О. Б. Арушанян, С. Ф. Залеткин

РЕШЕНИЕ ЛИНЕЙНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ ОРТОГОНАЛЬНОЙ ПРОГОНКИ С.К. ГОДУНОВА

Пусть на отрезке $\alpha \le x \le \beta$ задана система линейных обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$
\begin{aligned}
y_1' &= a_{11}(x)y_1 + a_{12}(x) + \cdots + a_{1n}(x)y_n + f_1(x),\\
y_2' &= a_{12}(x)y_1 + a_{22}(x) + \cdots + a_{2n}(x)y_n + f_2(x),\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
y_n' &= a_{n1}(x)y_1 + a_{n2}(x) + \cdots + a_{nn}(x)y_n + f_n(x).
\end{aligned}
$$

Эту систему можно записать в векторно-матричной форме

$$\boldsymbol{y}' = A(x)\,\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x), \tag{1}$$

где $A(x)$ — заданная квадратная матрица порядка n, $\boldsymbol{f}(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_n(x))^T$ — заданный вектор-столбец, T — операция транспонирования, $\boldsymbol{y}(x) = (y_1(x), y_2(x), \cdots, y_n(x))^T$ — вектор-функция, подлежащая определению. Предполагается, что элементы $a_{ij}(x)$ матрицы A и $f_i(x)$, $i, j = 1, \dots, n$, есть непрерывные на отрезке $[\alpha, \beta]$ функции.

Будем считать, что на концах отрезка $[\alpha, \beta]$ заданы два линейных краевых условия, имеющие вид:

$$
\begin{aligned}
&B\,\boldsymbol{y}(\alpha) = \boldsymbol{b} \qquad \text{(левое краевое условие)},\\
&C\,\boldsymbol{y}(\beta) = \boldsymbol{c} \qquad \text{(правое краевое условие)}.
\end{aligned} \tag{2}
$$

Здесь B — прямоугольная матрица размеров $(n-k)\times n$, $\boldsymbol{b}$ — вектор-столбец длины $n-k$, C — прямоугольная матрица размеров $k \times n$, $\boldsymbol{c}$ — вектор-столбец длины k.

Суть рассматриваемого метода (пока оставим в стороне вопрос ортогонализации) состоит в том, что $n-k$ краевых условий с левого конца отрезка $[\alpha, \beta]$ как бы "переносятся" на правый конец, после чего доопределяются недостающие k условий. В результате на правом конце отрезка мы будем иметь уже n условий, а это означает, что исходная краевая задача свелась к задаче Коши, которую мы можем решить одним из известных методов, передвигаясь с правого конца отрезка $[\alpha, \beta]$ к левому и получая решение исходной задачи в требуемых точках на отрезке $[\alpha, \beta]$.

На первом этапе метода мы строим фундаментальную систему решений [1] однородной системы

$$B\,\boldsymbol{y} = 0$$

и вполне конкретное решение неоднородной системы

$$B\,\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}.$$

Будем предполагать, что матрица B имеет ранг $n-k$, т.е. все ее $n-k$ строк линейно независимы. Тогда k есть максимальное количество линейно независимых решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = 0$, т.е. то количество решений, из которых состоит фундаментальная система решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = 0$ [1]. Рассмотрим расширенную матрицу системы $B\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$:

$$
\left(\begin{array}{cccccc|c}
b_{1,1} & \dots & b_{1,n-k} & b_{1,n-k+1} & \dots & b_{1,n} & b_1\\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\
b_{n-k,1} & \dots & b_{n-k,n-k} & b_{n-k,n-k+1} & \dots & b_{n-k,n} & b_{n-k}
\end{array}\right).
$$

Приведем эту расширенную матрицу методом Жордана с выбором главного (ведущего) элемента по строке [2] (в программной реализации на Фортране — по столбцу) к виду:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & & 0 & b^*_{1,n-k+1} & \dots & b^*_{1,n} & b^*_1 \\ & \ddots & & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & & 1 & b^*_{n-k,n-k+1} & \dots & b^*_{n-k,n} & b^*_{n-k} \end{array}\right).$$

Первые $n-k$ компонент вектора неизвестных

$$\boldsymbol{y} = (y_1, \dots, y_{n-k}, y_{n-k+1}, \dots, y_n)$$

будем считать базисными, а остальные k компонент будем считать свободными переменными, которые могут принимать произвольные значения.

