

Bài báo nghiên cứu

PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN KHÔNG – THỜI GIAN GIẢI XẤP XỈ PHƯƠNG TRÌNH PHẢN ỨNG KHUẾCH TÁN

Phạm Phi Hùng, Mai Thị Tuyết Nhung, Tạ Thị Thanh Mai*

Trường Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

**Tác giả liên hệ: Tạ Thị Thanh Mai – Email: mai.tathithanh@hust.edu.vn*

Ngày nhận bài: 01-5-2025; Ngày nhận bài sửa: 13-5-2025; Ngày duyệt đăng: 16-6-2025

TÓM TẮT

Trong bài báo này chúng tôi trình bày phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian (space-time finite element method) giải xấp xỉ phương trình phản ứng khuếch tán. Khác với các phương pháp số truyền thống phân tách xấp xỉ miền thời gian và không gian riêng biệt, phương pháp này rời rạc đồng thời miền $Q = \Omega \times (0, T)$ trên cùng một cấu trúc lưới, giúp tối ưu chi phí tính toán và nâng cao độ chính xác của nghiệm xấp xỉ. Cách tiếp cận của phương pháp là đưa bài toán ban đầu về dạng biến phân (bài toán yếu). Tính đặt chỉnh của bài toán yếu được chứng minh thông qua việc áp dụng định lý Banach–Nečas–Babuška, đảm bảo sự tồn tại, duy nhất nghiệm. Phân tích đánh giá sai số tiên nghiệm (a priori error estimates) cho thấy phương pháp đạt tốc độ hội tụ tối ưu trong không gian tương ứng. Tính hiệu quả và độ chính xác của phương pháp được kiểm chứng qua các thí nghiệm số được xây dựng trên phần mềm mã nguồn mở FreeFEM++.

Từ khóa: đánh giá sai số tiên nghiệm; FreeFEM++; phương trình phản ứng khuếch tán; Phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian

1. Giới thiệu

Việc nghiên cứu các quá trình tự nhiên thường dẫn đến mô hình toán học bằng các phương trình đạo hàm riêng. Đặc biệt các quá trình truyền nhiệt, khuếch tán hoặc lan truyền trong các môi trường vật chất thường được mô tả bởi phương trình phản ứng khuếch tán hay phương trình parabolic tổng quát.

Cho $\Omega \in \mathbb{R}^d$ (với $d = 1, 2, 3$) là một miền bị chặn có biên $\Gamma := \partial\Omega$ Lipschitz. Trong nghiên cứu này chúng tôi xét bài toán parabolic tuyến tính sau:

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) - \operatorname{div}[D(x, t) \nabla_x u(x, t)] + R(x, t)u(x, t) &= f(x, t), (x, t) \in Q := \Omega \times (0, T), \\ u(x, t) &= 0, (x, t) \in \Sigma := \Gamma \times (0, T), \\ u(x, 0) &= 0, x \in \Omega, \end{aligned} \quad (1)$$

trong đó ma trận hệ số khuếch tán $D(x, t)$ là ma trận đối xứng và xác định dương trên miền Q , hệ số phản ứng $R(x, t)$ dương và hằng số $T > 0$ là thời điểm kết thúc. Việc phát triển

Cite this article as: Pham, P. H., Mai, T. T. N., & Ta, T. T. M. (2025). Space-time finite element method for solving reaction-diffusion equations. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 22(10), 1874-1886. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.22.10.4940\(2025\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.22.10.4940(2025))

các phương pháp số hiệu quả để giải quyết các bài toán parabolic nói chung hay lớp phương trình phản ứng khuếch tán nói riêng là một chủ đề nghiên cứu quan trọng trong phân tích số và tính toán khoa học. Các phương pháp số truyền thống để giải bài toán này thường dựa trên kỹ thuật time-stepping, tức là thực hiện rời rạc không gian và thời gian riêng biệt. Cách tiếp cận này thường kết hợp một lược đồ xấp xỉ ẩn hoặc hiện theo thời gian với một phương pháp rời rạc theo không gian như phương pháp sai phân hữu hạn (Larsson & Thomée, 2003). Các phương pháp này tạo ra một chuỗi bài toán dừng được giải tuần tự theo từng bước thời gian, dẫn đến nhiều hạn chế. Thứ nhất, cấu trúc tích tensor của không gian và thời gian đòi hỏi các bước thời gian nhỏ để đảm bảo ổn định, làm tăng đáng kể chi phí tính toán, đặc biệt trong các bài toán có miền tính toán phức tạp. Thứ hai, việc giải tuần tự các hệ tuyến tính cản trở triển khai hiệu quả các thuật toán song song. Thứ ba, các kỹ thuật tinh chỉnh lưới thích nghi thực hiện riêng lẻ cho từng bước thời gian, gây khó khăn trong việc tối ưu hóa đồng thời cả hai biến (Brenner & Scott, 1994; Lang, 2001; Thomée, 2006).

Trong thập niên gần đây, một cách tiếp cận đầy triển vọng là phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian (space-time finite element method) giải xấp xỉ các phương trình đạo hàm riêng phụ thuộc vào thời gian (Steinbach, 2015; Ta et al., 2025). Phương pháp này sử dụng lưới xấp xỉ trong miền không-thời gian $Q = \Omega \times (0, T)$, cho phép thích ứng và phân hoạch hiệu quả hơn, từ đó giúp giảm chi phí tính toán và tăng độ chính xác. Ý tưởng quan trọng nhất của phương pháp này là đưa việc giải phương trình đạo hàm riêng parabolic thành dạng phương trình elliptic tương đương, thông qua việc thống nhất xử lý biến thời gian như một chiều bổ sung trong không gian. Bài báo này giới thiệu phương pháp không - thời gian của Steinbach (Steinbach, 2015) với sự mở rộng thành phần phản ứng cho phương trình parabolic tổng quát và điều kiện biên Dirichlet.

