УДК 519.6

# Оптимізація генетичним алгоритмом сітки скінченних елементів для числового аналізу задачі адвекції-дифузії-реакції

Ярема Савула[1], Людмила Винницька[2]

[1] д. ф.-м. н., професор, кафедра прикладної математики Львівського національного університету імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, e-mail: savula@franko.lviv.ua
[2] аспірант, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, e-mail: lyuda_vyn@yahoo.com

*Для задачі адвекції-дифузії-реакції запропоновано відмінний від традиційних підходів алгоритм декомпозиції одновимірної області на скінченні елементи. Для методу скінченних елементів використано апроксимаційні функції-«бульбашки». Поділ на елементи вибирається з умови мінімізації нев'язки розв'язку, отриманого методом скінченних елементів. Оптимізаційну задачу розв'язано генетичним алгоритмом. Наведено числові результати для задачі з великим числом Пекле.*

**Ключові слова:** генетичний алгоритм, метод скінченних елементів, поділ області, вузлова точка, задача адвекції-дифузії-реакції.

**Вступ.** У процесі розв'язування задач математичної фізики методом скінченних елементів (МСЕ) важливу роль у забезпеченні точності наближених розв'язків посідає декомпозиція області на скінченні елементи. Для задачі адвекції-дифузії-реакції у випадку великих чисел Пекле побудова «доброї» сітки є дуже важливою, оскільки точність розв'язку, побудованого МСЕ, значною мірою залежить від вибору вузлових точок [1].

Згідно з традиційним підходом, який зазвичай використовують для побудови сітки, область ділять на однакові скінченні елементи, а потім шляхом додавання вузлових точок за певним критерієм оптимізують поділ.

Розглянемо задачу поділу області на фіксовану кількість скінченних елементів як деяку задачу оптимізації, яку розв'язуватимемо шляхом застосування генетичного алгоритму [2-4].

## 1. Задача адвекції-дифузії-реакції

**1.1. Формулювання задачі.** Розглянемо одновимірний стаціонарний випадок задачі адвекції-дифузії-реакції

$$Lu \equiv -u''(x) + Peu'(x) + Qu(x) = f, \quad u(a) = u(b) = 0, \quad \Omega = [a,b] \qquad (1)$$

де $Q$, $f$ — сталі, $Q \geq 0$; $Pe$ — число Пекле, $Pe > 0$.

Задачу (1) легко розв’язати аналітично. Однак, у процесі числового розв’язування МСЕ виникає проблема, оскільки для великих чисел Пекле її розв’язок є сильно градієнтним в околі точки $b$ [5].

Варіаційне формулювання задачі (1) має такий вигляд:
знайти елемент $u \in V$, $V = \{v = v(x): v \in W_2^{(1)}(\Omega), v(a) = v(b) = 0\}$, що $\forall v \in V$ виконується рівняння

$$\int_a^b \{u'v' + Pe\,u'v + Quv\} dx = \int_a^b fv dx\,, \tag{2}$$

де $W_2^{(1)}(\Omega)$ — простір функцій Соболєва.

**1.2. Розв’язування задачі. Одновимірні апроксимації функціями-«бульбашками».** Задачу (2) розв’язуватимемо МСЕ з використанням апроксимаційних функцій-«бульбашок» [5, 6].

Нехай здійснено поділ області $\Omega$ на $N$ скінченних елементів $\Omega_k$ множиною точок $X$

$$X = \{x_i :\ i = \overline{0, N};\ x_{i-1} < x_i,\ x_0 = a,\ x_N = b\}, \tag{3}$$

$$\Omega_k = \{x :\ x_{k-1} \le x \le x_k\},\ k = \overline{1, N}\,. \tag{4}$$

За допомогою співвідношення

$$x = \frac{1-\xi}{2} x_{k-1} + \frac{1+\xi}{2} x_k$$

відобразимо кожен скінченний елемент $\Omega_k$ на «стандартний» скінченний елемент

$$\Omega_* = \{\xi : -1 \le \xi \le 1\}.$$

Обернене відображення має вигляд

$$\xi = \frac{2x - x_{k-1} - x_k}{x_k - x_{k-1}}\,.$$

На $\Omega_*$ визначимо таку послідовність базисних функцій

$$\varphi_1(\xi) = \frac{1-\xi}{2},\ \ \varphi_2(\xi) = \frac{1+\xi}{2},\ \ \varphi_j(\xi) = \Phi_{j-1}(\xi),\quad j = \overline{3, p+1}\,, \tag{5}$$

де $p$ — степінь базисної функції, а $\Phi_j(\xi)$ визначають через поліноми Лежандра $P_{j-1}$ за формулою