Положив свободные переменные равными нулю, мы получим частное решение неоднородной системы $B\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$, равное

$$\boldsymbol{y}_p = (b^*_1, \dots, b^*_{n-k}, 0, \dots, 0).$$

Это проверяется непосредственно умножением матрицы B на вектор-столбец $\boldsymbol{y}_p$, в результате которого получим вектор $\boldsymbol{b}$ в силу свойств преобразований (трансформаций) Гаусса [2].

Далее, выберем k наборов свободных переменных

$$\begin{gathered} \{1, 0, \dots, 0, 0\}, \\ \{0, 1, \dots, 0, 0\}, \\ \dots\dots\dots\dots\dots \\ \{0, 0, \dots, 0, 1\}. \end{gathered}$$

Решая k однородных систем

$$\begin{pmatrix} 1 & & 0 & b^*_{1,n-k+1} & \dots & b^*_{1,n} \\ & \ddots & & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & & 1 & b^*_{n-k,n-k+1} & \dots & b^*_{n-k,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{11} \\ \vdots \\ y_{1,n-k} \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} y_{k1} \\ \vdots \\ y_{k,n-k} \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = 0,$$

получим фундаментальную систему решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = 0$, состоящую из следующих k решений:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}_1 = (-b^*_{1,n-k+1}, \dots, -b^*_{n-k,n-k+1}, 1, 0, \dots, 0, 0), \\ &\vdots \\ &\boldsymbol{y}_k = (-b^*_{1,n}, \dots, -b^*_{n-k,n}, 0, 0, \dots, 0, 1). \end{aligned}$$

Как и в случае частного решения, в силу свойств преобразований Гаусса можно показать, что $B\boldsymbol{y}_i = 0$, $i = 1, \cdots, k$.

На втором этапе метода на отрезке $[\alpha, \beta]$ решается k задач Коши вида

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}' = A(x)\,\boldsymbol{y}, \\ &\boldsymbol{y}(\alpha) = \boldsymbol{y}_i, \qquad i = 1, \dots, k, \end{aligned} \tag{3}$$

и одна задача Коши вида

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}' = A(x)\,\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x),\\ &\boldsymbol{y}(\alpha) = \boldsymbol{y}_p. \end{aligned} \tag{4}$$

Тогда мы можем выписать набор из $(k+1)$-й функции

$$\boldsymbol{y}_1(x), \dots, \boldsymbol{y}_k(x), \boldsymbol{y}_{k+1}(x), \quad \alpha \le x \le \beta,$$

значения которых мы можем получить в любой точке отрезка $[\alpha, \beta]$ как решения задач (3) и (4).

Общее решение исходной задачи (1), (2) в любой точке отрезка $[\alpha, \beta]$ имеет вид:

$$\boldsymbol{y}(x) = \boldsymbol{y}_{k+1}(x) + d_1\boldsymbol{y}_1(x) + \dots + d_k\boldsymbol{y}_k(x). \tag{5}$$

Действительно, так как $\boldsymbol{y}_1(x), \dots, \boldsymbol{y}_k(x)$ есть решения задачи (3), а $\boldsymbol{y}_{k+1}(x)$ есть решение задачи (4), то имеем

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}'(x) &= \boldsymbol{y}'_{k+1}(x) + d_1\boldsymbol{y}'_1(x) + \dots + d_k\boldsymbol{y}'_k(x) =\\ &= A(x)\,\boldsymbol{y}_{k+1}(x) + \boldsymbol{f}(x) + d_1A(x)\,\boldsymbol{y}_1(x) + \dots + d_kA(x)\,\boldsymbol{y}_k(x) =\\ &= A(x)[\boldsymbol{y}_{k+1}(x) + d_1\boldsymbol{y}_1(x) + \dots + d_k\boldsymbol{y}_k(x)] + \boldsymbol{f}(x) = A(x)\,\boldsymbol{y}(x) + \boldsymbol{f}(x). \end{aligned}$$

При этом $\boldsymbol{y}(x)$ удовлетворяет левому краевому условию при любых $d_1, \dots, d_k$ по построению векторов $\boldsymbol{y}_1, \dots, \boldsymbol{y}_k$ и $\boldsymbol{y}_p$. Таким образом, если бы мы знали значения коэффициентов $d_1, \dots, d_k$, то мы могли бы по формуле (5) вычислить решение $\boldsymbol{y}(x)$ исходной задачи в любой точке отрезка $[\alpha, \beta]$.