Cấu trúc của bài báo này được tổ chức như sau: phần 2 trình bày đối tượng và phương pháp nghiên cứu trong đó: phần 2.1 chi tiết về công thức biến phân của bài toán, làm cơ sở cho các phân tích tiếp theo, phần 2.2 trình bày về tính đặt chỉnh của bài toán biến phân và phần 2.3 trình bày bài toán rời rạc, phần 2.4 đánh giá sai số tiên nghiệm (a priori error estimates) cho phương pháp xấp xỉ không - thời gian đã đề xuất. Để minh chứng tính hiệu quả của phương pháp và xác thực các đánh giá lý thuyết, phần 3 trình bày các kết quả thử nghiệm số, qua đó làm rõ tính khả thi của thuật toán cũng như độ chính xác của các đánh giá sai số. Phần 4 là một số kết luận về phương pháp phần tử hữu hạn không - thời gian và các hướng nghiên cứu có thể phát triển.

2. Đối tượng và phương pháp nghiên cứu

2.1. Bài toán biến phân

Phần này trình bày việc xây dựng công thức biến phân cho bài toán đã được phát biểu trong phần 1. Để xây dựng dạng yếu tương đương cho bài toán phản ứng khuếch tán, chúng tôi giới thiệu các không gian hàm cần thiết. Trước tiên, kí hiệu $L^2(\Omega)$ là không gian các hàm bình phương khả tích, ta nhắc lại một số không gian sau:

- $H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid \partial_i u \in L^2(\Omega), 1 \leq i \leq d\}$ với chuẩn

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} u^2 dx + \int_{\Omega} (\nabla u)^2 dx.$$

• $H_0^1(\Omega) = \overline{D(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}}$ bao đóng của $D(\Omega)$ theo chuẩn $H^1(\Omega)$ với $D(\Omega)$ là của không gian các hàm khả vi vô hạn có giá đỡ compact trong Ω .

• $H^{-1}(\Omega) = (H_0^1(\Omega))'$: không gian đối ngẫu của $H_0^1(\Omega)$ với chuẩn tương ứng

$$\|f\|_{H^{-1}(\Omega)} = \sup_{u \in H_0^1(\Omega)} \frac{\langle f, u \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)}}{\|u\|_{H_0^1(\Omega)}}.$$

• $L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) = \{u \mid u(t) \in H_0^1(\Omega) \forall t \in (0, T), \int_0^T \|u(t)\|_{H_0^1(\Omega)}^2 dx < \infty\}$ với chuẩn tương ứng

$$\|u\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))} = \left(\int_0^T \|u(t)\|_{H_0^1(\Omega)}^2 dx \right)^{1/2}.$$

• $H^1(0, T; H^{-1}(\Omega)) = \{u \mid \partial_t u \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))\}.$

Ta định nghĩa:

$$X := L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^{-1}(\Omega)),$$

$$X_0 := \{v \in X \mid v = 0 \text{ trên } \Sigma_0\},$$

$$Y := L^2(0, T; H_0^1(\Omega)),$$

$$Y' := L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)).$$

trong đó, $\Sigma_0 = \Gamma \times \{0\}$, tức là X_0 gồm các hàm trong X thỏa mãn điều kiện $v(x, 0) = 0$.

Cho trước $f \in Y'$, bằng việc nhân hai vế của phương trình (1) với hàm thử v ta được bài toán yếu phát biểu như sau: Tìm $u \in X_0$ sao cho:

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle_Q, \quad \forall v \in Y, \quad (2)$$

trong đó dạng song tuyến tính $a: X_0 \times Y \rightarrow R$ được định nghĩa bởi:

$$a(u, v) := \int_Q [\partial_t uv + (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x v + R(x, t) uv] dx dt, \quad \forall (u, v) \in X_0 \times Y, \quad (3)$$

và phiếm hàm tuyến tính $\langle f, \cdot \rangle_Q: Y \rightarrow R$ được định nghĩa bởi:

$$\langle f, \cdot \rangle_Q := \int_Q f v dx dt, \quad \forall v \in Y. \quad (4)$$

Các chuẩn tương ứng với các không gian X_0, Y và Y' được định nghĩa như sau:

$$\|v\|_Y := \sqrt{\int_Q (D(x, t) \nabla_x u(x, t) \cdot \nabla_x u(x, t) + R(x, t) u^2(x, t))}, \quad (5)$$

$$\|\partial_t u\|_{Y'} := \|u\|_Y, \quad (6)$$

$$\|u\|_{X_0} := (\|\partial_t u\|_{Y'}^2 + \|u\|_Y^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

Giả sử $w_u \in Y$ là nghiệm duy nhất của bài toán biên phân:

$$\int_Q (D(x, t) \nabla_x w_u) \cdot \nabla_x v + R(x, t) uv dx dt = \langle \partial_t u, v \rangle_Q, \quad \forall v \in Y. \quad (8)$$

Khi đó

$$\|u\|_{X_0} = (\|w_u\|_Y^2 + \|u\|_Y^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (9)$$

Biểu diễn dạng yếu (2) cho phép áp dụng định lý Banach–Nečas–Babuška (Ern & Guermond, 2004, 2021a, 2021b) để thiết lập tính đặt chính của bài toán. Trong phần tiếp theo ta sẽ chứng minh các điều kiện của tính đặt chính này.

