

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа

Аннотация к дипломной работе

**МЕТОД ЭЛЛИпсоИДАЛЬНЫХ ГАРМОНИК ДЛЯ ЗАДАЧ
ЭЛЕКТРОСТАТИКИ**

Залого Юлия Ивановна

Научный руководитель:
кандидат физ.-мат. наук,
О.А. Лаврова

2017

В дипломной работе 49 страниц, 57 рисунков, 11 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫЕ ГАРМОНИКИ, МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ЗАДАЧА ЭЛЕКТРОСТАТИКИ, КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

В дипломной работе изучается математическая модель для расчета электростатического поля, созданного точечными зарядами внутри молекулы.

Целью дипломной работы является проведение сравнительного анализа метода эллипсоидальных гармоник и метода конечных элементов на основе компьютерного моделирования задачи электростатики.

Для достижения поставленной цели использовались:

- метод эллипсоидальных гармоник;
- метод конечных элементов.

В дипломной работе получены следующие результаты:

- 1) Изучены различные математические модели для сопряженной задачи электростатики для уравнения Пуассона в неограниченной области с точечным зарядом внутри эллипсоидальной молекулы белка.
- 2) Показано на основании тестовых вычислений, что точность полуаналитического метода эллипсоидальных гармоник согласуется с точностью и сходимостью адаптивного метода конечных элементов с апостериорной адаптацией в окрестности точки заряда.

Новизна результатов состоит в реализации вычисления значений потенциала способом, отличным от метода эллипсоидальных гармоник, и проведения сравнения между двумя реализациями.

Дипломная работа носит практический характер. Алгоритм метода эллипсоидальных гармоник может быть реализован для задач электростатики с несколькими точечными зарядами и использован для компьютерного моделирования трехмерных молекулярных систем.

Все результаты дипломной работы получены в соответствии с принятыми в математике правилами. Обоснованность и достоверность полученных результатов обусловлена согласованностью с результатами, известными ранее.

Дипломная работа выполнена автором самостоятельно.

Thesis project is presented in the form of an explanatory note of 49 pages, 57 figures, 11 references, 3 applications.

ELLIPSOIDAL HARMONICS, FINITE ELEMENT METHOD, ELECTROSTATICS PROBLEM, COMPUTER MATHEMATICS, COMPUTATIONAL MATHEMATICS

The research object is to study the mathematical model for calculating the electrostatic field created by point charges inside a molecule.

The aim of the work is to carry out a comparative analysis of the method of ellipsoidal harmonics and the finite element method based on computer simulation of the electrostatics problem.

The following methods were used in the work:

- method of ellipsoidal harmonics;
- finite element method.

The main results of the thesis projects are as follows:

- 1) Various mathematical models were studied for the conjugate electrostatic problem for the Poisson equation in an unbounded domain with a point charge inside the ellipsoidal protein molecule;
- 2) Based on test calculations it was shown in the degree work that the accuracy of the semi-analytical method of ellipsoidal harmonics is consistent with the accuracy and convergence of the adaptive finite element method with a posteriori adaptation in the vicinity of the charge point.

The novelty of the results consists in realizing the calculation of potential values in a way different from the method of ellipsoidal harmonics and making a comparison between the two implementations.

The degree work is of a practical nature. The algorithm of the method of ellipsoidal harmonics can be realized for problems of electrostatics with several point charges and used for computer modeling of three-dimensional molecular systems.

All results of the thesis work are received in accordance with the rules accepted in mathematics. The validity and reliability of the results obtained is due to the results previously known.

The thesis project was done solely by the author.