ISSN 1816-1545 Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології
2005, вип. 2, 151-158

$$\Phi_j(\xi)=\sqrt{\frac{2j-1}{2}}\int_{-1}^{\xi}P_{j-1}(t)dt\,, \quad j=2,3,... \tag{6}$$

Відомо, що для поліномів Лежандра, які є ортогональними на проміжку [−1; 1], тобто

$$\int_{-1}^{1}P_i(t)P_j(t)dt=\begin{cases}0, & i\neq j;\\ \dfrac{2}{2i+1}, & i=j,\end{cases} \tag{7}$$

справджується рекурентна формула

$$(n+1)P_{n+1}(t)=(2n+1)tP_n(t)-nP_{n-1}(t), \quad n=1,2,..., \quad P_0=1, \quad P_1=t \tag{8}$$

та виконується співвідношення

$$(2n+1)P_n(t)=P'_{n+1}(t)-P'_{n-1}(t), \quad n=1,2,... \,. \tag{9}$$

Тоді

$$\varphi_j(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2(2j-1)}}\left[P_j(\xi)-P_{j-2}(\xi)\right], \; j=3,4,... \,. \tag{10}$$

З останніх рівностей і властивості ортогональності поліномів Лежандра (7) отримуємо формулу

$$\int_{-1}^{1}\varphi'_i(\xi)\varphi'_j(\xi)d\xi=\begin{cases}0, \; i\neq j;\\ 1, \; i=j.\end{cases} \tag{11}$$

Враховуючи запис (6) і властивість (7) дістаємо, що

$$\varphi_j(-1)=\varphi_j(1)=0\,, \quad j=3,4,p+1\,. \tag{12}$$

Власне тому $\varphi_j(\xi)$ називають функціями-«бульбашками». При записі апроксимованої функції у вигляді суми за базисними функціями

$$u_h(\xi)=\sum_{j=1}^{p+1}a_j\varphi_j(\xi)$$

отримаємо $u_h(-1)=a_1$, $u_h(1)=a_2$. Базисні функції $\varphi_1(\xi)$ і $\varphi_2(\xi)$ називають вузловими.

## 2. Елементарний генетичний алгоритм

Генетичний алгоритм розв’язування задач оптимізації часто розглядають як альтернативу традиційним методам. Робота алгоритму полягає в генеруванні великої кількості ймовірних розв’язків та у відборі кращих кандидатів.

Ідея генетичного алгоритму запозичена з теорії еволюції Дарвіна. Алгоритму характерна власна термінологія. Основним є поняття особини (ймовірний розв'язок), що має дві складові: хромосому й пристосованість. Хромосома (аргумент функції мети) складається з гена (генів). Якщо ми здійснюємо оптимізацію функції $f = f(x_1, x_2, ..., x_n)$, то кожній змінній $x_i$ $(i = \overline{1, n})$ відповідає ген — двійкове подання її значення (набори, що містять лише 0 і 1), причому 0 чи 1 називають алеллю. Пристосованість — значення функції $f$ для заданої хромосоми. Множина, елементами якої є хромосоми, утворює популяцію.

Механізм роботи елементарного генетичного алгоритму надзвичайно простий. Основні дії полягають у здійсненні обміну інформацією, що містять хромосоми. Алгоритм розпочинає свою роботу з деякої початкової популяції, а хромосоми особин генеруються випадковим чином. Генетичний алгоритм є ітераційним процесом і складається з таких трьох операцій:

1) репродукція (селекція);
2) схрещування;
3) мутація.

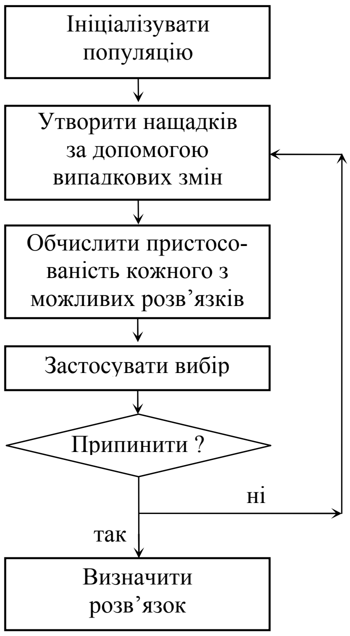


Рис. 1. Блок-схема генетичного алгоритму

На кожній ітерації створюється нова популяція, яка враховує досвід попередніх «поколінь».

Репродукція — це процес, що залежить від функції мети $f$. Ця функція є мірилом пристосованості кожного з наборів кодів до вимог певної задачі. Особини з вищою пристосованістю мають більшу ймовірність введення одного чи кількох нащадків до наступного покоління. Ця операція в своїй основі має дарвінівські засади природного відбору, згідно з якими виживають і дають потомство ті, що найкраще пристосовані.

Схрещування — це генерація нових розв'язків на основі відібраних батьківських пар. Класична схема полягає у створенні одного або декількох нащадків за допомогою різноманітних комбінацій батьківських алелей.