Определим искомые значения этих коэффициентов из правого краевого условия

$$C\,\boldsymbol{y}(\beta) = \boldsymbol{c}.$$

Отсюда имеем:

$$C(\boldsymbol{y}_{k+1}(\beta) + d_1\boldsymbol{y}_1(\beta) + \dots + d_k\boldsymbol{y}_k(\beta)) = \boldsymbol{c},$$

или

$$C\,\boldsymbol{y}_1(\beta)\,d_1 + \dots + C\,\boldsymbol{y}_k(\beta)\,d_k = \boldsymbol{c} - C\,\boldsymbol{y}_{k+1}(\beta). \tag{6}$$

Расписав покомпонентно произведения $C\boldsymbol{y}_i(\beta)$, $i = 1, \dots, k+1$, мы получим линейную систему из k уравнений с k неизвестными $d_1, \dots, d_k$ с матрицей $C\boldsymbol{y}_i(\beta)$, $i = 1, \dots, k$, и вектором правой части $\boldsymbol{c} - C\boldsymbol{y}_{k+1}(\beta)$. Будем предполагать, что ранг матрицы C равен k, т.е. что все ее строки линейно независимы. Тогда из системы (6) коэффициенты $d_1, \dots, d_k$ определяются однозначно.

Вычислив коэффициенты $d_1, \dots, d_k$, мы получим по формуле (5) решение исходной задачи $\boldsymbol{y}(\beta)$ на правом конце отрезка $[\alpha, \beta]$, т.е. перенос краевого условия с левого конца отрезка на правый завершен.

На третьем, заключительном этапе метода мы, решая задачу Коши

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}' = A(x)\,\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x),\\ &\boldsymbol{y}(\beta) = \boldsymbol{y}_{k+1}(\beta) + d_1\boldsymbol{y}_1(\beta) + \dots + d_k\boldsymbol{y}_k(\beta) \end{aligned} \tag{7}$$

от точки $x = \beta$ до точки $x = \alpha$, можем получить решение исходной задачи на отрезке $[\alpha, \beta]$. В силу единственности решения задачи Коши полученное решение будет совпадать с функцией $\boldsymbol{y}(x)$, задаваемой формулой (5) при найденных значениях $d_1, \dots, d_k$, а потому будет удовлетворять левому краевому условию, так как функция (5) удовлетворяет левому краевому условию при любых $d_1, \ldots, d_k$. Правое краевое условие выполнено по построению коэффициентов $d_1, \ldots, d_k$.

Заметим, что если бы при решении задач (3) и (4) мы запомнили векторы $\boldsymbol{y}_1(x), \ldots, \boldsymbol{y}_k(x)$ и $\boldsymbol{y}_{k+1}(x)$ в нужных нам точках отрезка $[\alpha, \beta]$, то по формуле (5) мы смогли бы вычислить решение исходной задачи в этих точках; тогда необходимость в решении задачи (7) отпала бы.

Аналогичным образом можно перенести краевое условие с правого конца отрезка $[\alpha, \beta]$ на левый.

В изложенном алгоритме, имеющем название метода стрельбы [3], может возникнуть следующая трудность. При интегрировании задачи (3) по мере продвижения к точке β может возникнуть "слипание" векторов $\boldsymbol{y}_1(x), \ldots, \boldsymbol{y}_k(x)$, когда они становятся почти линейно зависимыми. Это может произойти, например, в следующем случае [4].

Пусть матрица $A(x)$ имеет постоянные элементы и является матрицей простой структуры, т.е. имеет n линейно независимых собственных векторов. Тогда общие решения задач (3) могут быть представлены в виде:

$$\boldsymbol{y}_i(x) = \sum_{j=1}^{n} \xi_{ij} e^{\lambda_j x} \boldsymbol{e}_j, \quad i = 1, \ldots, k\,,$$

где ξ_{ij} — постоянные, λ_j — собственные значения матрицы A, $\boldsymbol{e}_j$ — соответствующие им собственные векторы. Если среди λ_j имеются собственные значения с большими отрицательными вещественными частями, то через какое-то число шагов интегрирования соответствующие слагаемые в приведенной выше сумме становятся малыми, а слагаемое, соответствующие собственному значению с наибольшей вещественной частью, становится преобладающим. Это означает, что векторы $\boldsymbol{y}_i(x)$ становятся все более и более коллинеарными (как бы "слипаются"). Тогда при решении системы (6) для определения коэффициентов $d_1, \ldots, d_k$ матрица $C\boldsymbol{y}_i(\beta)$ будет иметь почти линейно зависимые строки, т.е. матрица системы (6) окажется плохо обусловленной. Следовательно, коэффициенты $d_1, \ldots, d_k$ будут найдены с большими ошибками, а это означает, что решение задачи (7) не будет удовлетворительным.

