На правах рукописи

Юй Ин 余英

Юй Ин

Численно-аналитические методы в задачах математического моделирования

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2020

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов».

Научный руководитель:	профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов», доктор физико-математических наук, профессор **Севастьянов Леонид Антонович**
Официальные оппоненты:	**Блинков Юрий Анатольевич,** доктор физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», заведующий кафедрой математического и компьютерного моделирования
	Цирулев Александр Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», заведующий кафедрой математических методов современного естествознания
	Васильев Николай Николаевич, кандидат физико-математических наук, ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)», старший научный сотрудник

Защита состоится 26 июня 2020 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета ПДС 0200.001 при Российском университете дружбы народов по адресу: г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, ауд. 214.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке РУДН.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, ученому секретарю диссертационного совета ПДС 0200.001.

Автореферат разослан «   » мая 2020 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
ПДС 0200.001,
канд. физ.-мат. наук, доц. Демидова А. В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Современные методы математического моделирования различных, и, во многих случаях, взаимосвязанных физических процессов и явлений, требуют вычислительных ресурсов, которых, как правило, не хватает для большинства актуальных задач, несмотря на впечатляющий прогресс в развитии высокопроизводительных вычислительных систем, достигнутый за последнее десятилетие.

Особенность математических моделей, учитывающих существенные стороны и характеристики физических процессов и явлений, состоит в том, что они обладают большим числом симметрий и законов сохранения, а также целым рядом качественных свойств, установленных при теоретических исследованиях этих процессов. В таких условиях приобретает особую значимость развитие численных методов дискретизации модельных дифференциальных уравнений, которые, помимо достаточной вычислительной точности, должны обеспечивать наследование фундаментальных свойств исходных дифференциальных уравнений, наиболее важными из которых являются симметрии и законы сохранения.

Исследования в области конечно–разностных аппроксимаций дифференциальных уравнений, наследующих основных свойств последних, насчитывают более чем шестидесятилетнюю историю и активно развиваются в настоящее время. Начало этим исследованиям было положено отечественными математиками и получило дальнейшее развитие в России и за рубежом, см. обзор (K. Lipnikov, G. Manzini, M. Shashkov, 2014). Дискретизации, наследующие те или иные свойства непрерывных (дифференциальных) уравнений и операций над входящими в них зависимыми переменными, получили название «миметических» (mimetic, то есть подражающих) или «совместимых» (compatible). Описание конкретных миметических разностных аппроксимаций и их приложений к моделированию различных физических процессов и явлений хорошо представлено в специальном выпуске Журнала Вычислительной Физики (B. Koren et al., 2014) и монографиях М. Шашкова (M. Shashkov, 1996), Д. Арнольда и др. (D. Arnold, 2006), Л. Бейрао да Вега (L. Beirao da Vega, 2014) и Дж. Кастилло (J. Castillo, 2019). Многочисленные компьютерные эксперименты показали, что миметические разностные схемы лучше соответствуют решениям дифференциальных уравнений, по сравнению со схемами, не являющиеся миметическими, а также облегчают исследование сходимости и устойчивости численных методов решения начальных и краевых задач.

Одной из основных непрерывных моделей является динамическая система, описываемая автономной системой обыкновенных дифференциальных уравнений, то есть системой уравнений вида

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \ldots, x_n), \quad i = 1,2, \ldots n, \tag{1}$$

где t — независимая переменная, обычно интерпретируемая как время, $x_1, \dots, x_n$ — координаты подвижной точки или нескольких точек. В приложениях правые части f_i часто оказываются рациональными функциями координат $x_1, \dots, x_n$ или могут быть сведены к такому виду подходящей заменой переменных.

Такого рода модели описывают многие механические явления, в том числе движения систем взаимодействующих материальных точек и вращение волчка (Голубев В.В., 1953). Более сложные механические модели, содержащие десятки автономных дифференциальный уравнений, приходят из теории движения твердых тел, катящихся по поверхности (Маркеев А.П., 2014). В смежных областях, в том числе биологии, экономике, химической кинетики подобного рода модели встречаются тоже весьма часто, из их числа первой следует называть знаменитую модель «Хищник-Жерта», описывающую широкий спектр явлений, в том числе динамику взаимодействующих биологических популяций (Трубецков Д.И., 2011).

