20. Pandolfi L. Some mathematical methods in the theory of linear control systems (Italian).-Bologna:Pitagora Editrice XII,1986. -295p.
21. Verghese G.C., Levy B.C., Kailath T. A generalized state-space for singular systems // IEEE Trans. Aut. Control.- 1981.- Vol. AC-26, N 4.- P.811-831.

УДК 519.624

И.Ф.Соловьева, ст. преп.

О МЕТОДЕ УНИТАРНОЙ ПРОГОНКИ ДЛЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ О.Д.У. ВТОРОГО ПОРЯДКА С ПОГРАНИЧНЫМ СЛОЕМ

The method of unitary sweep is proposed for solvinq systems of linear ODE of the seconol order with a small parameter at a hiqher deritative. This method allows to reduce a boundary problem to a set of Cauchy problems suitable for calculation.

Граничные задачи с малым параметром при старшей производной для линейных систем о.д.у. второго порядка и с возникающими в их решении пограничными либо внутренними переходными слоями представляют собой математические модели с весьма сложным характером поведения решений и градиентов решений.

Рассмотрим систему линейных о.д.у. второго порядка

$$-\varepsilon y''(x) + A(x)y'(x) + B(x)y(x) = f(x), \quad \alpha \le x \le \beta \tag{1}$$

с пограничным слоем и граничными условиями вида

$$A_1 y'(\alpha) + A_2 y(\alpha) = a, \tag{2}$$

$$B_1 y'(\beta) + B_2 y(\beta) = b \tag{3}$$

в предположении, что $A(x)$, $B(x)$ - произвольные квадратные матрицы порядка $(n \times n)$, элементы которых кусочно-непрерывные функции, зависящие от x, $f:[\alpha,\beta] \to G^n$, A_1, A_2, B_1, B_2 известные квадратные матрицы порядка $(n \times n)$ такие, что прямоугольные матрицы (A_1, A_2) и (B_1, B_2) имеют $\mathrm{rang}[A_1, A_2]$=n, $\mathrm{rang}[B_1 B_2] = n$, $\varepsilon > 0$- фиксированный малый параметр при старшей производной. Требуется определить функцию $y:[\alpha,\beta] \to C^n$ так, чтобы выполнялись равенства (1-3).

Для численного решения системы о.д.у. второго порядка вида (1) с пограничным слоем и граничными условиями вида (2,3) предлагается модификация метода унитарной прогонки [1]. С помощью метода унитарной прогонки система о.д.у. вида (1-3) приводится к совокупности задач Коши, благоприятных в вычислительном отношении. Известно, что в настоящее время для решения задач Коши существует ряд хорошо развитых методик [2]. Установлено, что в зонах пограничных слоев наблюдается быстрый рост решений и особенно градиентов решений . В целях упрощения вычислений , регулирования роста решений и их производных, придания равноправия функциям y(x) и и $y'(x)$ в областях погранслоев вводятся регулирующие множители $M_1(x,\varepsilon)$ и $M_2(x,\varepsilon)$. Предложенная методика позволяет решать широкие классы граничных задач с пограничным слоем и при этом уменьшать те вычислительные трудности, которые присущи традиционным методикам.

Изложим вычислительную схему алгоритма модификации метода унитарной прогонки .

Известно, что в зонах погранслоев наблюдается быстрый рост решений и особенно градиентов решений.

Введем регулирующие множители $M_1(x,\varepsilon), M_2(x,\varepsilon)$ в целях упрощения вычислений. И вместо $y(x)$ и $y'(x)$ будем рассматривать $M_1(x,\varepsilon)y(x)$ и $M_2(x,\varepsilon)y'(x)$, что будет способствовать обеспечению нормального роста регуляризованных таким образом решения системы и его производной.

