alpha_a = \int_{\overline{za}} f ds.$$

Monotonnost matice výsledného systému rovnic a tedy stabilita výsledné aproximace je zaručena, je-li v každé rovnici tvaru (7) trojice vrcholů b, c, d vhodná.

Je-li b, c, d vhodná trojice, pak platí

$$b, c, d \in \text{Ainf}_r(a) \implies r \geq 0,5.$$

Aby možnost nalezení vhodné trojice byla dostatečně velká, prochází FD4-3 metoda pro každý vrchol $a \in V_h$ úsečkou U_a a hledá vhodnou trojici s vlastností

$$b, c, d \in \text{Ainf}_3(a).$$

Najde-li takovou vhodnou trojici, použije ji pro sestavení rovnice pro u_a podle schématu FDS4. V opačném případě sestaví rovnici pro u_a podle schématu FDS3.

Jestliže FD4-3 metoda přiřadí k vrcholu $a \in V_h$ rovnici tvaru (7) případně (8), položíme

$$\hat{a} = \overline{abc} \cup \overline{bcd} \quad \text{případně} \quad \hat{a} = \overline{akl}.$$

Předpis

$$\begin{aligned} b \leq a, \text{ jestliže } b = a \text{ nebo existují } c_0, c_1, \dots, c_i \text{ tak, že} \\ b = c_0, \mu(c_{j-1}, c_j) > 0 \text{ pro } j = 1, \dots, i \text{ a } c_i = a \end{aligned}$$

definuje částečné uspořádání na množině vrcholů V_h . Ke každému začátku A ve V_h ($A \subset V_h$ se nazývá *začátek*, jestliže $a \in A$, $b \leq a \implies b \in A$) je v práci [14] přiřazena podoblast

$$\hat{A} = \bigcup_{a \in A} \hat{a}.$$

Triangulace \mathcal{T}_h oblasti Ω se nazývá *přípustná*, jestliže $h < 0,5$ a existuje kladné číslo c_r s těmito vlastnostmi: Poloměr kružnice vepsané libovolnému trojúhelníku $T \in \mathcal{T}_h$ je větší, než $c_r h$ a

$$\varepsilon = \frac{1}{12} c_r^2 h^q \text{ pro některé } q > 1.$$

Věta 2. (Lokální bodový odhad chyby) Buďte $u = u(x, y)$ řešení úlohy (6), \mathcal{T}_h přípustná triangulace oblasti Ω a A začátek ve V_h s vlastnostmi $\hat{A} \subseteq \bar{\Omega}$, $u \in C^{(3)}(\hat{A})$. Pak je aproximace $\{u_a \mid a \in V_h\}$ řešení u stabilní a platí

$$\max_{a \in A} |u(a) - u_a| < C_{\hat{A}}(h^2 + \varepsilon).$$

Konstanta $C_{\hat{A}}$ je přímo úměrná hodnotám jistých druhých a třetích partiálních derivací řešení u v některých bodech podoblasti \hat{A} . Z tohoto důvodu může konstanta $C_{\hat{A}}$ nabýt extrémně velké hodnoty v případě, že podoblast \hat{A} má neprázdný průnik s vrstvami. Tedy odhad chyby z Věty 2 poskytuje hodnotnou informaci jen pro podoblasti \hat{A} , jejichž průnik s vrstvami je prázdný. Numerické experimenty z práce [14] naznačují, že šířka aproximací vrstev je v souladu s modelovanou realitou do míry, kterou připouští použitý krok diskretizace.

V článku [15] je dokázáno, že aproximace řešení úlohy (6) s konstantní pravou stranou f FD4-3 metodou je totožná s aproximací řešení téže úlohy získanou jistou speciální variantou Petrovovy–Galerkinovy metody.

FD4-3 metoda poskytuje aproximace řešení stacionární rovinné úlohy konvekce–difúze s vlastnostmi (c1) – (c3) jen v případech, kdy

(o1) vektor rychlosti toku je konstantní a

(o2) konvekce silně převládá.

