МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
БУРЯТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ДОРЖИ БАНЗАРОВА
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# ГЕОМЕТРИЯ МНОГООБРАЗИЙ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

*Материалы Шестой научной конференции с международным участием*

(Улан-Удэ — оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г.)

Улан-Удэ
Издательство Бурятского госуниверситета
2020

УДК 514.75-77, 51.72-74, 372.851
ББК 22, 74
Г 361



Авторы опубликованных материалов несут ответственность за точность приведенных результатов и прочих сведений

Г 361 **Геометрия многообразий и её приложения:** материалы Шестой научной конференции с международным участием (Улан-Удэ — оз. Байкал, 27–29 августа 2020 г.) / отв. ред. В. Б. Цыренова. — Улан-Удэ: Изд-во Бурятского госуниверситета, 2020. — 340 с. ISBN 978-5-9793-1507-2

В сборник включены тезисы и статьи участников шестой научной конференции с международным участием «Геометрия многообразий и её приложения». Работа представлена в следующих направлениях: геометрия дифференцируемых многообразий, математическое и компьютерное моделирование прикладных задач механики и информационных систем, состояние и перспективы математического образования и вопросы преподавания математики.

**Geometry of manifolds and its applications:** the sixth scientific conference with international participation (Ulan-Ude – Lake Baikal, August 27 — August 29, 2020) / resp. ed. V. B. Tsyrenova. — Ulan-Ude: Buryat State University Publishing Department, 2020. — 340 p.
ISBN 978-5-9793-1507-2

The book includes the participants` abstracts and articles of the sixth scientific conference with international participation «Geometry of manifolds and its applications». There are following fields such as: geometry of differentiable manifolds, mathematical and computer modeling of applied problems of mechanics and information systems, the condition and perspectives of the mathematical education and questions of teaching mathematics.

ISBN 978-5-9793-1507-2

УДК 519.622.1

*© А. М. Бубенчиков, А. С. Челнокова, Д. Карастоянов*

# МНОГОШАГОВЫЕ СХЕМЫ С ПЕРЕМЕННЫМ ШАГОМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ [6]

**Аннотация.** В работе представлена классическая теория многошаговых схем для численного решения задачи Коши на основе обыкновенных дифференциальных уравнений. Известные многошаговые схемы: Адамса–Башфорта и Адамса–Моултона сопоставляются с классической схемой Рунге–Кутты четвертого порядка точности. Для исследования качества схем используется ограниченное решение задачи Коши, имеющее особенность в нуле в виде бесконечных производных. Заключения о качестве схем делаются на основании их способности приблизиться к особенности. В результате анализа этой теории сделан вывод о том, что лучшие по точности результаты в задаче конструирования схемы с переменным шагом дает метод преобразования независимой переменной. Для общего вида зависимости, определяющей связь координат, записана трехшаговая схема предиктор–корректор четвертого порядка точности.

**Ключевые слова**: полином Лагранжа, многошаговые схемы, метод преобразования координат, переменный шаг, качество вычислений.

*© A. Bubenchikov, A. Chelnokova, D. Karastoyanov*

# MULTI-STEP SCHEMES WITH VARIABLE INTEGRATION STEP

**Abstract.** The article presents the classical theory of multi-step schemes for numerically solving a Cauchy problem based on ordinary differential equations. Well-known multistep schemes: Adams – Bashfort and Adams – Moulton are compared with classical the fourth order Runge – Kutta scheme. To study the quality of schemes, a limited solution to the Cauchy problem is used, which has a singularity at zero in the form of infinite derivatives. Conclusions about the quality of schemes are made based on their ability to approach feature. As a result of analysis of this theory, it was concluded that the method of transforming an independent variable gives the best accuracy results in the problem of constructing a circuit with a variable step. For the general form of

[6] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Министерством культуры, образования, науки и спорта Монголии в рамках научного проекта № 19-51-44002

dependence determining the relationship of coordinates, a three-step predictor – corrector scheme of the fourth order of accuracy is written.