2.2. Tính đặt chính của bài toán yếu

Để chứng minh tính đặt chính của dạng biến phân ta cần xác minh thỏa mãn đồng thời ba điều kiện cần và đủ:

1. Tính liên tục: tồn tại hằng số $\beta_1 > 0$ sao cho

$$|a(u, v)| \leq \beta_1 \|u\|_{X_0} \|v\|_Y, \quad \forall (u, v) \in X_0 \times Y. \quad (10)$$

2. Điều kiện inf-sup: tồn tại hằng số $\beta_2 > 0$ sao cho

$$\inf_{0 \neq u \in X_0} \sup_{0 \neq v \in Y} \frac{a(u, v)}{\|u\|_{X_0} \|v\|_Y} \geq \beta_2. \quad (11)$$

3. Điều kiện đơn ánh: nếu với mọi $u \in X_0$, ta có $a(u, v) = 0$ thì suy ra $v = 0$. (12)

Tính liên tục. Trước khi chứng minh điều kiện liên tục (10), chúng ta nhắc lại định nghĩa của dạng song tuyến tính $a(\cdot, \cdot)$:

$$a(u, v) := \int_Q [\partial_t uv + (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x v + R(x, t) uv] dx dt, \quad \forall (u, v) \in X_0 \times Y.$$

Ta có đánh giá

$$|a(u, v)| < \left| \int_Q \partial_t uv dx dt \right| + \left| \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x v + R(x, t) uv dx dt \right|.$$

Đối với hạng tử thứ nhất áp dụng tính chất của cặp đôi ngẫu $\partial_t u \in Y^* = L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ và $v \in Y = L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ ta có đánh giá

$$\left| \int_Q \partial_t uv dx dt \right| = |\langle \partial_t u, v \rangle_Q| \leq \|\partial_t u\|_{Y'} \|v\|_Y.$$

Đối với hạng tử thứ hai, áp dụng bất đẳng thức Cauchy–Schwarz

$$\left| \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x v + R(x, t) uv dx dt \right| \leq \|u\|_Y \|v\|_Y.$$

Kết hợp hai ước lượng trên, ta thu được

$$|a(u, v)| < \|\partial_t u\|_{Y'} \|v\|_Y + \|u\|_Y \|v\|_Y = (\|\partial_t u\|_{Y'} + \|u\|_Y) \|v\|_Y.$$

Vì $\|u\|_{X_0} = (\|\partial_t u\|_{Y'}^2 + \|u\|_Y^2)^{\frac{1}{2}}$, nên ta có

$$\|\partial_t u\|_{Y'} + \|u\|_Y \leq \sqrt{2} \sqrt{\|\partial_t u\|_{Y'}^2 + \|u\|_Y^2} = \sqrt{2} \|u\|_{X_0}.$$

Do đó

$$|a(u, v)| \leq \sqrt{2} \|u\|_{X_0} \|v\|_Y.$$

Suy ra điều kiện liên tục (10) được thỏa mãn với hằng số $\beta_1 = \sqrt{2}$.

Điều kiện inf-sup. Điều kiện inf-sup (11) tương đương với việc chỉ ra rằng với mọi $u \in X_0$, tồn tại hằng số dương β_2 sao cho

$$\beta_2 \|u\|_{X_0} \leq \sup \frac{a(u, v)}{\|v\|_Y}. \quad (13)$$

Thật vậy, với $u \in X_0$ ta chọn $v = u + w_u \in Y$. Khi đó

$$a(u, u) = \int_Q \partial_t u u \, dxdt + \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x u + R(x, t) u^2 \, dxdt.$$

Sử dụng phép tích phân từng phần theo thời gian và điều kiện ban đầu $u(x, 0) = 0$ ta được

$$\begin{aligned} a(u, u) &= \int_{\Omega} \int_0^T \partial_t u u \, dxdt + \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x u + R(x, t) u^2 \, dxdt \\ &= \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2} u(x, T)^2 - \frac{1}{2} u(x, 0)^2 \right] dx + \|u\|_Y^2 \\ &= \frac{1}{2} \|u(\cdot, T)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u\|_Y^2 \geq \|u\|_Y^2. \end{aligned}$$

Sử dụng tính chất đối ngẫu và bất đẳng thức Cauchy–Schwarz, ta ước lượng

$$\begin{aligned} a(u, w_u) &= \int_Q \partial_t u w_u \, dxdt + \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x w_u + R(x, t) u w_u \, dxdt \\ &= \int_Q (D(x, t) \nabla_x w_u) \cdot \nabla_x w_u + R(x, t) w_u w_u \, dxdt \\ &\quad + \int_Q (D(x, t) \nabla_x u) \cdot \nabla_x w_u + R(x, t) u w_u \, dxdt \\ &\geq \|w_u\|_Y^2 - \|u\|_Y \|w_u\|_Y \\ &\geq \|\partial_t u\|_{Y'}^2 - \frac{1}{2} (\|u\|_Y^2 + \|w_u\|_Y^2) \\ &= \frac{1}{2} \|\partial_t u\|_{Y'}^2 - \frac{1}{2} \|u\|_Y^2. \end{aligned}$$

Kết hợp hai ước lượng trên ta được

$$a(u, u + w_u) \geq \frac{1}{2} (\|\partial_t u\|_{Y'}^2 + \|u\|_Y^2) = \frac{1}{2} \|u\|_{X_0}^2.$$