Чтобы избежать указанной трудности, применяется способ ортогонализации, заключающийся в следующем. Выберем на отрезке некоторые точки

$$\alpha < \alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_m = \beta,$$

которые назовем точками ортогонализации. Эти точки надо взять настолько частыми, чтобы процесс "слипания" векторов $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_k$ не привел при подходе к каждой следующей точке ортогонализации к большой потере значащих цифр из-за роста вычислительной погрешности, если среди решений $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_k$ однородной системы $\boldsymbol{y}' = A(x)\boldsymbol{y}$ есть быстро растущие с ростом x. Будем решать задачи (3) и (4) до первой точки ортогонализации α_1. Рассмотрим матрицу

$$Y^{(0)}(\alpha_1) = \left(\boldsymbol{y}_1^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{y}_k^{(0)}, \boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}\right)$$

размеров $n \times (k+1)$, столбцы которой совпадают с векторами $\boldsymbol{y}_i(\alpha_1)$, $i = 1, \ldots, k+1$. Выполним ее QR-разложение (например, методом отражений [2]):

$$Y^{(0)}(\alpha_1) = QR,$$

где Q — ортогональная матрица порядка n, а матрица R имеет n строк и $k+1$ столбцов, причем все ее элементы, лежащие ниже главной диагонали, равны нулю. Столбцы матрицы Q ортогональны и нормированы (по определению ортогональной матрицы), а элементы на главной диагонали матрицы R содержат нормирующие множители.

Матрицу $Y^{(0)}(\alpha_1)$ можно представить в виде

$$Y^{(0)}(\alpha_1) = Y^{(1)}(\alpha_1)\, R_{\alpha_1}, \tag{8}$$

где $Y^{(0)}(\alpha_1)$ есть прямоугольная матрица размеров $n\times(k+1)$, а R_{α_1} есть верхняя треугольная матрица порядка $k+1$:

$$R(\alpha_1) = \begin{pmatrix} r_{11}^{(\alpha_1)} & \dots & r_{1,k+1}^{(\alpha_1)} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)} \end{pmatrix},$$

при этом столбцы $\boldsymbol{y}_1^{(1)},\dots,\boldsymbol{y}_k^{(1)},\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}$ матрицы $Y^{(1)}(\alpha_1)$ совпадают с первыми $k+1$ столбцами матрицы Q, а строки матрицы $R(\alpha_1)$ совпадают с первыми $k+1$ строками матрицы R.

Из (8) имеем

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{y}_1^{(0)} = r_{11}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_1^{(1)},\\
&\boldsymbol{y}_2^{(0)} = r_{12}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_1^{(1)} + r_{22}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_2^{(1)},\\
&\boldsymbol{y}_3^{(0)} = r_{13}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_1^{(1)} + r_{23}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_2^{(1)} + r_{33}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_3^{(1)},\\
&\vdots\\
&\boldsymbol{y}_i^{(0)} = \sum_{l=1}^{i-1} r_{li}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)} + r_{ii}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_i^{(1)}, \qquad i=4,\dots,k-1,\\
&\vdots\\
&\boldsymbol{y}_k^{(0)} = \sum_{l=1}^{k-1} r_{lk}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)} + r_{kk}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_k^{(1)},\\
&\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)} = \sum_{l=1}^{k} r_{l,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)} + r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}.
\end{aligned}$$

Из этих равенств выразим векторы $\boldsymbol{y}_i^{(1)}$ через $\boldsymbol{y}_i^{(0)}$, $i=1,\dots,k+1$:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{y}_1^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_1^{(0)}}{r_{11}^{(\alpha_1)}},\\
&\vdots\\
&\boldsymbol{y}_i^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_i^{(0)} - \sum\limits_{l=1}^{i-1} r_{li}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{ii}^{(\alpha_1)}}, \qquad i=2,\dots,k-1,\\
&\vdots\\
&\boldsymbol{y}_k^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_k^{(0)} - \sum\limits_{l=1}^{k-1} r_{lk}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{kk}^{(\alpha_1)}},\\
&\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)} - \sum\limits_{l=1}^{k} r_{l,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}}.
\end{aligned}$$

