УДК 519.688+519.63

А.М. Онишкова

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ СО СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ

Исследование многих задач математической физики сводится к решению краевых задач с неизвестной или свободной границей. Решение подобного рода задач связано с некоторыми трудностями. Цель работы – решение такой задачи, т.е. определение неизвестной границы. Эта цель зачастую достигается только численным путем с применением вариационных методов. В данной работе предлагается численный алгоритм решения задачи математической физики, заключающейся в определении минимума некоторого квадратичного функционала, заданного в области, содержащей заранее неизвестную границу. Такая свободная граница определяется из условия минимальности некоторого функционала вместе с неизвестными функциями. Рассмотрено решение задачи для плоской области методом сеток. Для поиска минимума используются генетические алгоритмы. Представлены результаты численных экспериментов. Результатом работы является новый алгоритм поиска неизвестных границ для двумерной задачи, преимущество которого состоит в сочетании вариационного подхода к нахождению неизвестной границы и генетических алгоритмов для поиска локального минимума в условиях существования нескольких минимизаторов.

Алгоритм; функционал; минимум; генетический алгоритм; сетка; функция; область; граница.

A.M. Onishkova

NUMERICAL STUDY OF TWO-DEMENSIONAL PROBLEM CONTAINING THE UNKNOWN INTERFACE

The study of many problems in mathematical physics reduces to the solution of boundary value problems with an unknown or a free interface. The solution of such tasks is associated with some difficulties. The purpose is to find the solution of this problem, that is the definition of an unknown interface. Determine the solution is often possible only numerically using variational methods. In this work The numerical algorithm consists of in determination of a minimum of some quadratic functional, defined in the area containing in advance unknown interfaces. The unknown interface is obtained from a minimisation condition of the functional together with unknown functions. The problem for plane area dares a method of grids. The presented new algorithm uses various methods to search minimum, in particular, genetic algorithms are implemented. The results of numerical experiments are presented. From the results it is concluded that we have a new algorithm to search the unknown interfaces for two-dimensional problem, the advantage of which is the combination of the variational approach to finding the unknown interface and genetic algorithms to search for a local minimum in terms of having multiple minimizers.

Algorithm; functional; minimum; genetic algorithm; grid; function; area; interface.

Введение. Математические модели многих физических процессов и явлений приводят к краевым задачам математической физики, содержащим заранее неизвестные поверхности, подлежащие определению в ходе решения задачи. Пример такой задачи – модель таяния льда (задача Стефана).

Начиная с работ Дж. Гиббса [1], для решения задач с неизвестной границей широко используются вариационные методы [1–11]. Идея решения состоит в определении экстремального или стационарного решения соответствующего функционала. Особенностью данного класса задач является то, что при варьировании нужно рассматривать не только неизвестные функции, но и положение неизвестной границы. Таким образом, математическая задача состоит в том, чтобы найти такие $u^*, \tilde{A}^*$: $I(u^*, \tilde{A}^*) = \min\limits_{\underline{u} \in H, \Gamma} I(\underline{u}, \Gamma)$, где $\underline{u}$ – некоторые функции из определенного пространства H, а Г – положение неизвестной границы. Математическая теория такого класса задач в определенной степени развита [1–12]. Вместе с тем, численное исследование таких задач встречает значительные сложности [2–6]. В данной работе предложен некоторый численный алгоритм для решения задач с неизвестными границами.

Идея метода состоит в следующем. Предположим, что нам известно какое-то положение $\tilde{\Gamma}$. Тогда, решая задачу поиска u $\min\limits_{u} I(u,\tilde{\Gamma})$, можно найти $\tilde{u}$, соответствующей $\tilde{\Gamma}$. Подставляя $\tilde{u}$ в I, получим функционал, зависящий только от Г: $\tilde{I}(\Gamma)=I(\tilde{u}(\Gamma),\Gamma)$. Далее решаем задачу поиска минимума $\tilde{I}$: $\min\limits_{\Gamma} \tilde{I}(\tilde{u}(\Gamma),\Gamma)$.

Шаги алгоритма можно условно представить следующим образом:

1. Задается начальное положение границы Γ_0.
2. Находится соответствующее решение $\underline{u}_0$.
3. Вычисляется $I_0 = I(u_0,\Gamma_0)$.
4. Выверяется следующее приближение Γ_n.
5. Находится решение u_n : $\min\limits_{u} I(u,\Gamma_n)$.
6. Вычисляется $I_n = I(u_n,\Gamma_n)$.
7. Проверяется условие сходимости.