**Keywords:** Lagrange polynomial, multistep schemes, coordinate transformation method, variable step, quality of calculations.

**Введение**. Математическое моделирование позволяет не только объяснить имеющиеся экспериментальные данные, проанализировать поведение неизмеримых величин, но и прогнозировать свойства новых материалов. Так стабильность и свойства некоторых графеноподобных моноэлементных материалов [1,2] были предсказаны теоретически задолго до их синтеза. Большинство задач молекулярной динамики, а также механики небесных тел описывается системами обыкновенных дифференциальных уравнений. Для решения таких уравнений часто используются пакетные технологии [3-5]. Однако, работа по созданию экономичных и высокоточных алгоритмов продолжается оставаться актуальной.

В настоящей работе для класса задач прохождения молекул через нанопористые мембраны и набора статистики по прохождению пористого слоя сделана попытка уменьшить время расчетов и, увеличить точность вычислений за счет использования метода преобразования координат.

**1. Схемы с постоянным шагом.** Основная задача динамики частиц – это задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка относительно времени. Известным примером систему дифференциальных уравнений второго порядка можно свести к системе ОДУ первого порядка, но с большим количеством уравнений. Численное решение систем уравнений принципиально ничем не отличается от способа интегрирования одного характерного уравнения. Из соображений простоты рассмотрим уравнение вида:

$$\frac{du}{dt} = f(t,u). \qquad (1)$$

На примере этого уравнения разберем построение многошаговых схем численного интегрирования. Теория многошаговых схем существенным образом упрощается, если она ориентирована на постоянный шаг интегрирования. При численном решении уравнения (1) необходимо вычислить последовательность значений $u_i = u(t_i)$ на множестве точек $t_i = t_{i-1} + h,\ i = 1,...,N,\ h = const.$

Общая схема многошаговых методов может быть записана

следующим образом:

$$u_{n+k} = F(t_n,...,t_{n+k};u_n,...,u_{n+k-1}). \quad (2)$$

Здесь $F$ – получившаяся правая часть разностного аналога исходного дифференциального уравнения. Записанное уравнение говорит о том, что приближенное решение $u_{n+k}$ в точке $t_{n+k}$ находится через значения искомой величины в предшествующих $k-$точках. Получили так называемый $k-$шаговый метод. Соотношение (2) представляет класс явных методов, поскольку в правую часть этого равенства не входит значение $u_{n+k}$. В противном случае будем иметь неявную многошаговую схему.

Соотношение (2) получается из исходного дифференциального уравнения следующим образом. Правую часть дифференциального уравнения (1) аппроксимируем полином Лагранжа степени $k$:

$$L_k(t) = \sum_{i=n}^{n+k} f_i l_{ik}(t), \quad (3)$$

где

$$l_{ik}(t) = \prod_{j=n, j\neq i}^{n+k} \frac{t-t_j}{t_i-t_j},\ i = n,...,n+k. \quad (4)$$

Соотношение (4) представляет базисные полиномы степени $k$. Тогда запись (3) будет линейной комбинацией базисных полиномов. Рассмотрим случай $k=3$. Для этого случая полином (3) в четырех точках $i = n, n+1, n+2, n+3$ будет иметь значения $f_i$.

Теперь возьмем уравнение (1) с аппроксимированной полиномом (3) правой частью и проинтегрируем его в пределах от $t_{n+3}$ до $t_{n+4}$, найдем

$$u_{n+4} = u_{n+3} + \frac{h}{24}\left(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n\right). \quad (5)$$

Получили так называемую явную трехшаговую схему Адамса–Башфорта четвертого порядка точности.