Иными словами, вектор $\boldsymbol{y}_i^{(1)}$, $i=1,\dots,k$, является линейной комбинацией неортогональных векторов вида

$$\boldsymbol{y}_i^{(i)}=\sum_{j=1}^{i}\gamma_i\boldsymbol{y}_j^{(0)}(\alpha_1),$$

а вектор $r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}$ является линейной комбинацией неортогональных векторов вида

$$r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(\alpha_1)+\sum_{j=1}^{k}\delta_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(\alpha_1).$$

Здесь $\boldsymbol{y}_j^{(0)}$, $j=1,\dots,k$, есть решения задач (3) на отрезке $[\alpha,\beta]$, а $\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(x)$ есть решение задачи (4) на отрезке $[\alpha,\beta]$.

Будем теперь от узла α_1 до следующего узла ортогонализации α_2 решать не задачи (3) и (4), а задачи

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{y}_i'=A(x)\,\boldsymbol{y}_i,\\&\boldsymbol{y}_i(\alpha_1)=\boldsymbol{y}_i^{(1)},\quad i=1,\dots,k,\end{aligned}\tag{9}$$

и

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{y}_{k+1}'=A(x)\,\boldsymbol{y}_{k+1}+\boldsymbol{f}(x),\\&\boldsymbol{y}_{k+1}(\alpha_1)=r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}.\end{aligned}\tag{10}$$

Точно так же, как это мы сделали для линейной комбинации (5), можно показать, что линейная комбинация

$$\boldsymbol{y}(x)=\boldsymbol{y}_{k+1}(x)+d_1\boldsymbol{y}_k(x)+\dots+d_k\boldsymbol{y}_k(x)\tag{11}$$

решений задач (9) и (10) удовлетворяет исходному уравнению (1).

Покажем теперь, что $\boldsymbol{y}(x)$ удовлетворяет левому краевому условию при любых значениях коэффициентов $d_1\dots d_k$. Действительно, решение $\boldsymbol{y}_i(x)$, $i=1,\dots,k$, однородного уравнения $\boldsymbol{y}_i'(x)=A(x)\boldsymbol{y}_i(x)$ на отрезке $[\alpha,\beta]$ с начальным условием, заданным в точке $x=\alpha_1$ и равным

$$\boldsymbol{y}_i(x)|_{x=\alpha_1}=\sum_{j=1}^{i}\gamma_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)|_{x=\alpha_1},$$

совпадает с функцией $\sum_{j=1}^{i}\gamma_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)$ по теореме о единственности решения задачи Коши, при этом $\boldsymbol{y}_i(x)$ в точке $x=\alpha$ принимает значение

$$\boldsymbol{y}_i(x)|_{x=\alpha}=\sum_{j=1}^{i}\gamma_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)|_{x=\alpha}=\sum_{j=1}^{i}\gamma_j\boldsymbol{y}_j$$

и тем самым удовлетворяет в точке $x=\alpha$ однородному краевому условию $B\boldsymbol{y}_i(\alpha)=0$, так как векторы $\boldsymbol{y}_j$ по построению образуют фундаментальную систему решений однородной системы $B\boldsymbol{y}=0$. В свою очередь, решение $\boldsymbol{y}_{k+1}(x)$ неоднородного уравнения $\boldsymbol{y}_{k+1}^{'}(x)=A(x)\boldsymbol{y}_{k+1}(x)+\boldsymbol{f}(x)$ на отрезке $[\alpha,\beta]$ с начальным условием, заданным в точке $x=\alpha_1$ и равным

$$\boldsymbol{y}_{k+1}(x)|_{x=\alpha_1}=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(x)|_{x=\alpha_1}+\sum_{j=1}^{k}\delta_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)|_{x=\alpha_1},$$

совпадает с функцией $\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(x)+\sum\limits_{j=1}^{k}\delta_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)$ по теореме о единственности задачи Коши, при этом $\boldsymbol{y}_{k+1}(x)$ в точке $x=\alpha$ принимает значение

$$\boldsymbol{y}_{k+1}(x)|_{x=\alpha}=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(x)|_{x=\alpha}+\sum_{j=1}^{k}\delta_j\boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)|_{x=\alpha}=\boldsymbol{y}_p+\sum_{j=1}^{k}\delta_j\boldsymbol{y}_j$$