Степень разработанности темы. Стандартные конечно разностные схемы, и в первую очередь явные схемы Эйлера и Рунге-Кутты, не сохраняют алгебраические структуры исходной непрерывной задачи и дают приближенное решение, близкое на рассматриваемом компакте к точному решению, но качественно от него отличное. Идея конструировать разностные схемы, сохраняющие точно интегралы движения динамических систем возникала в конце 1980-х годов, в работах Купера (G.J. Cooper, 1987) и Ю.Б. Суриса (Ю.Б. Сурис, 1988, 1990) пришедших к этой проблемы с разных сторон: Ю.Б. Сурис шел от составления разностных схем для гамильтоновых систем, сохраняющих симплектическую структуру, а Купер — от сохранения интегралов. В итоге было открыто большое семейство схем Рунге-Кутты, сохраняющих все квадратичные интегралы любой динамической системы и симплектическую структуру гамильтонвой системы, см. обзор (J. M. Sanz-Serna, 2016). Все эти схемы не являются явными и поэтому каждый шаг расчета требует решения нелинейной системы алгебраических уравнений. Тем не менее, на эти трудности приходится идти, например, при решении задач небесной механики (Nuan Fang et al., 2017). Эти схемы хорошо зарекомендовали себя в численных экспериментах с гамильтоновыми системами (Геворкян М.Н., 2013).

Следует однако отметить, что в центре внимания исследователей были вопросы сходимости и повышения точности при счете на большие времена, то есть о количественной близости точного и приближенного решений, вопрос же о сохранении других качественных свойств точного решения остался пока не достаточно исследованным; «возможность определить характер динамического процесса, используя лишь грубые вычисления с большим шагом сетки» по симплектической схеме была отмечена в канд. дисс. М.Н. Геворкяна (науч. рук. — Д.С. Кулябов, 2013).

Другим мало исследованным вопросом является конструирование разностных схем, сохраняющих полиномиальных интегралы, порядок которых больше

2. Даже для классической задачи двух тел этот вопрос был решен совсем недавно (Kozlov R., 2007). Тем не менее, этот вопрос является чрезвычайно важным, поскольку закон сохранения энергии дает квадратичный интеграл только в линейных задачах.

Развитие методов конструирования разностных схем, сохраняющих алгебраические интегралы движения динамической системы, тесно связано с вопросом об отыскании алгебраических интегралов динамических систем, который был в центре внимания отечественных математиков XIX - нач. XX веков (Остроградский, Чебышев, Золотарев, Брунс, Ковалевская, Лагутинский), результаты которых известны за рубежом в весьма усеченной форме (V. A. Dobrovol'skij, 1998), и вновь привлек к себе внимание недавно в связи с развитием систем компьютерной алгебры (C. Christopher et al., 2007, F. Winkler, 2015; A. Bostan et al., 2016).

В компьютерной алгебре этот вопрос возникает естественным образом при разработке новых символьных интеграторов. Значительные успехи в разработке символьных интеграторов дифференциальных уравнений 1-го порядка

$$\frac{dx}{f(x,y)} = \frac{dy}{g(x,y)}, \quad f,g \in \mathbb{C}[x,y], \tag{2}$$

то есть динамических систем из $n = 2$ уравнений, связаны с реализацией метода поиска интегрирующего множителя, названного Чеб-Террабом Абаком (E. Cheb-Terrab, 1997). Этот метод позволяет проинтегрировать в символьном виде порядка 87% всех уравнений из справочника Э. Камке (E.S. Cheb-Terrab и T. Kolokolnikov, 2000). Несмотря на этот удивительный успех, Абак не справляется с простейшими тестами и не может найти решение уравнения (2) в алгебраических функциях даже тогда, когда оно заведомо существует в этом классе (Юй Ин и др., 2018).

Это и возвращает нас к классической задаче, состоящей в отыскании всех алгебраических интегралов движения для заданной динамической системы (1). Часто эту задачу связывают с именем Пуанкаре, однако впервые в таком виде она была поставлена в работах Брунса и Кенигсбергера, а в несколько архаической формулировке ее можно усмотреть в переписке Декарта с Дебоном. Для удобства мы будем называть эту задачу задачей Дебона. Следует сразу заметить, что эта задача в столь общей формулировке до сих пор не решена и, более того, нет никаких оснований полагать, что она алгоритмически разрешима.

С другой стороны, как заметил еще Декарт, задача об отыскании всех рациональных интегралов, порядок которых не превосходит заданной границы, может быть сведена методом неопределенных коэффициентов к решению системы нелинейных алгебраических уравнений. Таким образом, для решения задачи об отыскании всех интегралов движения необходимо отыскать оценку сверху для порядков рациональных интегралов движения заданной динамической системы. Этот вопрос был в центре внимания на рубеже XIX - XX веков, однако и сейчас все существующие методы отыскания рациональных интегралов движения подразумевают, что помимо динамической системы пользователь должен задать и верхнюю границу для порядка искомых рациональных интегралов движения (A. Bostan et al., 2016).