Tato omezení značně zmenšují použitelnost FD4-3 metody pro řešení praktických problémů.

Cílem dalšího výzkumu bylo najít numerickou metodu, která pro nestacionární rovinnou úlohu konvekce–difúze poskytuje aproximace řešení s vlastnostmi (c1) – (c3) i v případech, kdy je vektor toku proměnný a kdy konvekce převládá obecně jen na části oblasti Ω .

4 Jednorozměrný nestacionární případ

Metoda s požadovanými vlastnostmi byla analyzována nejprve v relativně jednoduchém jednorozměrném případě. V práci [16] je numericky řešena úloha

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + p \frac{\partial u}{\partial x} - \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= f \quad \text{v oblasti } Q = (0, 1) \times (0, T), \\ u(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{pro } x \in (0, 1) \quad \text{a} \\ u(x, t) &= g(x, t) \quad \text{pro } x = 0, x = 1 \quad \text{a } t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (9)$$

Předpoklady zaručující existenci, jednoznačnost a dostatečnou hladkost klasického řešení úlohy (9) lze najít v [1].

Navržená metoda je modifikací FD4-3 metody. Je to kombinace metody charakteristik s metodou sítí. Pro popis její základní myšlenky zvolme přirozená čísla n , k a položme

$$\begin{aligned} h_x &= \frac{1}{n+1}, \quad x_m = m h_x \quad \text{pro } m = 0, 1, \dots, n+1, \\ h_t &= \frac{T}{k}, \quad t_j = j h_t \quad \text{pro } j = 0, 1, \dots, k. \end{aligned}$$

Řekneme, že uspořádaná dvojice $a = (x_m, t_j)$ je *uzel*, jestliže $m \in \{0, 1, \dots, n+1\}$ a $j \in \{0, 1, \dots, k\}$. Uzel a nazveme *vnitřním* v případě, že $m \in \{1, 2, \dots, n\}$ a $j \in \{1, 2, \dots, k\}$ a symbolem V_h označíme množinu všech vnitřních uzlů.

Metoda poskytuje aproximaci u_a hodnoty řešení $u(a)$ pro každý uzel $a = (x_m, t_j)$. Jestliže $a \notin V_h$, pak položíme

$$u_a = u_0(x_m) \quad \text{pro } j = 0 \quad \text{a} \quad u_a = g(x_m, t_j) \quad \text{pro } m = 0 \quad \text{nebo } m = n+1.$$

K libovolnému uzlu $a = (x_m, t_j) \in V_h$ je lineární algebraická rovnice pro výpočet aproximace u_a přiřazena takto: Jistým způsobem, který bude popsán později, se vybere index $i \in \{0, 1, \dots, j-1\}$ a najde se funkce $\tilde{x}(t)$ jako řešení počáteční úlohy

$$\frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = p(\tilde{x}(t), t) \quad \text{pro } t \in (t_i, t_j), \quad \tilde{x}(t_j) = x_m. \quad (10)$$

Křivka

$$\mathcal{C}_{a,i} = \{(\tilde{x}(t), t) \mid t_i \leq t \leq t_j\}$$

se nazývá *charakteristika* diferenciální rovnice (9). Je to trajektorie toho hmotného bodu proudící látky, který v čase t_j prochází bodem x_m . Uvážíme jen případ, že $\mathcal{C}_{a,i} \subset \overline{Q}$. Vzhledem k (10) platí

$$\frac{\partial u(\tilde{x}(t), t)}{\partial t} + \frac{\partial u(\tilde{x}(t), t)}{\partial x} p(\tilde{x}(t), t) = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = \frac{du(\tilde{x}(t), t)}{dt}$$

a tedy pro body na charakteristice $\mathcal{C}_{a,i}$ lze rovnici (9) psát ve tvaru

$$\frac{du}{dt} - \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f. \quad (11)$$