Từ định nghĩa và tính chất của các chuẩn tương ứng:

$$\begin{aligned} \|u + w_u\|_Y^2 &\leq 2(\|u\|_Y^2 + \|w_u\|_Y^2) \\ &= 2(\|u\|_Y^2 + \|\partial_t u\|_{Y'}^2) \\ &= 2\|u\|_{X_0}^2. \end{aligned}$$

Ta có đánh giá

$$a(u, u + w_u) \geq \frac{1}{2\sqrt{2}} \|u\|_{X_0} \|u + w_u\|_Y.$$

Vì $v = u + w_u$ nên

$$\sup \frac{a(u, v)}{\|v\|_Y} \geq \frac{a(u, u + w_u)}{\|u + w_u\|_Y} \geq \frac{1}{2\sqrt{2}} \|u\|_{X_0}.$$

Do đó điều kiện ổn định (13) thỏa mãn với hằng số $\beta_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}}$.

Điều kiện đơn ánh. Để kiểm chứng điều kiện đơn ánh (12) ta cần chỉ ra rằng

$$\forall v \in Y \setminus \{0\}, \exists u \in X_0: a(u, v) \neq 0.$$

Thật vậy, với mọi $v \in Y \setminus \{0\}$ chọn

$$u(x, t) = \int_0^t v(x, s) ds, \quad (x, t) \in Q.$$

Theo định nghĩa ta có $u \in X_0$ và

$$a(u, v) = \|v\|_{L^2(Q)}^2 + \frac{1}{2} \|\nabla_x u(T)\|_{L^2(Q)}^2.$$

Do $v \neq 0$ nên $\|v\|_{L^2(Q)}^2 > 0$, ta có $a(u, v) > 0$, tức là $a(u, v) \neq 0$. Vậy điều kiện đơn ánh (12) được thỏa mãn.

Vì điều kiện ban đầu trong (1) được xem như một điều kiện Dirichlet trong miền không gian-thời gian $Q = \Omega \times (0, T)$, chúng ta xem xét phép tách $u(x, t) = \bar{u}(x, t) + \bar{u}_0(x, t)$ với $(x, t) \in Q$, trong đó $\bar{u}_0 \in X$ là một mở rộng của dữ liệu ban đầu đã cho $\bar{u}_0 \in H_0^1(\Omega)$. Khi đó bài toán ban đầu đưa về tìm $\bar{u} \in X_0$ sao cho

$$a(\bar{u}, v) = \langle f, v \rangle_Q - a(\bar{u}_0, v). \quad (14)$$

Phần tiếp theo ta sẽ trình bày xấp xỉ không – thời gian của bài toán (14).

2.3. Phương pháp phần tử hữu hạn không thời gian

Giả sử $X_h \subset X, Y_h \subset Y$ là các không gian hàm xấp xỉ và $X_h \subset Y_h$ (do $X \subset Y$). Ta có xấp xỉ Galerkin–Petrov của bài toán biến phân (14) là tìm $\bar{u}_h \in X_h$ sao cho

$$a(\bar{u}_h, v_h) = \langle f, v_h \rangle - a(\bar{u}_0, v_h) \quad \forall v_h \in Y_h. \quad (15)$$

Ta sẽ chứng minh tính đặt chỉnh của bài toán (15).

Cho trước $\varphi \in Y'$, tồn tại duy nhất $w \in Y$ là nghiệm của bài toán biến phân

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla_x w(x, t)] \nabla_x v(x, t) + R(x, t) w(x, t) v(x, t) dx dt \\ = \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(x, t) v(x, t) dx dt, \end{aligned}$$

với mọi $v \in Y$.

Xét ánh xạ

$$\Pi: Y' \rightarrow Y = L^2(0, T; H_0^1(\Omega)),$$

$$\varphi \mapsto \Pi\varphi := w.$$

Ta có xấp xỉ Galerkin của bài toán biến phân trên là tìm $w_h \in Y_h$ sao cho

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla_x w_h(x, t)] \nabla_x v_h(x, t) + R(x, t) w_h(x, t) v_h(x, t) dx dt \\ = \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(x, t) v_h(x, t) dx dt. \end{aligned} \quad (16)$$

Ta định nghĩa ánh xạ:

$$\Pi_h: Y' \rightarrow Y_h \subset L^2(0, T; H_0^1(\Omega)),$$

$$\varphi \mapsto \Pi_h \varphi := w_h$$

Khi đó

$$\begin{aligned}\|w_h\|_Y^2 &= \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla_x w_h(x, t)] \nabla_x w_h(x, t) + R(x, t) w_h(x, t) w_h(x, t) dx dt \\ &= \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(x, t) w_h(x, t) dx dt \\ &= \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla_x w(x, t)] \nabla_x w_h(x, t) + R(x, t) w(x, t) w_h(x, t) dx dt \\ &\leq \|w\|_Y \|w_h\|_Y.\end{aligned}$$

Do đó

$$\|w_h\|_Y^2 \leq \|w\|_Y^2,$$

tức là

$$\|\Pi_h \varphi\|_Y \leq \|\Pi \varphi\|_Y, \quad \forall \varphi \in Y.$$

Xét chuẩn phụ thuộc vào lưới

$$\|u\|_{X_h}^2 = \|\Pi_h \partial_t u\|_Y^2 + \|u\|_Y^2.$$

Ta có đánh giá giữa các chuẩn tương ứng

$$\|u\|_{X_h} \leq \|u\|_X \quad \forall u \in X.$$

Tiếp theo ta sẽ chứng minh tính ổn định của bài toán rời rạc (15).