Можно повысить число узлов, через которые проходит аппроксимирующий полином. Это приведет к формальному увеличению порядка точности. Расчетная формула для случая $k=4$ выглядит следующим образом:

$$u_{n+5} = u_{n+4} + \frac{h}{720}\left(1901f_{n+4} - 2774f_{n+3} + 2616f_{n+2} - 1274f_{n+1} + 250f_n\right). \quad (6)$$

Однако на практике пользуются формулой (5). По крайней мере расчеты с предыдущей формулой выглядят более экономичными. Имеется одна особенность в применении интерполяционного

полинома Лагранжа для конструирования явных многошаговых схем. Эта особенность состоит в том, что при интегрировании определяющего уравнения, используется внешняя часть полинома. Другими словами, полином не проходит через расчетный узел, находящийся на последнем слое по времени. Схемы, для которых расчетный узел будет крайним правым узлом или даже внутренним узлом аппроксимирующего полинома, являются неявными схемами. Обобщенная запись расчетной формулы для неявной схемы выглядит следующим образом:

$$u_{n+k} = F(t_n,...,t_{n+k};u_n,...,u_{n+k}). \qquad (7)$$

Видим, что искомое значение $u_{n+k}$ входит и в правую часть соотношения (7). В задачах ньютоновской динамики не приходится надеяться на явное решение этого соотношения относительно $u_{n+k}$. На практике поступают следующим образом. Указанную величину находят с использованием явной многошаговой схемы. После чего используют это значение в правой части неявной схемы (7). Поэтапное применение явной и неявной схем получило название процедуры предиктор–корректор. Применение такой процедуры является вполне естественным в отношении численной реализации неявной схемы.

Продолжим конструировать неявную схему. Использование кубических полиномов Лагранжа, а также узлов, проходящих через расчетную точку и три предшествующих точки слева, дает следующую формулу:

$$u_{n+3} = u_{n+2} + \frac{h}{24}\left(9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n\right). \qquad (8)$$

Здесь интегрирование правой части исходного дифференциального уравнения проведено по интервалу от $t_{n+2}$ до $t_{n+3}$.

Соотношение (8) носит название неявной формулы метода Адамса–Моултона четвертого порядка точности. Поскольку в (8) $f_{n+3}$ зависит от $u_{n+3}$, то эта формула представляет собой неявное соотношение для определения $u_{n+3}$. Вспоминая, что у нас имеется соотношение (5), которое позволит найти указанную величину явным образом, можем скомбинировать две формулы и в результате найти скорректированное значение по неявной формуле (8).

Сдвигая индекс в формуле (5) на три единицы влево по оси натуральных чисел, а в (8) на две единицы в ту же сторону, запишем процедуру предиктор-корректор:

$$\tilde{u}_{n+1} = u_n + \frac{h}{24}\left(55 f_n - 59 f_{n-1} + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}\right), \qquad (9)$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{24}\left(9 f_{n+1}(\tilde{u}_{n+1}) + 19 f_n - 5 f_{n-1} + f_{n-2}\right). \qquad (10)$$

Здесь волной отмечено значение расчетной величины, найденное на этапе корректор.

**2. Схемы с переменным шагом.** При решении задач молекулярной динамики очень важным является контроль точности вычислений, так и решение проблем экономии расчетного времени. При наборе статистики прохождения молекул через нанопористые мембраны начальный этап движения молекул, где отсутствует ван-дер-ваальсовское притяжение со стороны атомов структуры, может быть рассчитан с относительно крупным шагом по времени. Еще более остро стоит проблема повышения точности расчетов за счет уменьшения шага интегрирования в задаче раскрутки фуллеренов электромагнитными полями. В этой задаче известен момент начала электромагнитного воздействия.