В нач. XX века М.Н. Лагутинский предложил более эффективный метод отыскания интегралов движения, порядки которых не превосходит заданного числа, основанный на теории определителей. Спустя почти сто лет, этот метод был вновь открыт J. Vitório Pereira (C. Christopher et al., 2007), а к работам М.Н. Лагутинского всеобщее внимание привлек Ж.-М. Стрельцын (В.А. Добровольский и др., 1998). М.Д. Малых (2016) заметил, что теория, развитая М.Н. Лагутинским, — очень общая и касается вообще дифференциальных колец с однозначным разложением на множители, и на ряде конференций по компьютерной алгебре (PCA'2016, Санкт-Петербург; CA'2016, Москва; Семинар по компьютерной алгебре в Дубне, 2016) представил ее реализации в системе компьютерной алгебры Sage (`www.sagemath.org`) — пакет `Lagutinski for Sage` (ver. 1.0, 2016). Вскоре возможность вычисления определителей Лагутинского была добавлена в систему `Math. Partner`, разрабатываемой Г.И. Малашонком и его учениками (С. А. Глазков, 2018).

Целью данной работы является разработка методов отыскания рациональных интегралов движения динамических систем и конструирования разностных схем, сохраняющих все найденные алгебраические интегралы.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- Изложить систематически метод Лагутинского как метод отыскания частных и общих интегралов в дифференциальных кольцах, на его основе разработать и обосновать новые необходимые условия существования рационального интеграл хотя бы для некоторых классов дифференцирований.
- Протестировать реализацию метода Лагутинского — пакет Lagutinski for Sage (ver. 1.0, Малых М.Д., 2016), разработать практические рекомендации по оптимизации вычислений и применению этого пакета, дополнить пакет новыми функциями, в том числе проверкой выполнения оригинальных необходимых условий существования интегралов.
- Систематизировать известные методы конструирования разностных схем, сохраняющие те или иные интегралы движения заданной динамической системы.
- Теоретически и в серии компьютерных экспериментов в Sage исследовать сохранение периодического характера осцилляции динамических систем при дискретизации, точно сохраняющей квадратичные интегралы движения.
- В серии компьютерных экспериментов в Sage исследовать возможности конструирования симплектических схем Рунге-Кутты порядка p с s стадиями, в том числе описания алгебраических множеств, которым

принадлежат коэффициенты схем, используя инструментарий для работы с идеалами полиномиальных колец в Sage.

Научная новизна:

1. Введено понятие сжимающего дифференцирования и строго доказаны необходимое условие существования рационального интеграл для этого класса дифференцирований. На его основе найден новый достаточный критерий отсутствия алгебраического интеграла дифференциального уравнений, проверка выполнения этого критерия описана в виде алгоритма и реализована как функция в Sage.
2. Впервые разработан и распараллелен алгоритм вычисления интегралов движения, представимых в виде отношения малочленов (многочленов заданной степени, являющихся линейной комбинацией малого числа M мономов)
3. Проведено оригинальное исследование сохранения периодического характера осцилляции динамических систем при дискретизации, точно сохраняющей квадратичные интегралы движения, в том числе при расчетах по схеме средней точки. Для его обеспечения разработан новый алгоритм для организации счета по неявной схеме средней точки, в котором переход со слоя на слой не требует численного решения систем нелинейных алгебраических уравнений.
4. Проведено оригинальное исследование алгебраических множеств, которым принадлежат коэффициентов явных и симплектических схем Рунге-Кутты.

Теоретическая и практическая значимость Разрабатываемые численные методы найдут применение в теоретических исследованиях динамических систем, богатых законами сохранения, но тем не менее не сводящихся к квадратурам. Результаты диссертации могут быть использованы при создании учебных курсов по теме «Дифференциальные уравнения» и «Компьютерная алгебра».

Методология и методы исследования. В диссертации использовались методы теории полиномиальных колец и их реализации в системе компьютерной алгебры Sage (`www.sagemath.org`), метод конечных разностей в его применении к динамическим системам. Проведение компьютерных экспериментов в среде Sage позволяет использовать готовые и надежные инструменты теории полиномиальных колец и сочетать их с оригинальными реализациями численных методов, написанными на языке Python.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Проведено комплексное тестирование пакета Lagutinski for Sage (ver. 1.0, Малых М.Д., 2016) на задачах из задачника А.Ф. Филлипова.
2. Проведена оптимизация пакета `Lagutinski for Sage`, в частности разработан и распараллелен алгоритм вычисления интегралов движения, представимых в виде отношения малочленов, пакет `Lagutinski for Sage` дополнен новыми функциями:

– вычисление значения определителя Лагутинского в случайной точке,
– отыскание интегралов движения, представимых в виде отношения малочленов,
– проверкой необходимых условий существования интегралов сжимающих дифференциалов.

3. Найдено и обосновано необходимое условие существования рационального интеграл для одного класса дифференцирований, для которых в диссертации предложено название сжимающих дифференцирований. На его основе найден новый достаточный критерий отсутствия алгебраического интеграла дифференциального уравнений, проверка выполнения этого критерия описана в виде алгоритма и реализована как функция в Sage.
4. На примере двух моделей — линейный и эллиптический осцилляторы — теоретически и в серии численных экспериментов исследовано сохранение периодического характера осцилляции динамических систем при дискретизации, точно сохраняющей квадратичные интегралы движения, в том числе при расчетах по схеме средней точки.
5. Для небольших значений s и p исследованы в Sage многообразия Бутчера — алгебраические множества в аффинном пространстве коэффициентов явных, неявных и симплектических схем Рунге-Кутта заданного числа стадий s и порядка аппроксимации p.

