УДК 519.624

И.Ф. Соловьева, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА ПРИСТРЕЛКИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ГРАНИЧНЫХ ЗАДАЧ С ПОГРАНИЧНЫМ СЛОЕМ

Граничные задачи с пограничным слоем относятся к области гидродинамики и аэродинамики, где изучается поведение жидкости или газа вблизи поверхности тела. Пограничный слой — это тонкий слой жидкости или газа рядом с поверхностью, где скорость течения изменяется от нуля до значения, соответствующего основному потоку.

При малом параметре $\varepsilon > 0$ решение может испытывать резкие изменения вблизи границ области, что приводит к возникновению пограничного слоя, расположенного вблизи границ интервала, где решение, а особенно градиент решения, неограниченно растет, в то время как во внутренней области решение изменяется достаточно плавно. В случае нелинейных уравнений граничные задачи с пограничным слоем и малым параметром $\varepsilon > 0$ при старшей производной имеют вид:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ \varepsilon y_2' = f(x, y_1, y_2), 0 \le x \le 1. \end{cases} \tag{1}$$

$$y_1(0) = A, \ y_1(1) = B. \tag{2}$$

При удачных начальных приближениях $y_1^{(0)}(x)$, $y_2^{(0)}(x)$ к решению этой задачи, жестких ограничениях на гладкость f и порядок её роста по переменной y_2, возможна линеаризация задачи (1)–(2) и сходимость метода Ньютона – Канторовича. Исходя из свойств матрицы Якоби для правой части системы уравнений (1)

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1/\varepsilon \dfrac{\partial f(P^{(0)})}{\partial y_1} & 1/\varepsilon \dfrac{\partial f(P^{(0)})}{\partial y_2} \end{bmatrix}, \qquad P^{(0)} = (x, y_1^{(0)}(x), \ y_2^{(0)}(x))$$

можно построить разностные схемы экспоненциальной подгонки для соответствующей линеаризованной задачи.

В этом случае для решения и анализа решения задачи (1)-(2) роль начального приближения очень важна. Удачно найти начальное приближение $y_1^{(0)}(x)$, $y_2^{(0)}(x)$ для задачи с пограничными или внутренними переходными слоями практически невозможно. Поэтому предлагается модификация метода пристрелки, с помощью которой можно получить решение данной задачи.

Рассмотрим систему нелинейных уравнений первого порядка с малым параметром при старшей производной, приведенную к нормализованному виду:

$$y' = f(t, y, \varepsilon), \ a \le t \le b, \tag{3}$$

где

$$y : [a, b] \to R^n, \quad f : [a, b] \times R^n \times R \to R^n, \quad \varepsilon > 0$$

Зависимость f от ε такова, что в соответствующих граничных задачах будут возникать пограничные или внутренние переходные слои.

К последнему уравнению (3) присоединим двухточечное граничное условие наиболее общего вида:

$$g\,(y(a), y(b)) = 0, \tag{4}$$

где $g : R^n \times R^n \to R$.

В наиболее сложных случаях, когда решение характеризуется внутренними переходными слоями, резкими перепадами, и даже разрывами первого рода, модификацию метода пристрелки можно построить таким образом, чтобы она могла адаптироваться к выявляемым в процессе вычислительного эксперимента свойствам решения и обладала бы необходимой для этого гибкостью. Для этого предлагается метод множественной двусторонней пристрелки. В нем имеется возможность выбора точек и параметров пристрелки, выбора точек сшива решений, длин положительных $J_{2j-1}^{(+)}$ и отрицательных $J_{2j-1}^{(-)}$ подынтервалов пристрелки для создания необходимых условий качественного численного моделирования траектории искомого решения. Переходим от исходной граничной задачи к совокупности задач Коши, в том числе и жестких, для численного решения которых существуют хорошо работающие методы.

Приведем формулы для реализации этого метода.

Имеем: $$\begin{cases} u' = f(t, u), \quad t \in J_{2j-1}^{(+)} = \{t_{2j-1} \le t \le t_{2j}\}, \\ u\,(t, y_{2j-1})\big|_{t=t_{2j-1}} = y_{2j-1}, \quad y_{2j-1} \in R^n, \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} v' = f(t, v), \quad t \in J_{2j-1}^{(-)} = \{t_{2j-1} \ge t \ge t_{2j-2}\}, \\ v(t, y_{2j-1})\big|_{t=2j-1} = y_{2j-1}, \quad y_j \in R^n,\ j = \overline{1,m} \end{cases} \tag{6}$$

$a = t_0 < t_1 < t_2 ... < t_{2m-2} < t_{2m-1} < t_{2m} = b$.

t_{2j-1} – точки пристрелки, t_{2j} – точки сшива решений, y_{2j-1} – параметры пристрелки. Параметры пристрелки определяются, как решения замыкающей системы вида:

$$\begin{cases} u(t_{2j}, y_{2j-1}) - v(t_{2j}, y_{2j+1}) = 0, \quad j = \overline{0, m-1}, \\ g(v(t_0, y_1), u(t_{2m}, y_{2m-1})) = 0 \end{cases} \tag{7}$$

Свойства замыкающей системы (7) зависят от ее правой части f, исходного уравнения, формы граничных условий, области интегрирования $[a, b]$, точек пристрелки $u(t, y_{2j-1})$ и траекторий пристрелки $u(t, y_{2j-1}), v(t, y_{2j-1})$. Эти свойства наиболее полно характеризуются матрицами Якоби для соответствующих отображений H.