Định lý 1. Giả sử $X_h \subset X, Y_h \subset Y$ và $X_h \subset Y_h$, khi đó tồn tại $c > 0$ sao cho

$$\inf_{u_h \in X_h} \sup_{0 \neq v_h \in Y_h} \frac{a(u_h, v_h)}{\|u_h\|_{X_h} \|v_h\|_{Y_h}} \geq c. \quad (17)$$

Chứng minh. Với $u_h \in X_h \subset X$ chúng ta định nghĩa $\Pi_h \partial_t u_h := w_h \in Y_h$ là nghiệm duy nhất của bài toán xấp xỉ Galerkin (16), tức là

$$\begin{aligned}\int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla w_h(x, t)] \cdot \nabla v_h(x, t) + R(x, t) w_h(x, t) v_h(x, t) dx dt \\ = \int_0^T \int_{\Omega} \partial_t u_h(x, t) v_h(x, t) dx dt, \quad \forall v_h \in Y_h.\end{aligned}$$

Do $X_h \subset Y_h$ ta có $u_h + w_h \in Y_h$ thỏa mãn

$$\|u_h + w_h\|_Y^2 \leq 2(\|u_h\|_Y^2 + \|w_h\|_Y^2) = 2\|u_h\|_{X_h}^2.$$

Hơn nữa, vì $u_h(0) = 0$ nên

$$\begin{aligned}a(u_h, u_h) &= \int_0^T \int_{\Omega} \partial_t u_h(x, t) u_h(x, t) dx dt \\ &\quad + \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla u_h(x, t)] \cdot \nabla u_h(x, t) \\ &\quad + R(x, t) u_h(x, t) u_h(x, t) dx dt = \frac{1}{2} \|u_h(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u_h\|_Y^2 \\ &\geq \|u_h\|_Y^2.\end{aligned}$$

Tương tự, ta có:

$$\begin{aligned}
 a(u_h, w_h) &= \int_0^T \int_{\Omega} \partial_t u_h(x, t) w_h(x, t) dx dt \\
 &\quad + \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla u_h(x, t)] \cdot \nabla w_h(x, t) \\
 &\quad + R(x, t) u_h(x, t) w_h(x, t) dx dt \\
 &= \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla w_h(x, t)] \cdot \nabla w_h(x, t) + R(x, t) w_h(x, t) w_h(x, t) dx dt \\
 &\quad + \int_0^T \int_{\Omega} [D(x, t) \nabla u_h(x, t)] \cdot \nabla w_h(x, t) + R(x, t) u_h(x, t) w_h(x, t) dx dt \\
 &\geq \|w_h\|_Y^2 - \|u_h\|_Y \|w_h\|_Y \\
 &\geq \|w_h\|_Y^2 - \frac{1}{2} (\|u_h\|_Y^2 + \|w_h\|_Y^2) = \frac{1}{2} \|w_h\|_Y^2 - \frac{1}{2} \|u_h\|_Y^2.
 \end{aligned}$$

Do đó

$$\begin{aligned}
 a(u_h, u_h + w_h) &\geq \frac{1}{2} (\|u_h\|_Y^2 + \|w_h\|_Y^2) = \frac{1}{2} \|u_h\|_{X_h}^2 \\
 &\geq \frac{1}{2\sqrt{2}} \|u_h + w_h\|_Y^2.
 \end{aligned}$$

điều này dẫn đến điều kiện ổn định rời rạc (17).

Điều kiện ổn định rời rạc (17) đảm bảo khả năng tồn tại duy nhất nghiệm của bài toán biến phân Galerkin-Petrov (15). Hơn nữa, ta có

$$a(\bar{u} - \bar{u}_h, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in Y_h. \quad (18)$$

2.4. Đánh giá sai số

Định lý 1. Giả sử $u \in X$ và $u_h \in X_h$ là các nghiệm duy nhất của các công thức biến phân (14) và (15) tương ứng. Khi đó, tồn tại ước lượng sai số tiên nghiệm

$$\|u - u_h\|_{X_h} \leq 5 \inf_{z_h \in X_h} \|u - z_h\|_X.$$

Chứng minh. Từ điều kiện ổn định (17) và tính chất trực giao Galerkin (18) ta có với mọi $z_h \in X_h$,

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2\sqrt{2}} \|u_h - z_h\|_{X_h} &\leq \sup_{0 \neq v_h \in Y_h} \left(\frac{a(u_h - z_h, v_h)}{\|v_h\|_Y} \right) \\
 &= \sup_{0 \neq v_h \in Y_h} \frac{a(u_h - u, v_h) + a(u - z_h, v_h)}{\|v_h\|_Y} \\
 &= \sup_{0 \neq v_h \in Y_h} \frac{a(u - z_h, v_h)}{\|v_h\|_Y} \leq \sqrt{2} \|u - z_h\|_X.
 \end{aligned}$$

Từ đó ta có đánh giá sai số trong Định lý 1.

Giả sử Q_h là tập hợp các miền chính quy (lưới tam giác với $n=1$, tứ diện với $n=2$) và được sắp xếp theo quy ước bước lưới giảm dần. Ta xét $S_h^1(\Omega) = \text{span} \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N\}$, trong đó $\varphi_k (k = 1, 2, \dots, N)$ là tập hàm tuyến tính liên tục từng khúc (từng mảnh). Ta định nghĩa các không gian phần tử hữu hạn:

$$X_h = S_h^1(Q_h) \cap X, Y_h = S_h^1(Q_h) \cap Y.$$

Khi đó $X_h \subset Y_h$ và ta có đánh giá sai số tiên nghiệm qua định lý dưới đây.