Достоверность Обоснованность результатов диссертации опирается на теоретические исследования, все оригинальные теоремы, используемые в тексте диссертации, и их доказательства были опубликованы в рецензируемых журналах. Везде, где это возможно, проводилось сравнения полученного численного решения с аналитическими решениями, что подтверждает достоверность результатов. Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на международных конференциях:

1. «Mathematical Physics and Mathematical Modelling» ’2018, МИФИ, Москва, url: `mpmm.xyz`,
2. «Computer Algebra in Scientific Computing» ’2019, Москва, url: `www.casc-conference.org`
3. «Numerical Methods and Applications» ’2018, Боровец, Болгария, url: `nma18.fmi.uni-sofia.bg`,
4. «Polynomial Computer Algebra» ’2018 и ’2019, ПОМИ, Санкт-Петербург, url: `pca-pdmi.ru`,

всероссийских конференциях с международным участием «Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems» ’2018 и ’2019, РУДН, а также на научном семинаре по вычислительной и прикладной математике ЛИТ ОИЯИ, Дубна, ноябрь 2019 г.

Личный вклад. Юй Ин, работая в коллективе соавторов, самостоятельно разработала и реализовала ряд основных функций пакета Lagutinski for Sage, провела серию численных экспериментов в Sage.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 печатных изданиях, 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 2 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 5 — в тезисах докладов.

Содержание работы

Во **Введении** обосновывается актуальность разработки методов отыскания алгебраических интегралов движения динамических систем и конструирования разностных схем, сохраняющих все найденные алгебраические интегралы, приводится краткий обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Математическая модель, рассматриваемая в диссертации, — динамическая система (1) — введена в **первой главе**, там же приведены необходимые примеры иллюстрирующие важность этой модели для механики и физики. Поскольку такого рода модели учитывают лишь основные процессы, вовлеченные в рассматриваемое явление, они богаты разного рода симметриями и законами сохранения, в центре внимания далее оказывается задача об отыскании алгебраических интегралов движения такой системы.

Вопрос о том, допускает ли заданное дифференциальное уравнение

$$\frac{dx}{f_1(x,y)} = \frac{dy}{f_2(x,y)}, \quad f_1, f_2 \in \mathbb{C}[x,y].$$

рациональный интеграл возник еще в 1630-х годах, когда Дебон (Florimond de Beaune) предложил Декарту несколько «обратных задач на касательные», поэтому и более общая задача об отыскании всех алгебраических интегралов заданной динамической системы называется в диссертации задачей Дебона. Интерес к этой задаче то угасал, то возникал вновь. На рубеже XIX-XX веков он был обусловлен успехами в доказательстве отсутствия новых алгебраических интегралов в задаче многих тел, а на рубеже XX-XXI веков — разработкой алгоритмов аналитического решения дифференциальных уравнений для систем компьютерной алгебры.

Прежде всего следует отметить, что современные системы компьютерной алгебры, напр., Maple, не умеют распознавать дифференциальные уравнения, имеющие алгебраические интегралы. В первой главе диссертации представлены результаты компьютерных экспериментов, подтверждающие это. В качестве основного метода отыскания алгебраических интегралов в диссертации избран метод М.Н. Лагутинского (1912 г.).

Пусть R — кольцо с дифференцированием D и полем констант k. Счетное упорядоченное множество B элементов m_j кольца R будем называть базисом кольца, если

1. любой элемент кольца R можно представить как линейную комбинацию конечного числа элементов множества B с постоянными коэффициентами,
2. произведение любых двух элементов множества B принадлежит B, и следует строго после обоих сомножителей, т.е. $m_i m_j = m_n$ и n строго больше чисел i и j

На базисе введем отношение порядка: неравенство $m_i < m_j$ означает, что $i < j$ и примем, что запись

$$u = o(m_i)$$

означает, что в представлении элемента u кольца R в виде линейной комбинации базисных элементов присутствуют базисные элементы, номера которых строго больше i. Порядком элемента u относительно базиса B будем называть наибольший из номеров входящих в его выражение базисных элементов.

Составим бесконечную матрицу, первой строкой которой служит

$$m_1, m_2, \ldots,$$

второй строкой — производная первой

$$Dm_1, Dm_2, \ldots,$$

третьей — вторая производная первой

$$D^2 m_1, D^2 m_2, \ldots,$$

и так до бесконечности. Угловой минор n-го порядка этой матрицы будем обозначать как Δ_n и называть определителем Лагутинского n-го порядка.