Перепишем замыкающую систему в операторной форме:

$$H(z^*) = 0, \tag{8}$$

где
$$H : R^N \to R^N, \quad N = m\,n, \\ z^* = (y_1^T, y_3^T, \dots, y_{2m-1}^T)^T. \tag{9}$$

z^* – искомое решение замыкающей системы (7). В этом случае само решение $y(t)$ представим формулой

$$\underset{a \le t \le b}{y(t)} = \begin{cases} v\,(t, y_{2j-1}), t \in J_{2j-1}^{(-)}, \\ u\,(t, y_{2j-1}), t \in J_{2j-1}^{(+)}, \quad j = \overline{1, m} \end{cases} \tag{10}$$

Составим матрицу Якоби для замыкающей системы $H(z^*) = 0$, записанной в операторной форме.

$$\frac{\partial H(z)}{\partial z} = \begin{bmatrix} U_1^{(2)} & -V_3^{(2)} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & U_3^{(4)} & -V_5^{(4)} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & U_{2m-3}^{(2m-2)} & -V_{2m-1}^{(2m-2)} \\ G_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & G_{2m-1} \end{bmatrix} \tag{11}$$

Для изучения свойств матрицы Якоби (11), нужно описать ее блоки. Это, в частности, даст условие ее разрешимости. Система имеет блочный вид. В первых m-1 блочных строк она двухдиагональна. В последней блочной строке ненулевыми являются только матрицы, стоящие на первом и последнем местах.

Для решения замыкающей системы (8) используется метод Ньютона.

1. $$\frac{\partial H(z^{(\kappa)})}{\partial z} \Delta z^{(k)} = -H(z^{(k)}). \tag{12}$$

2. $z^{(k+1)} = z^{(k)} + \Delta z^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$

где $z^{(k)} = (\Delta z_1^{(k)T}, \Delta z_3^{(k)T}, \dots, \Delta z_{2m-1}^{(k)T})^T; \quad H = (h_1^{(k)}, h_2^{(k)} \dots h_m^{(k)})^T,$

$h_i^{(k)} = h_i(z^{(k)})$.

Замыкающая система однозначно разрешима. Ее порядок определяется числом точек пристрелки, и он останется неизменным, и не будет зависеть от того, какая сетка будет использоваться на положительных и отрицательных подынтервалах пристрелки при численном интегрировании пристрелочных задач Коши.

3. Если локализация начального приближения $z^{(0)}$ выполнена с достаточной точностью и $\det \dfrac{\partial H(z^{(\kappa)})}{\partial z} \neq 0$ в точке $z = z*$ и некоторой ее окрестности, то последовательность $\left\{z^{(k)}\right\}_0^\infty$ сходится.

Практическая реализация данного метода зависит от выбора подынтервалов пристрелки $J_{2j-1}^{(+)}$ и $J_{2j-1}^{(-)}$, определения их длин и параметров с учетом свойств замыкающей системы уравнений и оптимизации ее по числу уравнений, определения пристрелочных траектории и организации итерационных процессов.

УДК 535.34+535.35+535.372

Н.Н. Крук, д-р физ.-мат. наук, зав. кафедрой (БГТУ, г. Минск);
Д.В. Петрова, канд. хим. наук, науч. сотр.,
(Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород, Россия);
Л.Л. Гладков, -р физ.-мат. наук, проф., (БГАС, г. Минск);
Д.В. Кленицкий, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
А.А. Слиж, студ., (БГТУ, г. Минск).

ВЗАИМОСВЯЗЬ ОСНОВНОСТИ МАКРОЦИКЛА И АРХИТЕКТУРЫ ПЕРИФЕРИЧЕСКОГО ЗАМЕЩЕНИЯ АЛКИЛИРОВАННЫХ КОРРОЛОВ

Корролы являются представителями семейства сокращенных тетрапиррольных соединений, в макроцикле которых отсутствует один метиновый мостик, а пара соседних пиррольных колец соединена связью C_a–C_a. Сокращенный макроцикл коррола сохраняет свой ароматический характер благодаря тому, что макроциклическое кольцо содержит три пиррольных и одно пиррорлениновое кольцо, в отличие от макроцикла порфиринового свободного основания, который состоит из двух пиррольных и двух пиррорлениновых колец. Характерной особенностью свободных оснований корролов является сосуществование NH-таутомеров из-за различного расположения трех протонов в ядре макроцикла (Рис. 1). Каждый из NH-таутомеров обладает своими уникальными свойствами благодаря асимметрии мак-