Định lý 2. Giả sử $\bar{u} \in X$ và $\bar{u}_h \in X_h = S_h^1(Q_h) \cap X$ là nghiệm duy nhất của bài toán biên phân (14) và (15). Nếu $\bar{u} \in H^2(Q)$ thì ta có đánh giá

$$\|\bar{u} - P_h \bar{u}\|_Y \leq ch \|\bar{u}\|_{H^2(Q)}.$$

Chứng minh. Theo định nghĩa chuẩn và sử dụng (17), ta có:

$$\|\bar{u} - P_h \bar{u}\|_Y \leq \|\bar{u} - \bar{u}_h\|_{X_h} \leq 5 \inf_{z_h \in X_h} \|\bar{u} - z_h\|_{H^2(Q)}.$$

Xét $z_h = P_h \bar{u}$ là nghiệm của bài toán biên phân

$$a(P_h \bar{u}, v_h) = a(\bar{u}, v_h) \quad \forall v_h \in X_h.$$

Xét chuẩn:

$$\begin{aligned} \|v\|_{H^1(Q)} &= \int_0^T \int_Q (\partial_t u_h(x, t))^2 dx dt \\ &\quad + \int_0^T \int_Q [D(x, t) \nabla v(x, t)] \cdot \nabla v(x, t) + R(x, t) v(x, t) v(x, t) dx dt. \end{aligned}$$

Áp dụng Mệnh đề 1.134 trong (Ern & Guermond, 2004), ta có:

$$\|\bar{u} - P_h \bar{u}\|_Y \leq \|\bar{u} - P_h \bar{u}\|_{H^1(Q)} \leq ch \|\bar{u}\|_{H^2(Q)}.$$

Hơn nữa,

$$\begin{aligned} \|\partial_t(\bar{u} - P_h \bar{u})\|_{Y^*} &= \sup_{0 \neq v \in Y} \frac{\langle \partial_t(\bar{u} - P_h \bar{u}), v \rangle_Q}{\|v\|_Y} \\ &\leq \sup_{0 \neq v \in Y} \frac{\|\partial_t(\bar{u} - P_h \bar{u})\|_{L^2(Q)} \|v\|_{L^2(Q)}}{\|v\|_Y} \\ &\leq \|\partial_t(\bar{u} - P_h \bar{u})\|_{L^2(Q)} \leq \|\bar{u} - P_h \bar{u}\|_{H^1(Q)} \leq ch \|\bar{u}\|_{H^2(Q)}. \end{aligned}$$

Nhận xét 1. Thay vì sử dụng không gian phần tử hữu hạn không-thời gian $X_h \subset Y_h$ được tạo bởi các hàm cơ sở tuyến tính từng khúc (mảnh) φ_k , người ta có thể sử dụng các hàm cơ sở liên tục với đa thức bậc $p > 1$ tại từng miền con để xây dựng không gian phần tử hữu hạn $X_h \subset Y_h$. Khi đó, giả sử $\bar{u} \in H^s(Q)$ với $s \in [1, p + 1]$, ta thu được ước lượng sai số

$$\|\bar{u} - \bar{u}_h\| \leq ch^{s-1} |\bar{u}|_{H^s(Q)}, s \in [1, p + 1]. \quad (19)$$

Trong phần ví dụ số trình bày ở các mục sau, chúng tôi sẽ khảo sát hiệu quả xấp xỉ của phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian khi sử dụng các hàm cơ sở liên tục có bậc đa thức $p = 2$. Việc lựa chọn bậc p này nhằm kiểm chứng tính chính xác và tốc độ hội tụ lý thuyết đã được chỉ ra trong ước lượng (19).

3. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày một số ví dụ số nhằm minh họa cho hiệu quả của phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian đã được phát triển ở các phần trước. Tất cả các ví dụ đều được thực hiện trong trường hợp ma trận khuếch tán D là ma trận đơn vị, và việc rời rạc hoá được thực hiện bằng phần mềm FreeFEM++ <https://freefem.org>. Miền không-thời gian Q được chia lưới với các mức độ tinh chỉnh khác nhau, trong đó N là số

bước lưới đều trên mỗi chiều. Các ví dụ bắt đầu với $N = 4$ (tức lưới 4×4 trong mỗi chiều) và tăng dần.

3.1. Ví dụ 1

Trước tiên, chúng tôi xét một ví dụ có nghiệm giải tích trong không gian hai chiều (một chiều không gian và một chiều thời gian). Mục tiêu của ví dụ này là kiểm chứng bậc hội tụ của phương pháp. Nghiệm chính xác được chọn là

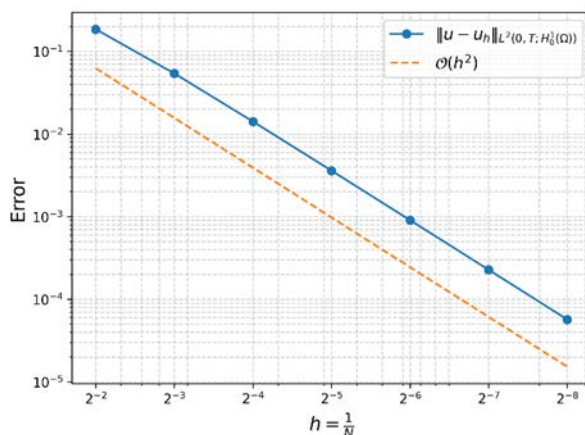
$$u(x, t) = \sin(\pi x) \cos(\pi t)$$

trên miền không gian $\Omega = (0,1)$ và miền không-thời gian là $Q = \Omega \times (0, T)$ với $T = 1$. Điều kiện ban đầu tại $t = 0$ là $u(x, 0) = -\sin(\pi x)$, và điều kiện biên Dirichlet thuần nhất $u = 0$ được áp dụng trên biên không gian $\partial\Omega = 0,1$. Trong Bảng 1, chúng tôi trình bày sai số $\|u - u_h\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$ cùng với bậc hội tụ (EOC) khi thay đổi bước lưới không gian h .