Частным интегралом (а также многочленом Дарбу, если R — полиномиальное кольцо) будем называть всякий непостоянный элемент φ кольца R, производная $D\varphi$ которого делится на сам элемент φ, то есть найдется такой элемент λ кольца R, что

$$D\varphi = \lambda\varphi.$$

Общим интегралом этого дифференцирования будем называть пару линейно независимых над полем k элементов ψ_1, ψ_2 этого кольца, удовлетворяющую равенству

$$\psi_1 D\psi_2 = \psi_2 D\psi_1. \tag{3}$$

Согласно изысканиям М.Н. Лагутинского,

1. частный интеграл, порядок которого не превосходит некоторое натуральное число N, делит определитель Δ_N нацело,

2. общий интеграл порядка N существует тогда и только тогда, когда $\Delta_N = 0$, при этом интеграл можно вычислить как отношение соответствующих миноров этого определителя.

Метод М.Н. Лагутинского позволяет вычислять в полиномиальных кольцах определители Лагутинского, многочлены Дарбу и рациональные интегралы движения, порядок которых не превосходит заданного числа.

Метод Лагутинского хорошо согласуется с концепцией работы с кольцами, принятой в системе компьютерной алгебры Sage. Реализация этого метода — существенно переработанный и дополненный диссертантом пакет Lagutinski for Sage (ver. 1.0 – Малых М.Д., 2016) — представлена во второй главе. В целях тестирования этого пакета было выполнено оригинальное исследование дифференциальных уравнений из задачника А.Ф. Филиппова. Из сотых номеров это задачника было выделено 21 уравнение, допускающие алгебраические интегралы. Для двух третей из них $\Delta_{10} = 0$ и поэтому они легко интегрируются по методу Лагутиского. Из оставшихся 7 номеров большинство удается проинтегрировать, повысив порядок определителя. Этим путем не удается проинтегрировать лишь два номера — №№ 116 и 187, вычисления застревают на порядке $N = 15$. Первое из этих уравнений имеет интеграл, представимый в виде произведения степеней двух линейных функций. Интеграл второго уравнения оказывается четырехчленом (малочленом).

Таким образом, ключевой проблемой оказалось вычисление определителей большого порядка, приводившее к непомерным затратам ресурсов компьютера. Поэтому пакет был дополнен новыми функциями — вычислением определителя Лагутинсткого в случайной точке и отысканием интегралов, для представления которых требует малое число мономов (малочленов). Разработанный на основе теории Лагутинского метод отыскания таких интегралов допускает естественное распараллеливание, которое было реализовано стандартными средствами Sage. После названных доработок пакет Lagutinski for Sage (ver. v. 1.6 — Юй Ин, 2019) стал справляться со всеми тестовыми задачами.

На основе этих экспериментов, мы рекомендуем пользователю, желающему решать задачи из курса «Дифференциальных уравнений», следующую стратегию применения пакета Lagitinski for Sage.

1. Вычислить Δ_{55} в случайно выбранной точке. Если $\Delta_{55} \neq 0$, то интегральные кривые имеют 10-й порядок и более или вовсе являются трансцендентными. Если $\Delta_{55} = 0$, то интегральные кривые вероятно имеют порядок, не превышающий 9-ти.
2. Если $\Delta_{55} = 0$, вычислить Δ_{10} как функцию x и y. Если Δ_{10} тождественно равен нулю, то интегральные кривые имеет порядок, не превышающий 3-х, и они находятся по методу Лагутинского без существенных затрат ресурсов компьютера.
3. Если Δ_{10} не равно тождественно нулю, пытаться вычислить Δ_N, постепенно повышая N до тех пор, пока не получится нуль или исчерпаются ресурсы.

4. Если вычисление $\Delta_N (10 < N < 55)$ оказывается слишком затратным, мы можем попытаться использовать `lagutinski_micromonomial`.

Последовательность определителей

$$\Delta_1, \Delta_2, \dots,$$

обрывается в том и только в том случае, когда существует общий интеграл, однако проверить это условие конструктивно не удается. Более того, нерешенной проблемой остается отыскание оценки для степени рационального интеграла, отыскание которой позволило бы по методу Лагутинского отыскать все алгебраические интегралы заданной динамической системы. На рубеже XIX-XX веков эту оценку активно искали, однако метод, предложенный Пуанкаре (Poincaré, 1891), применим лишь при некоторых дополнительных и трудно проверяемых на практике условиях по методу Пуанкаре.

Во второй половине второй главе диссертации исследован один класс дифференцирований — сжимающие дифференцирования, для которых теория Лагутинского позволяет указать необходимые условия существования интегралов.

Определение 1. Дифференцирование D кольца A назовем сжимающим, если существует такой базис $B = \{m_1, m_2, \dots\}$, в котором

$$Dm_i = c_i m_i + o(m_i). \tag{4}$$

Всякий базис, в котором действие дифференцирования удовлетворяет условиям 4, будем называть сжимаемым дифференцированием D, а числа c_i — показателями сжатия в базисе B.