Как мы видели аппроксимирующий полином Лагранжа (3),(4) может быть непосредственно применен для случая переменного шага по времени. Однако в этом случае изменяются коэффициенты в расчетных формулах. Более того, эти коэффициенты будут меняться от задачи к задаче. Для достижения некоторой универсальности в построении многошаговых схем с переменным шагом по времени сведем задачу построения схемы к уже решенной с помощью преобразования переменных. В сущности, этот прием эквивалентен изменению правой части исходного дифференциального уравнения. Пусть имеется зависимость:

$$t = t(\tau), \qquad (11)$$

а также существует невырожденная обратная зависимость:

$$\tau = \tau(t). \qquad (12)$$

Если кроме того функции (11) и (12) гладкие, то мы можем сделать следующее преобразование исходного уравнения:

$$\frac{du}{d\tau}\left(\frac{d\tau}{dt}\right) = f(t,u). \qquad (13)$$

Последнее уравнение можно переписать в следующей форме:

$$\frac{du}{d\tau} = \chi(\tau) f(t(\tau), u(t(\tau))) = g(\tau, u(\tau)), \qquad (14)$$

где

$$\chi(\tau)=\frac{dt(\tau)}{d\tau},\ g(\tau,u)=\chi(\tau)f(t(\tau),u)\,. \qquad (15)$$

Для решения уравнения (14) мы можем использовать описанные выше схемы постоянного шага, которые будут отличаться лишь способом вычисления правой части. Схема предиктор–корректор в этом случае будет выглядеть следующим образом:

$$\tilde{u}_{n+1}=u_n+\frac{\Delta\tau}{24}\left(55g_n-59g_{n-1}+37g_{n-2}-9g_{n-3}\right), \qquad (16)$$

$$u_{n+1}=u_n+\frac{\Delta\tau}{24}\left(9g_{n+1}(\tilde{u}_{n+1})+19g_n-5g_{n-1}+g_{n-2}\right). \qquad (17)$$

В этой схеме $\Delta\tau=const$, однако $h-$шаг по времени будет переменным.

**3. Результаты расчетов.** В качестве тестового примера была рассмотрена следующая задача Коши:

$$\begin{cases} u'(t)=-\dfrac{t\sin\dfrac{1}{|t|}e^{-\cos\frac{1}{|t|}}}{|t|^3},. \\ u(-1)=\sin 1\cdot e^{-\cos 1}; \end{cases} \qquad (18)$$

Аналитическое решение для нее имеет вид:

$$u(t)=e^{-\cos\frac{1}{|t|}}. \qquad (19)$$

На рисунке 1 показано аналитическое распределение (19). Видно, что около нуля имеется особенность, связанная с бесконечными производными по времени.