Položíme-li $w = (\tilde{x}(t_i), t_i)$ a integrujeme-li rovnici (11) přes interval $[t_i, t_j]$, vznikne identita

$$u(a) - u(w) - \varepsilon \int_{t_i}^{t_j} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\tilde{x}, t) dt = \int_{t_i}^{t_j} f(\tilde{x}, t) dt. \quad (12)$$

V (12) aproximujeme integrál na pravé straně Simpsonovým pravidlem s krokem $h_t/2$ (získanou aproximaci označíme I_f) a položíme

$$\int_{t_i}^{t_j} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\tilde{x}, t) dt \doteq (t_j - t_i) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(w).$$

Vznikne rovnice

$$u(a) - u(w) - \varepsilon(t_j - t_i) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(w) = I_f.$$

Dále se budeme detailně zabývat jen případem, kdy $\tilde{x}(t_i) = x_k$ pro některý index $k \in \{1, \dots, n\}$. Potom $w = (x_k, t_i)$ a označíme $b_0 = (x_{k-1}, t_i)$, $b_1 = w$, $b_2 = (x_{k+1}, t_i)$. Aproximace

$$u(a) \doteq u_a, \quad u(w) \doteq u_{b_1}, \quad \text{a} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(w) \doteq \frac{u_{b_0} - 2u_{b_1} + u_{b_2}}{h_x^2}$$

transformují poslední rovnici na tvar

$$u_a = \mu(b_0 a)u_{b_0} + \mu(b_1 a)u_{b_1} + \mu(b_2 a)u_{b_2} + I_f, \quad (13)$$

$$\text{kde } \mu(b_0 a) = \mu(b_2 a) = \frac{\varepsilon(t_j - t_i)}{h_x^2} \quad \text{a} \quad \mu(b_1 a) = 1 - \frac{2\varepsilon(t_j - t_i)}{h_x^2}.$$

Lze snadno ukázat, že systém rovnic typu (13) má monotonní matici, je-li index i zvolen vždy tak, aby

$$\mu(b_1 a) = 1 - \frac{2\varepsilon(t_j - t_i)}{h_x^2} \geq 0.$$

V práci je požadováno splnění silnější podmínky. Index i je volen tak, aby byl co nejmenší a aby vyhovoval nerovnosti

$$1 - \frac{2\varepsilon(t_j - t_i)}{h_x^2} \geq \frac{1}{3}, \quad \text{ekvivalentní s} \quad \frac{\varepsilon(t_j - t_i)}{h_x^2} \leq \frac{1}{3}. \quad (14)$$

Existence indexu $i < j$ splňujícího (14) je zaručena za předpokladu, že

$$3\varepsilon h_t \leq h_x^2.$$

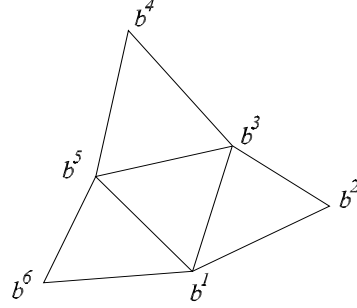
V případě, že $\tilde{x}(t_i) \neq x_k$ pro $k = 1, 2, \dots, n$ a existuje index $k \in \{2, \dots, n\}$ s vlastností $x_{k-1} < \tilde{x}(t_i) < x_k$, položíme $b_l = (x_{k-2+l}, t_i)$ pro $l = 0, 1, 2, 3$. Funkce $u(x, t_i)$ je aproximována kubickým polynomem $P(x)$, který v bodech $x_{k-2}, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}$ nabývá postupně hodnot $u_{b_0}, u_{b_1}, u_{b_2}, u_{b_3}$ a druhá derivace $u_{xx}(w)$ je aproximována hodnotou $P''(\tilde{x}(t_i))$.