Введем в рассмотрение вспомогательные вектор - функции $r(x)$ и $s(x)$, определенные на $[\alpha,\beta]$ и матрицы, $W_i(x)$, $i=1,2,3,4$ по правилу:

$$r(x)=W_1^*(x)[M_2(x,\varepsilon)y'(x)]+W_3^*(x)[M_1(x,\varepsilon)y(x)]; \tag{4}$$

$$s(x)=W_2^*[M_2(x,\varepsilon)y'(x)]+W_4^*(x)[M_1(x,\varepsilon)y(x)]; \tag{5}$$

$$W(x)=\begin{bmatrix} W_1(x) & W_2(x) \\ W_3(x) & W_4(x) \end{bmatrix}$$

для $\forall x\in[\alpha,\beta]$ обладала свойством унитарности. Это возможно при выполнении следующих условий:

$$\begin{cases} W_1(x)W_1^*(x)+W_2(x)W_2^*(x)=E. \\ W_3(x)W_3^*(x)+W_4(x)W_4^*(x)=E, \\ W_1(x)W_3{}^*(x)+W_2(x)W_4{}^*(x)=0, \\ W_3(x)W_1^*(x)+W_4(x)W_2^*(x)=0. \end{cases} \tag{6}$$

Из соотношений (4,5) получим формулы для нахождения искомого решения системы и его производной:

$$M_1(x,\varepsilon)y(x)=W_3(x)r(x)+W_4(x)s(x); \tag{7}$$

$$M_2(x,\varepsilon)y'(x) = W_1(x)r(x) + W_2(x)s(x). \tag{8}$$

Переформулируем исходную задачу вида (1-3) в совокупность задач Коши. Получим:

$$W_1' + [A/_{\varepsilon} + (M_2^{-1})^* M_2']W_1 + (M_2^{-1})^* M_1^* W_3 = W_1 G^*; \tag{9}$$

$$W'_3 + (M_1^{-1})^* B^*/_{\varepsilon} M_2{}^* W_1 + (M_1^{-1})^* M_1{}^* W_3 = W_3 G^*; \tag{10}$$

$$r' = Gr - W_1^* M_2 f/_{\varepsilon}. \tag{11}$$

Матрицы $W_1^*(x)$ и $W_3^*(x)$ являются верхней половиной "унитарной" матрицы. А поскольку A_1 и A_2 - любые матрицы, то G_1 и G_2 тоже любые и верхней частью "унитарной " унитарной матрицы быть не могут, т.к. они должны обеспечивать свойство унитарности. Все строки G_1 и G_2 должны быть ортонормальны. Для нахождения начальных условий для полученных уравнений вида (9-11) используем ортонормирование по Шмидту. Получим

$$W_1(\alpha) = V_1^*; \tag{12}$$

$$W_3(\alpha) = V_3^*; \tag{13}$$

$$r(\alpha) = \gamma. \tag{14}$$

Это будет прямой ход метода унитарной прогонки. Решая задачи Коши (9-14) с соответствующими начальными условиями, получим матрицы $W_1(x)$, $W_2(x)$ и вектор-функцию $r(x)$.

Осуществим перенос граничного условия (2) из точки $x=\alpha$ во все остальные точки отрезка $[\alpha, \beta]$ и тогда в конечном итоге получим в точке $x=\beta$ уравнение

$$W_1^*(\beta) M_2(\varepsilon,\beta) y'(\beta) + W_3^*(\beta) M_1(\varepsilon,\beta) y(\beta) = r(\beta)$$

или, что то же самое, $(c_i, z(\beta)) = \delta_i$, $i=1,2,...n$,

где c_i - векторы,образованные из элементов i-го столбца матрицы $[W_1^*(\beta) W_3^*(\beta)]^T$, δ_i - i-я координата вектора $r(\beta)$.

Далее рассмотрим граничное условие (3). Пусть ранг матрицы

$$D_\beta = \begin{bmatrix} W_1^*(\beta) & W_3^*(\beta) \\ B_1 M_2^{-1}(\varepsilon,\beta) & B_2 M_1^{-1}(\varepsilon,\beta) \end{bmatrix} \tag{15}$$

равен $2n$, т.е.

$$D_\beta \neq 0. \tag{16}$$

Условие (16) равносильно однозначной разрешимости системы линейных алгебраических уравнений относительно $M_1 y$ и $M_2 y'$, а значит, и исходной задачи с пограничным слоем вида (1-3).