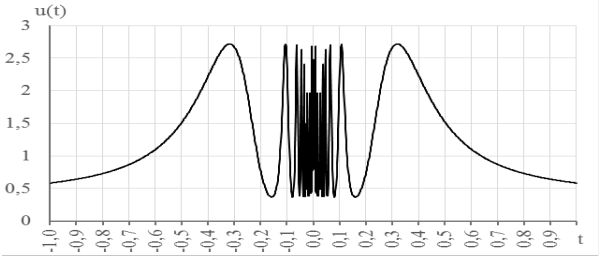


Рис. 1. Аналитическое решение тестовой задачи Коши

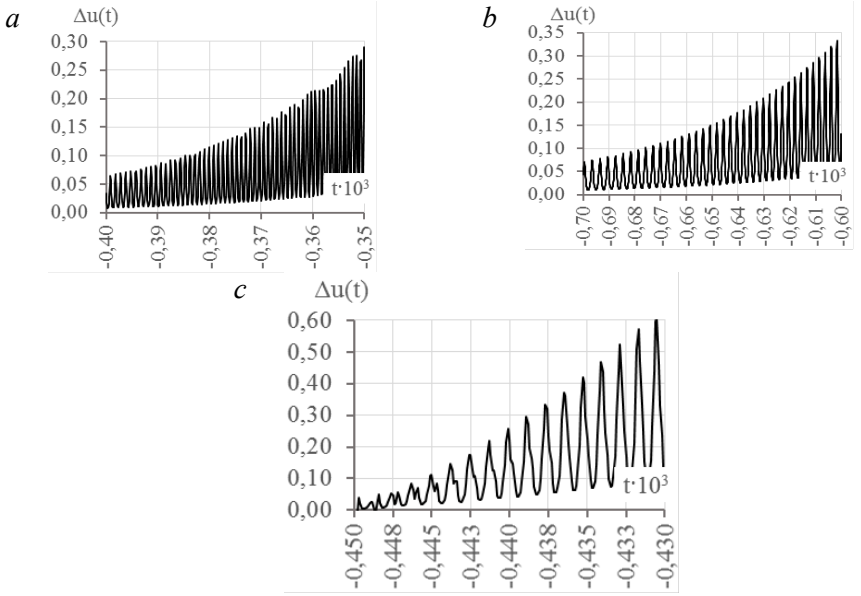


Рис. 2. Разность аналитического и численного решений:
*a* – относится к численной схеме Рунге–Кутты, *b* – Адамса–Башфорта,
*c* – предиктор-корректор

Представленные расчеты выполнены с постоянным шагом по времени $\Delta t = 2 \cdot 10^{-7}$. Расчеты с уменьшающимся шагом позволяют продвинуться к особенности заметно ближе, имея при этом приемлемую точность вычислений.

**Заключение.** Аналитическое решение (19) хоть и ограничено в окрестности нуля, но его производные стремятся к бесконечности при стремлении аргумента к нулю. Пройти пошаговым методом всю кривую, представленную на рисунке 1 по-видимому невозможно. Поэтому представленная функция является жестким “ситом” для всех тестируемых схем численного решения задачи Коши. Все рассмотренные схемы имеют теоретический четвертый порядок точности. Практические расчеты показали, что все они расходятся с аналитическим решением, начиная с разных моментов времени (рисунок 2). Решение, полученное схемой Адамса–Башфорта, начинает отклоняться от аналитического на более раннем шаге по времени, однако при этом время расчета самое короткое. Сделанные аналитические преобразования независимой переменной могут только увеличить качество расчетов

посредством увеличения точности на участках больших градиентов. Однако число вычислительных операций при этом увеличивается.

## Литература


1. Takeda K., Shiraishi K. Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite // Physical Review B. 1994. Vol. 50. P. 14916–14922.
2. Xu Y., Yan B. H., Zhang H. J., Wang J., Xu G., Tang P. Z., et al. Large-gap quantum spin Hall insulators in thin films // Physical Review Letters. 2013. Vol. 111. Article number 136804.
3. Ruiz A., Hernandez-Rojas J., Breton J., Gomez Llorente J. M. Low-temperature dynamics and spectroscopy in exohedral rare-gas C 60 fullerene complexes // The Journal of Chemical Physics. 2011. Vol. 114. № 12. P. 5156–5163. DOI: 10.1063/1.1350918.
4. MacKenzie R. C. I., Frost J. M., Nelson J. A numerical study of mobility in thin films of fullerene derivatives // 2010. The Journal of Chemical Physics. Vol. 132. Article number 064904. DOI: 10.1063/1.3315872.
5. Shunaev V. V., Glukhova O. E. Super square carbon nanotube networks: mechanical properties and electric conductivity // Materials Letters. 2019. Vol. 9. №1. P. 136–141. DOI: 10.22226/2410-3535-2019-1-136-141.



*Бубенчиков Алексей Михайлович*, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета, 634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

*Челнокова Анна Сергеевна*, аспирант, ассистент кафедры теоретической механики Томского государственного университета, 634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

*Карастоянов Димитар*, заведующий отделом встраиваемых интеллектуальных технологий Института информационных и коммуникационных технологий БАН, Болгария, 1113, София, ул. акад. Г. Бончева, 25а. E-mail: dimikara@abv.bg

*Bubenchikov Alexey Mikhailovich*, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Leading Researcher, TSU

*Chelnokova Anna Sergeevna,* Graduate Student, Assistant, TSU

*Dimitar Karastoyanov*, Head of Department, IICT BAN

# СОДЕРЖАНИЕ

## ГЕОМЕТРИЯ ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ МНОГООБРАЗИЙ



## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