Ключевыми вопросами являются:

а) выбор следующей итерации Г;

б) выбор условия сходимости минимизационной последовательности I_n.

В работе рассмотрена реализация данного метода к двумерным задачам (Г задается линией на плоскости). Показано, что предложенный алгоритм позволяет найти решение, т.е. как неизвестную функцию, так и положение границы.

Постановка задачи. В прямоугольной области, где задано уравнение $k_{\pm}\Delta u=f$, где $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ и условия Дирихле на границе, необходимо определить положение неизвестной границы Г, на которой заданы условия согласования $k_+\frac{\partial up}{\partial n}=k_-\frac{\partial um}{\partial n}$ (рис. 1).

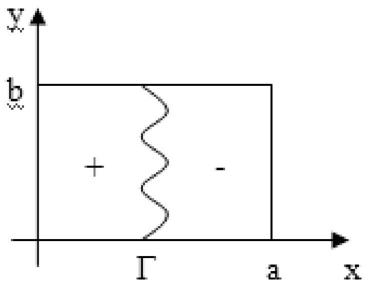

Рис. 1. Прямоугольная область и граница

Граница Г находится из условий минимума некоторого функционала

$$I=\frac{1}{2}\int\limits_{V_+} k_+\nabla u^2 dV_+ + \frac{1}{2}\int\limits_{V_-} k_-\nabla u^2 dV_- - \int\limits_{V_+\cup V_-} fudV .$$

Генетический алгоритм. Существенным является вопрос о выборе метода поиска минимума. Перспективным классом алгоритмов являются так называемые генетические алгоритмы.

Генетический алгоритм – это метод решения задач оптимизации на основе естественного отбора, аналогично тому, как это происходит в процессе биологической эволюции. В генетическом алгоритме посредством последовательного отбора поколений происходит "эволюция" по направлению к оптимальному решению.

В отличие от существующих методик, ГА начинает работу с некоторого случайного набора исходных решений, который называется популяцией. Каждый элемент из популяции (хромосома) представляет некоторое решение проблемы в первом приближении. Хромосома – строка символов некоторой природы, не обязательно бинарных. Хромосомы эволюционируют на протяжении множества итераций, носящих название поколений (или генераций). В ходе каждой итерации хромосома оценивается с использованием некоторой функции соответствия. Для создания следующего поколения новые хромосомы (отпрыски) формируются либо путем скрещивания двух хромосом-родителей из текущей популяции, либо путем случайного изменения (мутации) одной хромосомы. Новая популяция формируется путем (а) выбора согласно функции соответствия некоторых родителей и отпрысков и (б) удаления оставшихся для того, чтобы сохранять постоянным размер популяции. Хромосомы с большей функцией соответствия имеют больше шансов быть выбранными (выжить). После нескольких итераций алгоритм сходится к лучшей хромосоме, которая является либо оптимальным, либо близким к оптимальному решением.

Таким образом, используются два вида операций:

1. Генетические операции: скрещивание и мутация.
2. Эволюционная операция: выбор.

Скрещивание является главной генетической операцией. Эта операция выполняется над двумя хромосомами – родителями и создает отпрыск путем комбинирования особенностей обоих родителей. Этот метод работает очень хорошо, если хромосомы представляют собой битовые строчки. Кроме того, производительность всего генетического алгоритма в первую очередь зависит от производительности используемой операции скрещивания. Мутация – фоновая операция, производящая случайное изменение в различных хромосомах. В ГА мутация играет важную роль для (а) восстановления генов, выпавших из популяции в ходе операции выбора, так что они могут быть опробованы в новых комбинациях, (б) формирования генов, которые не были представлены в исходной популяции.

Поиск – один из наиболее универсальных методов нахождения решения, когда априори не известна последовательность шагов, ведущая к оптимуму. Существуют две поисковые стратегии:

1. Эксплуатация наилучшего решения, например, градиентный метод.
2. Исследование пространства решений. Примером является случайный поиск.

Генетический алгоритм представляет собой класс поисковых методов общего назначения, которые комбинируют элементы обоих стратегий.

Алгоритм решения.