Для сжимающего дифференцирования D определитель Лагутинского допускает разложение вида

$$\Delta_n = W(c_1, c_2, \dots, c_n) \prod_{i=1}^{n} m_i + o\left(\prod_{i=1}^{n} m_i\right),$$

где W — определитель Вандермонда. Поэтому для существования интеграла необходимо выполнение условия

$$W(c_1, c_2, \dots, c_n) = 0$$

для достаточно большого n. Отсюда выводится следующий необходимый критерий существования общих интегралов.

Теорема 1. Сжимающее дифференцирование полиномиального кольца R допускает общий интеграл только в том случае, когда среди показателей сжатия имеются равные.

Теорема 1 очень удобно прикладывается к вопросу об отыскании алгебраического интеграла дифференциального уравнения

$$(ay + cx + \dots)dx + (bx + \dots)dy = 0, \quad a,b,c \in \mathbb{C}, \tag{5}$$

которое вслед за Э. Айнсом (Ince, п. 12.6.) будем называть уравнением Брио и Буке. Интеграл этого уравнения является также интегралом дифференцирования

$$D = (ay + cx + \dots)\frac{\partial}{\partial y} - (bx + \dots)\frac{\partial}{\partial x}, \tag{6}$$

которое сжимает glex-базис

$$B = \{1, y, x, y^2, xy, x^2, \dots\}.$$

Отсюда, как следствие теоремы 1, сразу имеем:

Теорема 2. Дифференциальное уравнение Брио и Буке (5) может иметь рациональный интеграл в $k(x,y)$ только в том случае, когда a и b линейно зависимы над полем $\mathbb{Q}$.

Эта теорема позволяет предложить **алгоритм** исследования отсутствия рациональных интегралов у дифференциальных уравнений вида

$$pdx + qdy = 0,$$

рассмотрев одну неподвижную точку. Чтобы не рассматривать отдельно случаи, когда p,q — многочлены относительно x,y с числовыми коэффициентами или с буквенными параметрами, мы рассматриваем их как многочлены над полем k, а искомый интеграл — как рациональную функцию над этим полем. Алгоритм состоит в следующем:

1. найти неподвижную особую точку (x_0,y_0) дифференциального уравнения,
2. выполнить линейную подстановку

   $$\begin{cases} x = \xi + \alpha\eta, \\ y = \eta, \end{cases}$$

   содержащую параметр α, в 1-форме

   $$pdx + qdy = (a_{11}\xi + a_{12}\eta + \dots)d\xi + (a_{21}\xi + a_{22}\eta + \dots)d\eta,$$

3. определить значение параметра α из квадратного уравнения $a_{22} = 0$,
4. проверить, являться ли при таком значении α коэффициенты a_{12} и a_{21} линейно зависимыми над $\mathbb{Q}$.

Если нет, линейно независимы, то такового не существует (success). В противном случае, мы ничего сказать не можем (fail).

Описанный алгоритм реализован в виде функции `lagutinski_ab` в пакете Lagutinski, эта функция по заданным p и q возвращает `true`, если в первой неподвижной точке упомянутые выше величины линейно зависимы. В качестве примера показано, что уравнение

$$(2 - x^2 - y^2)dx + (x - y)dy = 0,$$

о котором Maple не может сказать ничего определенного, не допускает рационального интеграла в поле $\mathbb{C}(x,y)$.

Третья глава посвящена использованию интегралов движения при численном интегрировании динамических систем, а именно разработке методов конструирования разностных схем, сохраняющих эти интегралы, и методов организации вычислений по этим схемам.

Всякая разностная схема решения системы уравнений (1) описывает переход от значения x, взятый в некоторый момент времени t, к значению x, взятому в следующей момент времени $t + \Delta t$. Эти новые значения будем далее обозначать как $\hat{x}$. Для введения понятия порядка аппроксимации используются разложения в ряд Пюизё по степеням Δt.

Симплектические схемы Рунге-Кутты, в том числе простейшая из них — схема средней точки

$$\frac{\hat{x} - x}{\Delta t} = f\left(\frac{\hat{x} + x}{2}\right),$$

сохраняют все квадратичные интегралы движения. Прежде всего в диссертации проведены теоретические изыскания и численные эксперименты со схемой средней точки, цель которых — выяснить, сохраняются ли качественные свойства решений, прежде всего периодичность движения, при счета по таким схемам.

Для линейного осциллятора и системы связанных линейных осцилляторов строго доказано существование бесконечного множества значений для шага Δt, при которых приближенное решение представляет собой периодическую последовательность чисел. При таких шагах приближенное решение на фазовой плоскости описывает правильный многоугольник (который является дискретным аналогом замкнутой фазовой траектории), а период приближенного решения, после домножения на шаг по времени, отличается от периода точного решения на величину, пропорциональную Δt^2. Указанное множество значений для шага Δt имеет одну предельную точку $\Delta t = 0$, причем в этом пределе период приближенного решения сходится к периоду точного решения.