Definujeme-li částečné uspořádání na množině V_h předpisem $b \leq a$, jestliže $b = a$ nebo existují c_0, c_1, \dots, c_i tak, že $b = c_0$, $\mu(c_{j-1}, c_j) > 0$ pro $j = 1, \dots, i$ a $c_i = a$, pak platí toto tvrzení:

Věta 3. Jestliže $u \in C^{(4)}(Q)$, kroky diskretizace h_x, h_t splňují podmínku (14) a A je libovolný začátek v uspořádané množině V_h , pak existuje konstanta C nezávislá na h_x, h_t s vlastností

$$\max_{a \in A} |u(a) - u_a| \leq C (h_x^2 + h_t^4).$$

Odhad chyby z Věty 3 je získán jako součet chyb jednotlivých rovnic pomocí sčítací techniky, která byla vyvinuta v [14]. Numerické experimenty



Obrázek 8

naznačují, že tento řád chyby odpovídá realitě a že i modely vrstev jsou s modelovanou realitou v souladu.

5 Rovinný nestacionární případ

Věnujme se nejprve obsahu článků [17] a [18], v nichž je zkoumána aproximace funkcí dvou proměnných polynomy druhého stupně.

Nechť $b^1, b^2, \dots, b^6 \in \mathbb{R}^2$ a $T_1 = \overline{b^1 b^3 b^5}$, $T_2 = \overline{b^1 b^2 b^3}$, $T_3 = \overline{b^3 b^4 b^5}$, $T_4 = \overline{b^5 b^6 b^1}$ jsou trojúhelníky. Řekneme, že body b^1, b^2, \dots, b^6 jsou *regulární uzly*, jestliže

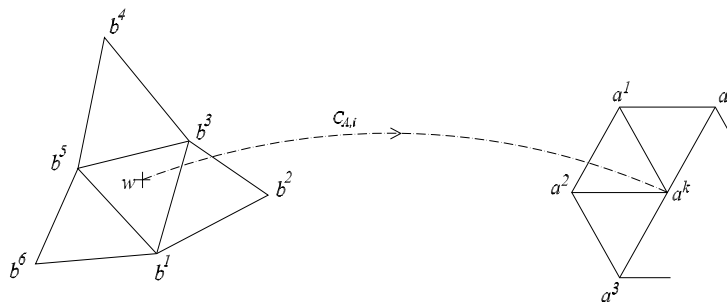
- (i) trojúhelníky T_1, T_i jsou sousední pro $i = 2, 3, 4$ a
- (ii) $\alpha \leq \frac{\pi}{2}$ pro všechny vnitřní úhly trojúhelníků T_1, T_2, T_3, T_4 .

Pro libovolné regulární uzly b^1, b^2, \dots, b^6 – viz ilustraci z obr.8 – označíme symbolem

- h délku největší strany trojúhelníků T_1, T_2, T_3, T_4 ,
- α_0 velikost nejmenšího vnitřního úhlu trojúhelníků T_1, T_2, T_3, T_4 a
- T (uzavřený) konvexní obal množiny $T_1 \cup T_2 \cup T_3 \cup T_4$.

Uspořádaná dvojice $m = (i, j)$ nezáporných celých čísel se nazývá *multiindex* a číslo $|m| = i + j$ se nazývá *řád multiindexu*. Pro libovolnou funkci f proměnné $x = (x_1, x_2)$ se pak značí

$$\frac{\partial^{|m|} f}{\partial x^m} = \frac{\partial^{|m|} f}{\partial x_1^i \partial x_2^j}.$$



Obrázek 9

Hlavní výsledky práce [17] lze shrnout do tohoto tvrzení:

Věta 4. Necht b^1, b^2, \dots, b^6 jsou regulární uzly a $\varphi \in C^{(3)}(T)$. Pak mezi všemi polynomy proměnné $x = (x_1, x_2)$ stupně menšího nebo rovného dvěma existuje jediný interpolant

$$P(x) = L_1(x)\varphi(b^1) + L_2(x)\varphi(b^2) + \dots + L_6(x)\varphi(b^6) \quad (15)$$

funkce φ v uzlech b^1, b^2, \dots, b^6 a ke každému multiindexu m s vlastností $|m| \leq 2$ existuje konstanta C nezávislá na h tak, že pro všechna $x \in T$ platí

$$\left| \frac{\partial^{|m|}\varphi}{\partial x^m}(x) - \frac{\partial^{|m|}P}{\partial x^m}(x) \right| \leq C h^{3-|m|}.$$

Podstatná část Věty 4 je dokázána v [18]. V [17] jsou naznačeny možnosti aplikace tohoto výsledku v různých oblastech numerické analýzy. V tomto textu jsou odhady chyb interpolace z Věty 4 využity pro odvození řádu chyby aproximace řešení úlohy

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \vec{p} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} u - \varepsilon \Delta u &= f & \text{v} & \quad Q = \Omega \times (0, T), \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y) & \text{v} & \quad \Omega, \\ u(x, y, t) &= g(x, y, t) & \text{v} & \quad \partial\Omega \times (0, T] \end{aligned} \quad (16)$$

jistým dále popsaným zobecněním metody z odstavce 3. Předpoklady zaručující existenci, jednoznačnost a dostatečnou hladkost klasického řešení úlohy (16) jsou uvedeny v [1].

Necht triangulace \mathcal{T}_h oblasti Ω má vlastnosti

(v1) každý vrchol triangulace \mathcal{T}_h , který leží na hranici $\partial\Omega_h$, leží i na $\partial\Omega$,

(v2) pro všechny vnitřní úhly α trojúhelníků z \mathcal{T}_h platí $0 < \alpha_0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$.

Nechť $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_r = T$ je ekvidistantní dělení s krokem k . Řekneme, že uspořádaná dvojice $A = (a, t_j)$ je *uzel*, je-li a vrchol triangulace \mathcal{T}_h a $j \in \{0, 1, \dots, r\}$. Uzel A nazveme *vnitřním*, je-li $a = (a_1, a_2)$ vnitřní vrchol triangulace a $j \in \{1, 2, \dots, r\}$. Symbolem V_h označíme množinu všech vnitřních uzlů.

Metoda poskytuje aproximaci u_A hodnoty řešení $u(A)$ pro každý uzel A . Jestliže $A \notin V_h$, je hodnota $u(A)$ zadaná počáteční nebo okrajovou podmínkou z (16) a lze tedy položit

$$u_A = u(A).$$

Nechť nyní $A = (a, t_j) \in V_h$. Za účelem vysvětlení základní myšlenky popíšeme jednu konstrukci rovnice pro aproximaci u_A . Metoda postupně pro $i = j - 1, j - 2, \dots$ řeší počáteční úlohu

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = p_1(\tilde{x}(t), \tilde{y}(t), t) \\ \frac{d\tilde{y}(t)}{dt} = p_2(\tilde{x}(t), \tilde{y}(t), t) \end{cases} \quad \text{v} \quad (t_i, t_j), \quad \begin{cases} \tilde{x}(t_j) = a_1 \\ \tilde{y}(t_j) = a_2 \end{cases} \quad (17)$$

a obě strany rovnice (16) integruje přes křivku

$$\mathcal{C}_{A,i} = \{(\tilde{x}(t), \tilde{y}(t), t) \mid t_i \leq t \leq t_j\}.$$

Označíme-li $w_1 = \tilde{x}(t_i)$, $w_2 = \tilde{y}(t_i)$ a $W = (w, t_i)$, vznikne identita

$$u(A) - u(W) - \varepsilon \int_{t_i}^{t_j} \Delta u dt = \int_{t_i}^{t_j} f dt$$

obdobně jako v jednorozměrném případě. Odtud vhodnou numerickou integrací obdržíme

$$u(A) - u(W) - \varepsilon(t_j - t_i) [\beta \Delta u(A) + (1 - \beta) \Delta u(W)] = I_f. \quad (18)$$