1. Задаем a, b, h, k+, k- и тип границы (рассмотрен случай прямой границы).
2. Строим сетку: na – количество точек на [0, a]; nb – количество точек на [0, b];
   $$xi=(i-1)*h,\ i=1\ldots na;\ yj=(j-1)*h,\ j=1\ldots nb.$$
3. В массивы xG, yG помещаем узлы сетки, через которые проходит граница. xG хранит координаты x границы, а yG – координаты y.
4. Строим на графике сетку и полученную границу.

5. Получаем множества V_+ и V_-. V_+ будет хранится в массивах xVP – узлы по x и yVP– узлы по y; V_- будет хранится в массивах xVM – узлы по x и yVM – узлы по y.
6. Определяем местоположение границы, запоминаем координаты узлов границы в массивах gNy и gNx.
7. Присваиваем границе неизвестную постоянную a – массив неизвестных.
8. Ищем up – решение на V_+:
   a) записываем граничные условия up(:,1)=0, up(1,:)=0, up(n_b,:)=0;
   b) вычисляем f(x,y) в узлах сетки на V_+– f_{ij};
   c) для внутренних узлов составляем уравнения, пользуясь разностными формулами.Уравнение $k_+\Delta up=f(x,y)$ принимает вид
   $$up_{i+1j}-2up_{ij}+up_{i-1j}+up_{ij+1}-2up_{ij}+up_{ij-1}-f_{ij}h^2/k_+=0.$$
9. Решаем полученную систему уравнений.
10. Получаем решение up, которое зависит от a, где a = up(gNy(i), gNx(i)).
11. Вспомним условие $k_+\dfrac{\partial up}{\partial n}=k_-\dfrac{\partial um}{\partial n}$. Если считать, что граница – прямая линия, то нормаль n=[h 0]. Если обозначить узлы множества V_- um, тогда можно записать выражение для градиентов нормали (запишем для узлов внутри сетки):

grup=[(up(gNy(i),gNx(i))-up(gNy(i),gNx(i)-1))/(h)
(up(gNy(i),gNx(i))-up(gNy(i)-1,gNx(i)))/(h)]
grum=[(um(gNy(i),gNx(i)+1)-um(gNy(i),gNx(i)))/(h)
(um(gNy(i)+1,gNx(i))-um(gNy(i),gNx(i)))/(h)]

Разностное уравнение для условия $k_+\dfrac{\partial up}{\partial n}=k_-\dfrac{\partial um}{\partial n}$ имеет вид

kp*(n(1)*grup(1)+n(2)*grup(2)) –km*(n(1)*grum(1)+n(2)*grum(2)) = 0.

Т.к. n=[h 0] , получаем

kp* (up(gNy(i),gNx(i)) –up(gNy(i),gNx(i)-1)) – km*
(um(gNy(i),gNx(i)+1) –um(gNy(i),gNx(i))) =0

Для удобства gNy(i) = i, gNx(i)=j.

Получаем

kp* up(i, j)- kp*up(i,j-1) – km* um(i, j+1)+ km*um(i ,j) =0

Известно, что up(i, j) = um(i ,j).

Тогда

kp* up(i, j) – kp*up(i,j-1) – km* um(i, j+1)+ km* up(i, j) =0
(kp+km) * up(i, j) – kp*up(i,j-1) – km* um(i, j+1) = 0
um(i, j+1) =((kp+km) * up(i, j) – kp*up(i,j-1))/ km

Получается, что мы выразили через up узлы множества V_-, находящиеся в колонке, следующей после границы (обозначено синими точками).

Для остальных узлов um:

a. записываем граничные условия um(:,n_a)=0, um(1,:)=0, um(n_b,:)=0;
b. для внутренних узлов составляем уравнения, пользуясь разностными формулами.Уравнение $k_-\Delta um=f(x,y)$ принимает вид
   $$um_{i+1j}-2um_{ij}+um_{i-1j}+um_{ij+1}-2um_{ij}+um_{ij-1}-f_{ij}h^2/k_-=0;$$
c. вычисляем f(x,y) в узлах сетки V_-– f_{ij}.