Обобщение этих теоретических результатов на случай нелинейного (эллиптического) осциллятора

$$\dot{p} = qr, \quad \dot{q} = -pr, \quad \dot{r} = -k^2 pq \tag{7}$$

оказалось затруднено тем обстоятельством, что схема средней точки не является явной и переход со слоя на слой требует решения системы нелинейных уравнений. Вообще говоря, ошибка, совершаемая при решении такого рода систем может перекрыть все преимущества консервативной схемы.

Традиционный путь организации вычислений по неявным схемам — численное решение систем алгебраических уравнений на каждом шаге. На практике для этого применяются итерационные методы с фиксированным числом итераций и без оценки ошибки, демонстрирующие вполне приемлемые результаты.

Использование Sage позволяет подойти к организации вычислений иначе, используя технику базисов Гребнера, и разработать новый алгебраический **алгоритм** вычисления приближенного решения системы (7) по схеме средней точки. Этот алгоритм состоит в следующем.

– 1-ый этап (символьный анализ разностной схемы): найти уравнения вида

$$P(\hat{p}, p,q,r, \Delta t) = 0,\ Q(\hat{q}, p,q,r, \Delta t) = 0,\ R(\hat{r}, p,q,r, \Delta t) = 0,$$

следующие из уравнений схемы средней точки.

– 2-ой этап (вычисления с плавающей запятой): для перехода со слоя на слой решить три несвязанных уравнения для отыскания $\hat{p}$, $\hat{q}$, $\hat{r}$ и отобрать корни, наиболее близкие к значениям p,q,r на предыдущем слое.

Достоинством этого алгоритма является то, что система нелинейных уравнений сводится к одному уравнению 5-ой степени, ошибку в решении которого можно считать близкой к ошибке округления. Вопрос о прецизионном решении алгебраических уравнений с вещественными коэффициентами в настоящее время обсуждается на всех конференциях по численным методам и компьютерной алгебре (NMA-2018,CASC-2019).

Проведена серия экспериментов, подтверждающая теоретические выводы из теоремы Купера, в частности показано сохранение амплитуды колебаний при больших временах.

Второй вопрос, рассмотренный в третьей главе, — конструирование симплектических разностных схем Рунге-Кутты. Хорошо известно, что коэффициенты схемы Рунге-Кутты с s стадиями и порядком аппроксимации p не определяются однозначно. В диссертации предложено рассматривать коэффициенты схемы как точки многообразия в аффинном пространстве коэффициентов. Для таких многообразий предложено название — многообразия Бутчера и обозначения $E(s,p)$ — для явных схем, $V(s,p)$ — для симплектических.

В серии экспериментов исследованы многообразия Бутчера для различных, хотя и не больших по величине значений числа стадий s и порядка аппроксимации p. Для исследования использованы алгоритмы для исследования идеалов и кривых, реализованные в Sage. В подавляющем большинстве случаев непустые многообразия с наибольшим из возможных при заданном s порядков p являются рациональными кривыми, что позволяет строить бесконечно много различных схем Рунге-Кутты с одними и теми же значениями s и p, но различными рациональными коэффициентами схемы. Однако был найден и случай, когда многообразие Бутчера оказывается эллиптической кривой, поэтому при больших s и p эти многообразия перестают быть рациональными.

Следует подчеркнуть, что до сих пор используются лишь некоторые точки найденных кривых Бутчера, причем далеко не всегда выбираются рациональные точки.

Условия симплектичности были выписаны явно в работах Ю.Б. Суриса, а условия аппроксимации, напротив, имеют в общем случае слишком сложную форму. Поэтому для проведения численных экспериментов был разработан и реализован в системе Sage оригинальный алгоритм составления уравнений, выражающих условие аппроксимации дифференциального уравнения с порядком не ниже p.

В **Заключении** приведены основные результаты работы, которые состоят в следующем:

Настоящее диссертационное исследование было посвящено разработке методов

1. отыскания алгебраических интегралов движения динамических систем и
2. конструирования разностных схем, сохраняющих все найденные алгебраические интегралы.

Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

– Изложен систематически метод Лагутинского отыскания частных и общих интегралов в дифференциальных кольцах, на его основе разработаны и обоснованы новые необходимые условия существования рационального интеграл для одного класса дифференцирований — сжимающих дифференцирований. На его основе найден новый достаточный критерий отсутствия алгебраического интеграла дифференциального уравнений, проверка выполнения этого критерия описана в виде алгоритма и реализована как функция в Sage.
– Протестирована реализация метода Лагутинского — пакет Lagutinski for Sage (ver. 1.0, Малых М.Д., 2016), даны практические рекомендации по оптимизации вычислений и применению этого пакета, сам пакет дополнен новыми функциями, в том числе проверкой выполнения оригинальных необходимых условий существования интегралов.
– Систематизированы известные методы конструирования разностных схем, сохраняющие те или иные интегралы движения заданной динамической системы.
– Теоретически и в серии компьютерных экспериментов в Sage на примере двух моделей — линейного и эллиптического осцилляторов — исследовано сохранение периодического характера осцилляции динамических систем при дискретизации, точно сохраняющей квадратичные интегралы движения.