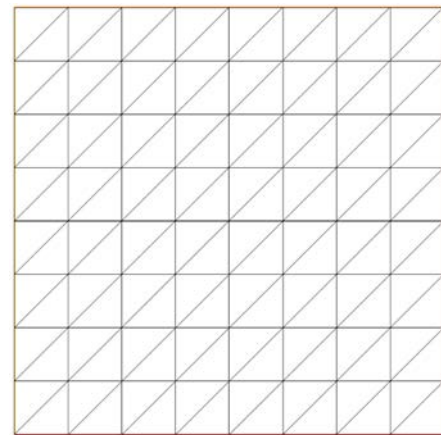
Từ kết quả trong Bảng 1, có thể thấy rằng sai số giảm nhanh khi tăng mức tinh chỉnh lưới (tức là khi h giảm), và bậc hội tụ có xu hướng ổn định quanh giá trị 2, phù hợp với đánh giá sai số lý thuyết.

Bảng 1. Sai số và bậc hội tụ thực nghiệm của ví dụ bài toán không-thời gian 2D

N	$\ u - u_h\ _{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$	EOC
4	1.850×10^{-1}	-
8	5.402×10^{-2}	1.776
16	1.416×10^{-2}	1.932
32	3.599×10^{-3}	1.976
64	9.054×10^{-4}	1.991
128	2.271×10^{-4}	1.995
256	5.688×10^{-5}	1.997



Hình 1. Đồ thị sai số và bậc hội tụ của ví dụ bài toán không-thời gian 2D



Hình 2. Minh họa bước lưới của ví dụ bài toán không-thời gian 2D

Hình 1 minh họa đồ thị sai số $\|u - u_h\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$ và bậc hội tụ thực nghiệm theo bước lưới h , cho thấy sai số giảm đều và EOC giữ được tính ổn định. Hình 2 minh họa bước lưới không gian của ví dụ bài toán không-thời gian 2D, với lưới được tinh chỉnh đều

trên miền Ω , đảm bảo tính chất hội tụ của phương pháp. Kết quả số cho thấy phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian được đề xuất có khả năng hội tụ tốt và hiệu quả trong việc giải bài toán với miền không – thời gian hai chiều.

3.2. Ví dụ 2

Tiếp theo, chúng tôi xét bài toán trong không gian ba chiều, miền không gian được chọn là hình vuông đơn vị $\Omega = (0,1)^2$, và thời gian xét trên đoạn $(0, T)$ với $T = 1$. Do đó, miền không-thời gian là $Q = (0,1)^2 \times (0,1)$. Nghiệm chính xác được chọn là

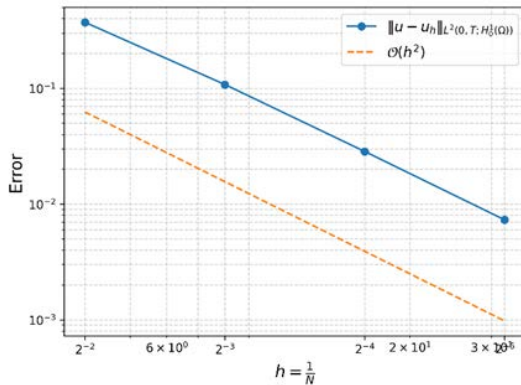
$$u(x, y, t) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)(t^2 + t).$$

Điều kiện ban đầu tại $t = 0$ là $u(x, y, 0) = 0$, và điều kiện biên Dirichlet thuần nhất $u = 0$

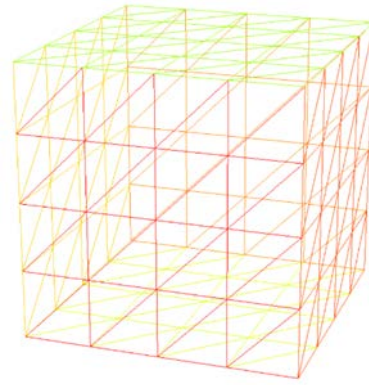
được áp dụng trên toàn bộ biên không gian $\partial\Omega$. Trong Bảng 2, chúng tôi trình bày sai số $\|u - u_h\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$ cùng với bậc hội tụ (EOC) khi điều chỉnh bước lưới không gian h trong bài toán không-thời gian 3D.

Bảng 2. Sai số và bậc hội tụ thực nghiệm của ví dụ bài toán không-thời gian 3D

N	$\ u - u_h\ _{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$	EOC
4	3.725×10^{-1}	-
8	1.079×10^{-1}	1.787
16	2.847×10^{-2}	1.923
32	7.308×10^{-3}	1.962



Hình 3. Đồ thị sai số và bậc hội tụ của ví dụ bài toán không-thời gian 3D



Hình 4. Minh họa bước lưới của ví dụ bài toán không-thời gian 3D

Dựa trên Bảng 2, sai số giảm rõ rệt khi bước lưới h được thu nhỏ, đồng thời bậc hội tụ thực nghiệm ổn định ở mức gần bằng 2, phù hợp với đánh giá sai số lý thuyết. Kết quả này chứng minh phương pháp phần tử hữu hạn không-thời gian đạt hiệu suất cao khi áp dụng cho bài toán trên miền hai chiều không gian. Hình 3 mô tả đồ thị sai số $\|u - u_h\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}$ và EOC theo bước lưới h . Hình 4 thể hiện cách sắp xếp lưới không gian trong bài toán 3D, với các ô lưới được phân bố đồng đều trên miền Ω , hỗ trợ tốt cho tính hội tụ của phương pháp.