12. Получаем решение um, которое зависит от a= up(gNy(i), gNx(i)).
13. Поиск функционала:

1. Слагаемое $\frac{1}{2}\int\limits_{V_+} k_+ \nabla u^2 dV_+$ превращается в

$$\frac{1}{2}\sum_m\sum_n \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}}\int\limits_{y_m}^{y_{m+1}} \left(ux^2+uy^2\right)dxdy = \frac{1}{2}\sum_m\sum_n \left(ux^2+uy^2\right)\left(x_{n+1}-x_n\right)\left(y_{m+1}-y_m\right) = sp.$$

Здесь

$$x_n, y_m \in V_+,\ ux = \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_m^n - u_m^{n-1}}{h},\ uy = \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h},\ \nabla u^2 = ux^2 + uy^2.$$

2. Слагаемое $\frac{1}{2}\int\limits_{V_-} k_- \nabla u^2 dV_-$ превращается в

$$\frac{1}{2}\sum_m\sum_n \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}}\int\limits_{y_m}^{y_{m+1}} \left(ux^2+uy^2\right)dxdy = \frac{1}{2}\sum_m\sum_n \left(ux^2+uy^2\right)\left(x_{n+1}-x_n\right)\left(y_{m+1}-y_m\right) = sm.$$

Здесь $x_n, y_m \in V_-$.

3. Слагаемое $\frac{1}{2}\int\limits_{V_+\cup V_-} fudV$ превращается в so=sop+som, где

$$\text{sop} = \frac{1}{2}\sum_i\sum_j f_{ij}up_{ij}\left(x_{j+1}-x_j\right)\left(y_{i+1}-y_i\right),\ x_j, y_i \in V_+$$

$$\text{som} = \frac{1}{2}\sum_k\sum_l f_{kl}um_{kl}\left(x_{k+1}-x_k\right)\left(y_{l+1}-y_l\right),\ x_k, y_l \in V_- / \Gamma.$$

4. Функционал I=sp+sm-so. Этот функционал выражен через up(i,j), поскольку um также было выражено через up(i,j). Условие равенства производных на границе с коэффициентами kp и km также учтено.

5. Запускаем для функционала генетический алгоритм.

Тестовые примеры. В качестве тестовых примеров приведены результаты решения нескольких модельных задач.

Пример 1

Рассмотрим решение модельной задачи для эллиптического уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -2y + 2y^2 - 2x + 2x^2$$

в прямоугольнике с центром в начале координат, высота и ширина – равны единице. На сторонах прямоугольника поставлены однородные условия Дирихле. Известно точное решение $u(x, y) = xy - x^2 y - y^2 x + x^2 y^2$. Полученные результаты представлены на рис. (рис. 2, 3).

Решение на границе области (i=1) 0.03197. Точное решение minFI = 0,0333. Таким образом погрешность тоже можно считать хорошей.

Пример 2

Рассмотрим решение модельной задачи для эллиптического уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -5\pi \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$$

в прямоугольнике с центром в начале координат, высотой, равной единице, и шириной, равной двум. На сторонах прямоугольника поставлены однородные условия Дирихле. Известно точное решение $u(x, y) = \sin \pi x \cdot \sin 2\pi y$. Результирующий функционал с минимальным значением представлен на рисунке (рис. 4).