Jsou-li a^1, a^2, \dots, a^k vrcholy triangulace z okolí vrcholu a a b^1, b^2, \dots, b^6 regulární uzly s vlastností $w \in \overline{b^1 b^3 b^5}$ (viz obr.9), pak označíme

$$A_\iota = (a^\iota, t_j) \quad \text{pro} \quad \iota = 1, 2, \dots, k \quad \text{a} \quad B_\iota = (b^\iota, t_i) \quad \text{pro} \quad \iota = 1, 2, \dots, 6.$$

Do rovnice (18) dosadíme za $u(W)$, $\Delta u(W)$ aproximace

$$\begin{aligned} u(W) &\doteq L_1(w)u_{B_1} + L_2(w)u_{B_2} + \dots + L_6(w)u_{B_6}, \\ \Delta u(W) &\doteq \Delta L_1(w)u_{B_1} + \Delta L_2(w)u_{B_2} + \dots + \Delta L_6(w)u_{B_6} \end{aligned}$$

podle Věty 4 a hodnotu $\Delta u(A)$ nahradíme výrazem

$$\Delta u(A) \doteq -\gamma_0 u_A + \sum_{\iota=1}^k \gamma_\iota u_{A_\iota},$$

který vzniká v metodě konečných prvků při aproximaci funkce $u = u(x_1, x_2, t_j)$ funkcí spojitou na Ω_h a lineární na každém trojúhelníku z \mathcal{T}_h . Vzhledem k vlastnosti (v2) platí $\gamma_\iota \geq 0$ pro $\iota = 0, 1, \dots, k$. Vznikne tedy rovnice

$$u_A = \sum_{\iota=1}^k \mu(A_\iota A) u_{A_\iota} + \sum_{\iota=1}^6 \mu(B_\iota A) u_{B_\iota} + \alpha_A, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \text{kde } \mu(A_\iota A) &= \varepsilon(t_j - t_i) \beta \gamma_\iota / d_a, \\ \mu(B_\iota A) &= [L_\iota(w) + \varepsilon(t_j - t_i)(1 - \beta) \Delta L_\iota(w)] / d_a, \\ \alpha_a &= I_f / d_a \quad \text{a} \quad d_a = 1 + \varepsilon(t_j - t_i) \beta \gamma_0. \end{aligned}$$

Metoda buďto najde některý index i , $0 \leq i < j$, tak, že pro vhodnou hodnotu parametru $\beta \in [0, 1]$ platí $\mu(XA) \geq 0$ pro $X = A_1, A_2, \dots, A_k, B_1, B_2, \dots, B_6$ nebo sestaví rovnici pro u_A podle některého náhradního schématu.

Přestože úplná teoretická analýza této metody není dosud provedena, stručné úvahy z práce [19] vedou k předběžnému závěru, že existuje konstanta $C > 0$ s vlastností $|u(A) - u_A| \leq C(h^2 + \varepsilon h)$ pro všechny vnitřní uzly A . Numerické experimenty naznačují, že

- tento odhad odpovídá realitě a
- metoda poskytuje aproximace vrstev, které jsou v souladu s modelovanou realitou do míry, kterou připouští použitý krok diskretizace.

Algoritmy metod, jejichž základní myšlenky byly v této kapitole stručně popsány, jsou implementovány v jednom společném programovém systému. Jednotlivé programy vznikaly při řešení odpovídajících úloh. Programový systém byl jedním z výsledků grantu "Numerické modelování difúzních procesů v extrémních podmínkách" GA ČR z let 1995, 1996.