и тем самым удовлетворяет в точке $x=\alpha$ заданному левому краевому условию $B\boldsymbol{y}_{k+1}(\alpha)=\boldsymbol{b}$, так как векторы $\boldsymbol{y}_j$ по построению образуют фундаментальную систему решений однородной системы $B\boldsymbol{y}=0$, а $\boldsymbol{y}_p$ также по построению является частным решением неоднородной системы $B\boldsymbol{y}_p=\boldsymbol{b}$.

Таким образом, функция $\boldsymbol{y}(x)$, определенная линейной комбинацией (11), удовлетворяет при любых $d_1,\ldots,d_k$ заданному в точке $x=\alpha$ (левому) краевому условию $B\boldsymbol{y}(\alpha)=\boldsymbol{b}$.

Повторяя рассмотренный процесс ортогонализации в точках $\alpha_2,\ldots,\alpha_m=\beta$, мы получим наборы матриц $Y^{(s)}(\alpha_s)$ и $R(\alpha_s)$, $s=1,\ldots,m$, удовлетворяющих соотношениям:

$$Y^{(0)}(\alpha_1)=Y^{(1)}(\alpha_1)\,R(\alpha_1),\ldots,Y^{(s-1)}(\alpha_s)=Y^{(s)}(\alpha_s)\,R(\alpha_s),\ldots,Y^{(m-1)}(\alpha_m)=Y^{(m)}(\alpha_m)\,R(\alpha_m).$$

По аналогии с первым узлом ортогонализации $x=\alpha_1$, решение исходной задачи в последнем узле ортогонализации $x=\beta$ может быть выписано через неортогональные столбцы матрицы $Y^{(m-1)}(\alpha_m)$ следующим образом:

$$\boldsymbol{y}(\beta)=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(m-1)}+d_1\boldsymbol{y}_1^{(m-1)}+\cdots+d_k\boldsymbol{y}_k^{(m-1)}. \qquad (12)$$

В силу равенства

$$Y^{(m-1)}(\alpha_m)=Y^{(m)}(\alpha_m)\,R(\alpha_m),$$

вектор $\boldsymbol{y}(\beta)$ может быть выражен через ортогональные столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$ в виде следующей линейной комбинации:

$$\boldsymbol{y}(\beta)=r_{k+1,k+1}^{(\alpha_m)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(m)}+d_1\boldsymbol{y}_1^{(m)}+\cdots+d_k\boldsymbol{y}_k^{(m-1)}.$$

Здесь через $d_1,\ldots,d_k$ обозначен другой набор коэффициентов, отличный от соответствующего набора в выражении (12). Для определения этих неизвестных коэффициентов $d_1,\ldots,d_k$ потребуем выполнения правого краевого условия:

$$C\,\boldsymbol{y}(\beta)=\boldsymbol{c},$$

или

$$r_{k+1,k+1}^{(\alpha_m)}C\,\boldsymbol{y}_{k+1}^{(m)}+d_1C\,\boldsymbol{y}_1^{(m)}+\cdots+d_kC\,\boldsymbol{y}_k^{(m)}=\boldsymbol{c}.$$

Таким образом, в правом конце отрезка $[\alpha,\beta]$ мы получили систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $d_1,\ldots,d_k$ по аналогии с системой (6):

$$C\,\boldsymbol{y}_1^{(m)}d_1+\cdots+C\,\boldsymbol{y}_k^{(m)}d_k=\boldsymbol{c}-r_{k+1,k+1}^{(\alpha_m)}C\,\boldsymbol{y}_{k+1}^{(m)}.$$

Здесь $\boldsymbol{y}_i^{(m)}$, $i=1,\ldots,k$, есть столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$. Так как столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$ ортогональны, то квадратная матрица $C\boldsymbol{y}_i^{(m)}$, $i=1,\ldots,k$, полученной системы имеет численные свойства, не хуже свойств матрицы C, а это означает, что при переносе левого краевого условия на правый конец отрезка $[\alpha,\beta]$ мы не внесли дополнительных ошибок при определении коэффициентов $d_1,\ldots,d_k$. Теперь мы можем перейти к третьему, заключительному этапу, приступив к решению задачи (7). Полученное при этом решение в силу единственности решения задачи Коши будет удовлетворять и левому краевому условию.