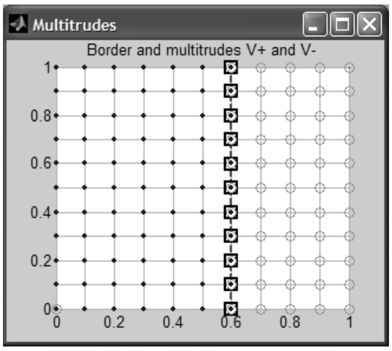

Рис. 2. Граница и множества

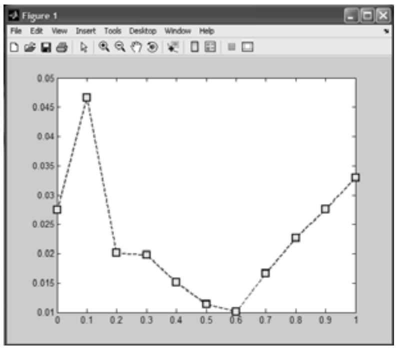

Рис. 3. Функционал

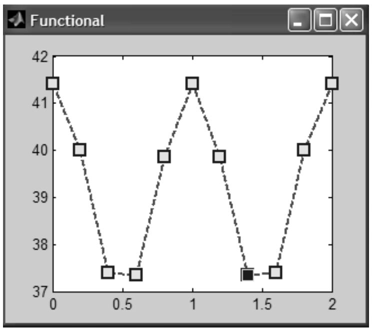

Рис. 4. Функционал

Заключение. Для двумерных задач со свободной границей разработан численный алгоритм, позволяющий найти ее положение, определяемое из условия минимальности соответствующего функционала. Преимущества предложенного алгоритма поиска заранее неизвестных границ состоит в сочетании вариационного подхода к нахождению неизвестной границы и генетических алгоритмов для поиска локального минимума в условиях существования нескольких минимизаторов. Вариационная постановка оказывается эффективным средством для применения конечно-элементных и конечно-разностных методов, а генетические алгоритмы обладают преимуществами по сравнению с классическими методами в случае поиска локальных минимумов. Кроме того, описанная в работе реализация численного алгоритма не требует сгущения сетки в окрестности неизвестной границы, а условия совместности на границе оказываются выполненными автоматически в силу вариационной постановки.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Лихачев В.А., Кузьмин С.Л., Каменцева З.П.* Эффект памяти формы. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. – 218 с.
2. *Mielke A., Theil F., Levitas V.* A Variational Formulation of Rate-Independent Phase Transformations Using an Extremum Principle // Archive for Rational Mechanics and Analysis. – 2002. – Vol. 162, № 2. – P. 137-177.

3. *Pietraszkiewicz W., Eremeyev V.A., Konopinska V.* Extended non-linear relations of elastic shells undergoing phase transitions // Z.Angew. Math. Mech. (ZAMM). – 2007. – Vol. 87, №. 2. – P. 150-159.
4. *Bhattacharya, K., & Schlömerkemper, A.* Stress-induced phase transformations in shape-memory polycrystals // Archive for rational mechanics and analysis. – 2010. – Vol. 196, № 3. – P. 715-751.
5. *Knüpfer H., & Kohn R. V.* Minimal energy for elastic inclusions // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science. – 2011. – Vol. 467, № 2127. – P. 695-717.
6. *Miehe C.* Mixed variational principles for the evolution problem of gradient–extended dissipative solids // GAMM-Mitteilungen. – 2012. – Vol. 35. – P. 8-25.
7. *Гиббс Дж.* Термодинамика. Статистическая механика. – М.: Наука, 1982. – 584 с.
8. *Гринфельд М.А.* Об условиях термодинамического равновесия фаз нелинейно-упругого материала // Докл. АН СССР. – 1980. – Т. 251, № 4. – С. 824-827.
9. *James R.D.* Finite deformation by mechanical twinning // Arch. Rat. Mech. Anal. – 1981. – Vol. 77. – P. 143-177.
10. *Гринфельд М.А.* Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. – М.: Наука, 1990. – 312 с.
11. *Морозов Н.Ф., Назыров И.Р., Фрейдин А.Б.* Одномерная задача о фазовом превращении упругого шара // Докл. РАН. – 1996. – Т. 346, № 2. – С. 188-191.
12. *Осмоловский В.Г.* Вариационная задача о фазовых переходах в механике сплошной среды. – СПб.: Изд-во СПб ун-та, 2000. – 262 с.
13. *Бахвалов Н.С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). – М.: Наука, 1975. – С. 535-592.
14. *Ануфриев И.Е., Смирнов А.Б., Смирнова Е.Н.* MATLAB7. – СПб.: Изд-во “БХВ-Петербург”, 2005. – С. 330-342.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор В.А. Еремеев.

Онишкова Анастасия Михайловна – ООО «ИТСК»; e-mail: aonishkova@gmail.com; 344079, г. Ростов-на-Дону, ул. Ленина, 63, кв. 4; тел.: 89264959227; главный специалист.

Onishkova Anastasia Mikhajlovna – Ltd. "ITSC"; e-mail: aonishkova@gmail.com; 63-4, Lenina street, Rostov-on-Don, 344079, Russia; phone: +79264959227; chief specialist.

УДК 532.5.031

А.Е. Чистяков, Ю.В. Першина

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ ПОПУЛЯЦИЙ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ХИЩНИК-ЖЕРТВА

При описании биологической системы предполагалось, что хищники обладают пространственным перемещением, конвективная составляющая скорости которого направлена в сторону градиента жертв. Для построения разностных схем был использован интегроинтерполяционный метод, при этом учитывалась степень заполненности ячеек. На основе разработанных алгоритмов был построен комплекс программ, отличительной особенностью которого является высокая размерность задачи, возможность привязки к реальной физической экологической системе, учет заполненности контрольных объемов в дискретных алгоритмах, что позволяет получать достаточно высокую точность даже на грубых сетках за счет более точной аппроксимации границы.

Хищник; жертва; диффузионное перемещение; конвективное перемещение.