Použitá literatura

- [1] Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Uraltseva N.N.: Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type, Kap.IV, Věta 5.2 (rusky). Nauka, Moskva, 1967.
- [2] Ladyzhenskaya O.A., Uraltseva N.N.: Linear and Quasilinear Equations of Elliptic Type, Kap.III (rusky). Nauka, Moskva, 1973.
- [3] Morton K.W.: Numerical Solution of the Convection-Diffusion Problems. Chapman & Hall, 1996.
- [4] Roos H.-G., Stynes M., Tobiska L.: Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations (Convection-Diffusion and Flow Problems). Springer, 1996.
- [5] Bramble J.H., Hubbard B. E.: New monotone type approximations for elliptic problems. Math. Comp. 18(1964), 349–367.
- [6] Vishik M.I., Ljusternik L.A.: Regular degeneration and boundary layer for linear differential equations with a small parameter (v ruštině). Usp. Math. Nauk 12 (1957), 3–122.
- [7] Schlichting H.: A Boundary Layer Theory (rusky). Nauka, Moskva, 1969.
- [8] Dalík J., Kopeček I.: Podmínky pro algoritmické řešení lineárních diferenciálních problémů Galerkinovou metodou. Zborník prednášok 7. sympózia o algoritmoch ALGORITMY'83, Štrbské Pleso, 63–65.
- [9] Dalík J.: Petrov–Galerkinova metoda pro řešení okrajových úloh s převažující konvekcí. Sborník konf. Matematické metody v technických vědách, Karlovy Vary, 1986, 25–30.
- [10] Dalík J.: Numerické řešení rovinné úlohy konvekce–difúze s převažující konvekcí metodou L–diskretizace. Sborník symp. Num. met. ve fyzikální metalurgii, 1988, 34–37.

- [11] Dalík J.: Modifikace Galerkinovy metody pro řešení úlohy konvekce–difúze s převažující konvekcí. Sborník X. věd. konf. Stavební fakulty VUT Brno, Sekce 1, 1989, 32–37.
- [12] Dalík J.: A Petrov–Galerkin approximation of convection–diffusion and reaction–diffusion problems. *Appl. Math.* Vol. 36, 1991, 329–354.
- [13] Dalík J.: Apriorní odhad chyby řešení jisté okrajové úlohy pro ODR Petrov–Galerkinovou metodou. *Kniž. odb. a věd. spisů VUT Sv. A–35*, 1993, 19–28.
- [14] Dalík J.: A finite difference method for a two–dimensional convection–diffusion problem with dominating convection. *Sb. věd. a odb. prací FAST VUT Brno*, č.1, 1995, 5–44.
- [15] Dalík J.: An equivalence of two numerical methods for a two–dimensional convection–diffusion problem with dominating convection. *Sb. věd. a odb. prací FAST VUT Brno*, č.1, 1995, 45–59.
- [16] Dalík J., Růžičková H.: An explicit modified method of characteristics for the one-dimensional nonstationary convection-diffusion problem with dominating convection. *Appl. Math.* Vol. 40, 1995, 367–380.
- [17] Dalík J.: Quadratic interpolation polynomials in vertices of strongly regular triangulations. In *Finite element methods, superconvergence, post–processing and a posteriori estimates*, Ed. Křížek, Neittaanmäki, Stenberg, M. Dekker 1998, 85–94.
- [18] Dalík J.: Stability of quadratic interpolation polynomials in vertices of triangles without obtuse angles. *Arch. Math. Brno*, Tomus 35, 1999, 285–297.
- [19] Dalík J.: A modified method of characteristics for the two–dimensional convection–diffusion problem with dominating convection. *Proceedings of the Prague Math. Conf.*, Praha, 1996, 71–76.

Abstract

Numerical solutions of the convection-diffusion and reaction-diffusion problems

Motivation and explanation of the results obtained by the author during his investigation of the numerical methods for convection-diffusion and reaction-diffusion problems are presented.

Basic ideas of new numerical methods for one- and two-dimensional stationary and non-stationary problems of the above-mentioned types are described consecutively. Basic properties of these methods including stability and the amount of artificial diffusion are discussed and local apriori error estimates are formulated.