Для осуществления обратного хода данной модификации метода унитарной прогонки будем вновь использовать процесс ортонормирования по Шмидту. В конечном итоге получим следующие задачи Коши.

$$W'_2+[\frac{A^*}{\varepsilon}+(M_2^{-1})^*(M_2')^*]W_2+(M_2^{-1})^* M_1^* W_4 = \\ = W_1 H^* + W_2 I^*; \tag{17}$$

$$W_4' +(M_1^{-1})^{B^*}/_{\varepsilon}\, M_2{}^* W_4+(M_1^{-1})^*(M_1')^* W_4 = \\ = W_3 H^* + W_4 I^*; \tag{18}$$

$$S' = H(x)r + I(x)S - W_2{}^* M_2 {}^{f}/_{\varepsilon}; \tag{19}$$

$$W_2(\beta) = V_3{}^*; \tag{20}$$

$$W_4(\beta) = V_4{}^*; \tag{21}$$

$$S(\beta) = \tilde{\varepsilon}. \tag{22}$$

Выяснив вопрос о ранге матрицы $D\beta$ и получив начальные условия $W_2(\beta), W_4(\beta), S(\beta)$ по формулам (20-22) для уравнений обратной прогонки вида (17)-(19), получим все необходимые компоненты для нахождения непосредственно самого решения на всем интервале $[\alpha,\beta]$

Искомое решение исходной системы о.д.у. с пограничным слоем $y(x)$ находим по формуле (7), а его производную - $y'(x)$ - по формуле (8).

Отметим, что матрицы $W_i(x)$ и вектор-функции $r(x)$ и $s(x)$ являются благоприятными в вычислительном отношении. Регулирующие множители, составляющие единые блоки с $y(x)$ и $y'(x)$, вычисляются точно. Проверкой устанавливается, что найденная таким образом вектор-функция $y(x)$ удовлетворяет исходной задаче (1-3). За счет регуляризованных решения системы $M_1(x,\varepsilon)y(x)$ и его производной $M_2(x,\varepsilon)y'(x)$ будет обеспечиваться нормальное их поведение и в зонах погранслоев, и на всем рассматриваемом отрезке. Этот вычислительный процесс построен в случае, когда погранслой находится на левом конце интервала. Его можно обобщить на случай нахождения погранслоя на правом конце, а также при наличии двух погранслоев на обоих концах отрезка.

Данная модификация метода унитарной прогонки достаточно перспективна для решения систем линейных о.д.у. второго порядка с погранслоем, поскольку позволяет переформулировать граничные задачи в совокупность задач Коши, что дает возможность обойти громоздкую процедуру решения систем линейных алгебраических уравнений высокого порядка и, следовательно, избежать многих трудностей, связанных с организацией итерационных процессов и обеспечением их сходимости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Монастырный П.И. , Кулешова И.Ф. О модификациях метода унитарной прогонки для систем линейных о.д.у. второго порядка с пограничным слоем. 1 //Известия АН БССР, серия физико-матем. Минск, Деп. в ВИНИТИ 08.06.88. 4527-88.
2. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений //Пер. с англ. М.,1983. С.200.

УДК 531.19:577.323:539.2

В.Б. Немцов, профессор

МОЛЕКУЛА ДНК КАК КИРАЛЬНЫЙ СМЕКТИЧЕСКИЙ ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ

A DNA molecule is considered as the one-dimensional chiral smectic liquid crystal in which the smectic layers are generated by the nitrous base pairs. These base pairs lie perpendicular to a "pitch" axis, about which they rotate as one moves along the axes. The heat of melting (unwinding) of DNA molecule is estimated on the basis of this model and by using of the previously developed theory of the new caloric effect under deformation of the cholesteric liquid crystals.

Молекула ДНК представляет собой макромолекулу, принадлежащую к классу биополимеров, и сама по себе является макроскопической системой, так как содержит очень большое число звеньев (нуклеотидов), упорядоченных в виде двойной спирали (число звеньев равно 10^7-10^8).

В силу своей макроскопичности биополимер характеризуется упругостью на изгиб и кручение, а также другими макроскопическими свойствами.

Впервые идея упругости полимерной цепи и ее изгибная жесткость были введены С.И. Бреслером и Я.И. Френкелем (см. напр. [1]). Изгибная жесткость g_b характеризуется т.н. персистентной длиной a.

$$g_b = RTa / h, \qquad (1)$$