Загалом, мутація — це інвертування кількох алелей хромосоми (0 замінюють на 1 і навпаки), вибраних випадковим чином. У більшості випадків оператор мутації застосовується до нащадка з деякою ймовірністю.

Вважається, що селекція в генетичному алгоритмі є основним пошуковим механізмом, а мутація дозволяє внести в цей процес елемент випадковості, що знижує ймовірність зупинки алгоритму в локальному екстремумі.

Наприкінці роботи алгоритму з-поміж усіх особин вибирається та, що пристосована найкраще.

Зауважимо, що оскільки генетичні операції є випадковими змінами, то при одних і тих самих початкових даних їх результати, зазвичай, не співпадають.

## 3. Застосування генетичного алгоритму до побудови сітки скінченних елементів

**3.1. Формулювання задачі оптимізації.** Задачу поділу області $\Omega$ на скінченні елементи сформулюємо як задачу оптимізації

$$M(X) \to \min, \ M(X) = \sum_{k=1}^{N} m_k, \ m_k = \left\| Lu_h - f \right\|_{L_2(\Omega_k)}, \tag{13}$$

де $u_h$ — наближений розв'язок задачі (2), $L_2(\Omega)$ – простір функцій, інтегровних з квадратом.

### 3.2. Алгоритм розв'язування

*Крок 1.* Задача адвекції-дифузії-реакції (2) розв'язується для рівномірної сітки з $J$ вузлових точок.

*Крок 2.* Для кожного скінченного елемента $\Omega_k$ $\left(k = \overline{0, J}\right)$ обчислюється нев'язка $m_k$ і величина $r_k = \frac{m_k}{M} \cdot 100\%$.

*Крок 3.* Елементи, для яких $r_k \geq r$, де $r$ — деякий рівень похибки, міститимуть $n_k$ вузлових точок

$$n_k = \left\lceil \frac{m_k}{R}(N-1) \right\rceil, \ R = \sum_{\substack{1 \leq k \leq J \\ r_k \geq r}} m_k,$$

де $\lceil \cdot \rceil$ — ціла частина числа.

*Крок 4.* Для розв'язування задачі (13), тобто пошуку $N-1$ вузлових точок, застосовується генетичний алгоритм.

Перших три кроки алгоритму є підготовчими. Вони лише дають змогу визначити «проблемні» ділянки області. Тому на першому кроці рекомендуємо значення $J$ вибирати досить «великим». Кожна особина — це хромосома, що містить $N-1$ ген, для якої обчислено пристосованості $M$. За критерій зупинки виберемо виконання генетичним алгоритмом певної кількості ітерацій.

## 4. Результати числових експериментів

Для задачі (1) виберемо такі дані: $a=0$; $b=1$; $Pe=1000$; $Q=0{,}1$; $f=12$. Будемо шукати оптимальний поділ області на 10 скінченних елементів.

Задачу (2) розв'язуємо МСЕ з використанням апроксимаційних функцій-«бульбашок» четвертого порядку.

При заданих $J=15$, $r=20\%$ три вузлових точки міститимуться на відрізку (0,867; 0,933) і шість точок на відрізку (0,933; 1).

За критерій зупинки генетичного алгоритму вибираємо виконання трьох ітерацій. При популяції з 4 особин задача адвекції-дифузії-реакції (2) розв'язуватися 12 разів.

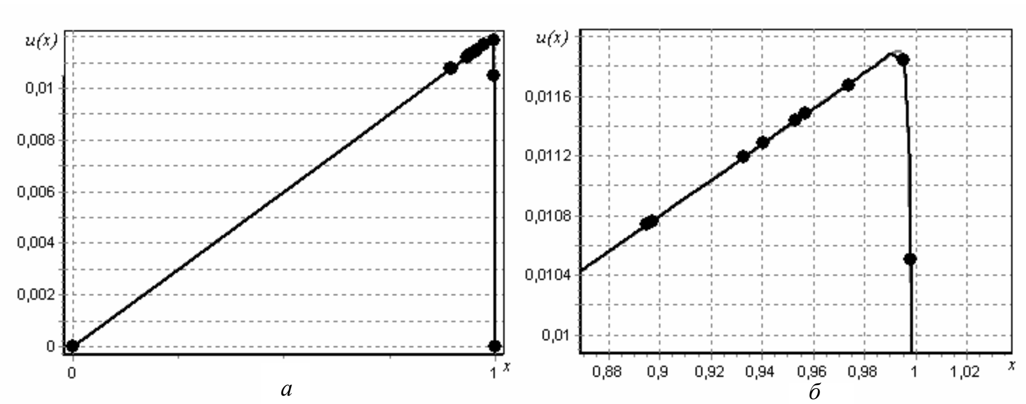


Рис. 2. Розподіл вузлових точок (І)