– При малых значениях чисел s и p исследованы алгебраические множества, которым принадлежат коэффициентов явных и симплектических схем Рунге-Кутты, — многообразия Бутчера. Показано, что при фиксированном числе стадий и максимально возможном значении p симплектические многообразия Бутчера имеют размерность 0, то есть являются конечными множествами. Проведено сравнение схем, коэффициенты которых принадлежат этим множествам, со схемами, находящимися в постоянном употреблении.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Малых М. Д.*, *Ин Ю.* Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика, информатика, физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 285—291.
2. *Ying Y.* The symbolic problems associated with Runge-Kutta methods and their solving in Sage // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2019. — Vol. 27, no. 1. — P. 33—41.
3. On the properties of numerical solutions of dynamical systems obtained using the midpoint method / V. P. Gerdt [et al.] // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2019. — Vol. 27, no. 3. — P. 242—262.
4. Finite Difference Schemes and Classical Transcendental Functions / E. A. Ayryan [и др.] // International Conference on Numerical Methods and Applications. Т. 11189. — Berlin, Germany : Springer, 2019. — С. 235—242. — (Lecture Notes in Computer Science).
5. On Explicit Difference Schemes for Autonomous Systems of Differential Equations on Manifolds / E. A. Ayryan [и др.] // International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing. Т. 11661. — Berlin, Germany : Springer, 2019. — С. 343—361. — (Lecture Notes in Computer Science).
6. *Ин Ю.* Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка // Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем. Материалы Всероссийской конференции с международным участием. Москва, РУДН, 16–20 апреля 2018 г. — Москва : РУДН, 2018. — С. 416—418.
7. *Malykh M. D.*, *Sevastianov L. A.*, *Ying Y.* Elliptic functions and finite difference method // International Conference «Polynomial Computer Algebra». — St.-Petersburg : VVM Publ., 2018. — P. 66—68.
8. *Malykh M. D.*, *Sevastianov L. A.*, *Ying Y.* The construction of explicit conservative difference schemes for autonomous systems of differential equations // The problems of mathematical physics and mathematical modelling. Moscow, Russia, 25-27 June 2018. Book of abstracts. — Moscow : MEPhI, 2018.

9. *Malykh M. D.*, *Ying Y.* The symbolic problems associated with Runge-Kutta methods and their solving in Sage // Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем. Материалы Всероссийской конференции с международным участием. Москва, РУДН, 15–19 апреля 2019 г. — 2019. — С. 465—467.
10. The symbolic problems associated with Runge-Kutta method / E. A. Ayryan [и др.] // International Conference «Polynomial Computer Algebra». — St.-Petersburg : VVM Publ., 2019. — С. 18—20.

Юй Ин
Численно-аналитические методы в задачах математического моделирования

Рассматривается методы отыскания алгебраических интегралов движения динамических систем и конструирования разностных схем, сохраняющих все найденные алгебраические интегралы. В первой главе сформулирована задача об отыскании алгебраический интегралов, указаны трудности, возникающие при ее решении, описан метод Лагутинского отыскания интегралов и многочленов Дарбу. Во второй главе представлен пакет Lagutinski для системы компьютерной алгебры Sage, в котором реализованы не только вычисление определителей Лагутинского, частных и общих интегралов дифференциальных колец, но и ряд функций, использование которых ускоряет вычисления, а также проверка новых необходимых условий существования рационального интеграла. Третья глава диссертации была посвящена конструированию миметических (консервативных) разностных схем для динамических систем, обладающих законами сохранения, и сравнению свойств точных и приближенных решений, найденных по этим схемам.

Yu Ying
Numerical-analytical Methods in Mathematical Modeling Problems

We consider methods for searching algebraic invariants of dynamical systems and methods for constructing conservative finite-difference schemes that preserve all found quadratic invariants. In the first chapter, the problem of searching algebraic invariants is presented, the difficulties encountered in solving it are indicated, and the Lagutinski method of searching algebraic invariants and Darboux polynomials is described. In the second chapter, the Lagutinski package under computer algebra system Sage is constructed and implemented which includes not only the functions of calculation of Lagutinski determinants, partial and general integrals for differential rings, but also a series of functions to speed up the calculations. At the same time, new necessary conditions for the existence of the rational integral are given. In the third chapter, the construction of mimetic difference schemes for dynamical systems with quadratic invariants and a comparison of the properties of exact and approximate solutions found by these schemes are discussed.

Юй Ин

Численно-аналитические методы в задачах
математического моделирования

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать ___.___._____. Заказ № ____________
Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.
Типография ______________________________________