4. Kết luận

Nghiên cứu này trình bày phương pháp phần tử hữu hạn không gian-thời gian giải xấp xỉ phương trình phản ứng khuếch tán. Cách tiếp cận này thể hiện một hướng đi mới so với các phương pháp số truyền thống trong giải các phương trình phụ thuộc thời gian. Kết quả lý thuyết đánh giá sai số và ví dụ số thu được chứng minh tiềm năng ứng dụng phương pháp cho việc giải xấp xỉ các phương trình phụ thuộc thời gian. Cách tiếp cận này đặc biệt hữu ích cho các mô phỏng yêu cầu độ chính xác cao trên cả không gian và thời gian. Tuy nhiên, việc đảm bảo điều kiện ổn định của dạng yếu và dạng rời rạc của bài toán đặt ra các thách thức khi mở rộng phương trình cho các thành phần đối lưu hoặc phi tuyến. Những trường hợp này có thể đòi hỏi sự kết hợp với phương pháp phần tử hữu hạn không liên tục (Ta et al., 2016) hoặc các kỹ thuật lưới thích nghi (Frey et al., 2018). Chúng ta cũng có thể áp dụng phương pháp này cho lớp các bài toán có biên chuyển động (Nguyen et al., 2025). Những hướng nghiên cứu này là triển vọng cho việc phát triển và mở rộng phạm vi ứng dụng của phương pháp phần tử hữu hạn không – thời gian.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

❖ **Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được thực hiện với sự hỗ trợ từ Bộ Giáo dục và Đào tạo Việt Nam thông qua đề tài mã số B2024.BKA.18.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Brenner, S. C., & Scott, L. R. (2008). *The mathematical theory of finite element methods* (3rd ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-75934-0>
- Ern, A., & Guermond, J.-L. (2004). *Theory and practice of finite elements* (Vol. 159). Springer.
- Ern, A., & Guermond, J.-L. (2021a). *Finite elements I: Approximation and interpolation* (Vol. 72). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-56341-7>
- Ern, A., & Guermond, J.-L. (2021b). *Finite elements II: Galerkin approximation, elliptic and mixed PDEs* (Vol. 73). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-56923-5>
- Frey, P., Kazerani, D., & Ta, T. T. M. (2018). An adaptive numerical scheme for solving incompressible 2-phase and free-surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 87(11), 543-582. <https://doi.org/10.1002/flid.4502>
- Hecht, F. (2012). New developments in FreeFEM++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4), 251-268.
- Lang, J. (2001). *Adaptive multilevel solution of nonlinear parabolic PDE systems*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-04484-1>
- Larsson, S., & Thomée, V. (2003). *Partial differential equations with numerical methods* (Texts in Applied Mathematics, 45). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-88706-5>
- Nguyen, Q. H., Le, V. C., Hoang, P. C., & Ta, T. T. M. (2025). A fitted space-time finite element method for an advection-diffusion problem with moving interfaces. *Applied Numerical Mathematics*, 211, 61-77. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2025.01.002>

- Steinbach, O. (2015). Space-time finite element methods for parabolic problems. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 15(3), 251–270.
- Ta, M., Pigeonneau, F., & Saramito, P. (2016, May). An implicit high order discontinuous Galerkin level set method for two-phase flow problems. Paper presented at the *Ninth International Conference on Multiphase Flow*, Florence, Italy. Retrieved from <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01323548>
- Ta, T. T. M., Nguyen, Q. H., & Pham, P. H. (2025). Improved a priori error estimates for a space-time finite element method for parabolic problems. *arXiv preprint arXiv:2503.09229*.
- Thomée, V. (2006). *Galerkin finite element methods for parabolic problems* (2nd ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/3-540-33467-7>

**SPACE-TIME FINITE ELEMENT METHOD
FOR SOLVING REACTION-DIFFUSION EQUATIONS**

Phạm Phi Hùng, Mai Thi Tuyet Nhung, Ta Thi Thanh Mai*

Hanoi University of Science and Technology, Vietnam

*Corresponding author: Ta Thi Thanh Mai – Email: mai.tathithanh@hust.edu.vn

Received: May 01, 2025; Revised: May 13, 2025; Accepted: June 16, 2025

ABSTRACT

In this paper, we present a space-time finite element method for the approximate solution of reaction–diffusion equations. Unlike traditional numerical approaches that discretize the temporal and spatial domains separately, the proposed method discretizes the space-time domain $Q = \Omega \times (0, T)$ simultaneously on a unified mesh structure. This unified treatment reduces computational cost and enhances the accuracy of the approximate solution. The method reformulates the original problem into a variational (weak) form, and the well-posedness of the weak formulation is established via the Banach–Nečas–Babuška theorem, ensuring the existence and uniqueness of the solution. A priori error estimates demonstrate that the method achieves optimal convergence rates in the corresponding function spaces. The effectiveness and accuracy of the approach are further validated through numerical experiments conducted using the open-source software FreeFEM++.

Keywords: a priori error estimates; FreeFEM++; reaction-diffusion equations; Space-time finite element method