*Таблиця 1.* Вузлові точки (І)

| № | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $x$ | 0 | 0,895 | 0,897 | 0,933 | 0,94 | 0,953 | 0,957 | 0,974 | 0,995 | 0,998 | 1 |

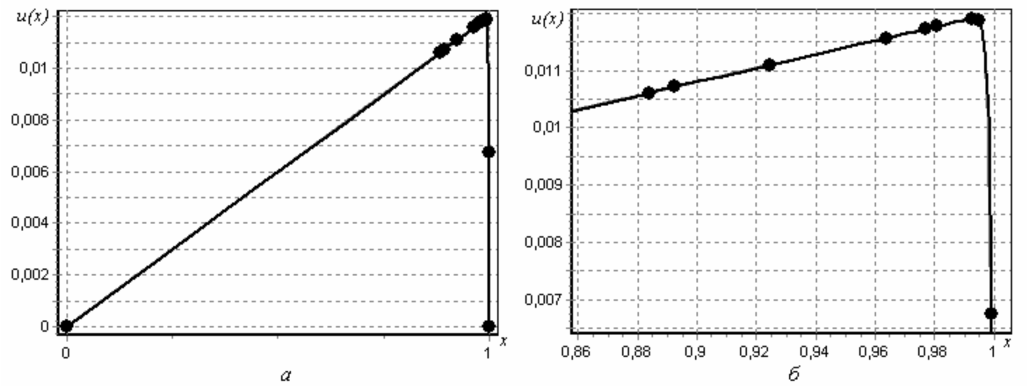


Рис. 3. Розподіл вузлових точок (II)

*Таблиця 2.* Вузлові точки (II)

| № | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| *x* | 0 | 0,884 | 0,893 | 0,925 | 0,964 | 0,977 | 0,981 | 0,993 | 0,995 | 0,999 | 1 |

На рис. 2*а* і рис. 3*а* зображено наближений і точний розв’язки задачі (2) і позначено вузлові точки при різних варіантах декомпозиції області за тих самих вхідних даних. На рис. 2*б* і рис. 3*б* у збільшеному вигляді показано ті частини області, де скупчуються вузлові точки. За даного поділу наближений і точний розв’язки практично співпадають.

Таблиці 1, 2 містять знайдені поділи *X*.

**Висновки.** Запропонований алгоритм є відмінним від традиційних підходів до декомпозиції одновимірних областей. Поділ області здійснюється на заздалегідь задану кількість елементів. Вузлові точки за такого підходу скупчуються в «проблемній» частині області.

Даний алгоритм можна застосовувати для задач, розв’язкам яких властива сильна градієнтність у деякій частині області.

## Література

[1] *Козаревська Ю. С.* Застосування *h*-адаптивної схеми методу скінченних елементів до розв’язування нестаціонарних задач мігрування // Вісник Львівського університету. Серія прикладна математика та інформатика. — 2004. — Вип. 8. — С. 141-151.

[2] *Arabas J.* Wyklady z algorytmow ewolucyjnych. — Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, 2004. — 303 s.

[3] *Goldberg D.* Algorytmy genetyczne i ich zastosovania. — Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, 2003. — 408 s.

[4] *Holder M., Richardson J.* Genetic Algorithms, Another Tool for Quad Mesh Optimization // Proceedings. — 7th International Meshing Roundtable, Sandia National Lab., 1998. — P. 497-594.

[5] *Савула Я. Г.* Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами. — Львів: видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2004. — 221 с.
[6] *Szabo B., Babushka I.* Finite element analysis. — New York: John Wiley & Sons, inc., 1991. — 368 p.

## Optimization by Genetic Algorithm of Finite Elements Mesh for Numerical Analysis of Advection-Diffusion-Reaction Problem

Yarema Savula, Lyudmyla Vynnytska

*An alternative algorithm for one-dimensional finite elements domain decomposition for advection-diffusion-reaction problem is proposed. «Bubble»-functions are used for finite elements method. The division is chosen in respect of FEM solution error minimization. Optimization is realized by genetic algorithm. Numerical results for «big» Peclet number are presented.*

## Оптимизация генетическим алгоритмом сетки конечных элементов для численного анализа задачи адвекции-диффузии-реакции

Ярема Савула, Людмила Винницка

*Для задачи адвекции-диффузии-реакции предложен отличный от традиционных подходов алгоритм декомпозиции одномерной области на конечные элементы. Для метода конечных элементов использовано аппроксимационные функции-«пузырьки». Разбиение выбирается из условия минимизации невязки решения, полученного методом конечных элементов. Задача оптимизации решается генетическим алгоритмом. Приведены численные результаты для задачи с большим числом Пекле.*

Отримано 28.09.05