Заметим, что в число узлов ортогонализации можно включить и точку α, при этом все сказанное выше остается в силе.

Если сохранить в памяти компьютера наборы матриц $Y^{(s)}(\alpha_s)$ и $R(\alpha_s)$, $s=1,\ldots,m$, то для получения решения исходной задачи в узлах ортогонализации $\alpha_1,\ldots,\alpha_{m-1}$ можно поступить следующим образом.

Рассмотрим два соседних подотрезка $[\alpha_{s-1},\alpha_s]$ и $[\alpha_s,\alpha_{s+1}]$. На подотрезке $[\alpha_{s-1},\alpha_s]$ решение исходной задачи представляется в виде

$$\boldsymbol{y}(x)=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(s-1)}(x)+d_1^{(s-1)}\boldsymbol{y}_1^{(s-1)}(x)+\cdots+d_k^{(s-1)}\boldsymbol{y}_k^{(s-1)}(x), \tag{13}$$

где $\boldsymbol{y}_i^{(s-1)}(x)$, $i=1,\ldots,k+1$, есть решения задач (9) и (10) на подотрезке $[\alpha_{s-1},\alpha_s]$. На подотрезке $[\alpha_s,\alpha_{s+1}]$ решение исходной задачи представляется в виде

$$\boldsymbol{y}(x)=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(s)}(x)+d_1^{(s)}\boldsymbol{y}_1^{(s)}(x)+\cdots+d_k^{(s)}\boldsymbol{y}_k^{(s)}(x),$$

где $\boldsymbol{y}_i^{(s)}(x)$, $i=1,\ldots,k+1$, есть решения задач (9) и (10) на подотрезке $[\alpha_s,\alpha_{s+1}]$.

В точке $x=\alpha_s$ выписанные решения должны совпадать, поскольку мы ищем непрерывное решение. Из этого условия получаем два равенства:

$$\boldsymbol{y}(\alpha_s)=\boldsymbol{y}_{k+1}^{(s-1)}(\alpha_s)+d_1^{(s-1)}\boldsymbol{y}_1^{(s-1)}(\alpha_s)+\cdots+d_k^{(s-1)}\boldsymbol{y}_k^{(s-1)}(\alpha_s), \tag{14}$$

$$\boldsymbol{y}(\alpha_s)=r_{k+1,k+1}^{(\alpha_s)}\boldsymbol{y}_{k+1}^{(s)}(\alpha_s)+d_1^{(s)}\boldsymbol{y}_1^{(s)}(\alpha_s)+\cdots+d_k^{(s)}\boldsymbol{y}_k^{(s)}(\alpha_s). \tag{15}$$

Здесь $\boldsymbol{y}_i^{(s-1)}(\alpha_s)$, $i=1,\ldots,k+1$, есть неортогональные векторы, образующие столбцы матрицы $Y^{(s-1)}(\alpha_s)$, а $\boldsymbol{y}_i^{(s)}(\alpha_s)$, $i=1,\ldots,k+1$, есть ортонормированные векторы, образующие столбцы ортогональной матрицы $Y^{(s)}(\alpha_s)$.

Введем два вектора-столбца длины $k+1$:

$$\boldsymbol{d}^{(s-1)}=\begin{pmatrix} d_1^{(s-1)} \\ \vdots \\ d_k^{(s-1)} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{d}^{(s)}=\begin{pmatrix} d_1^{(s)} \\ \vdots \\ d_k^{(s)} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда равенства (14) и (15) можно представить в виде:

$$\boldsymbol{y}(\alpha_s)=Y^{(s-1)}(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)}, \tag{16}$$

$$\boldsymbol{y}(\alpha_s)=U^{(s)}(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s)}, \tag{17}$$

где $U^{(s)}(\alpha_s)$ есть матрица, у которой первые k столбцов совпадают с первыми k столбцами матрицы $Y^{(s)}(\alpha_s)$, а $(k+1)$-й столбец равен $(k+1)$-му столбцу матрицы $Y^{(s)}(\alpha_s)$, умноженному на последний диагональный элемент $r_{k+1,k+1}^{(\alpha_s)}$ матрицы $R(\alpha_s)$. Матрица $U^{(s)}(\alpha_s)$ отличается от ортогональной матрицы $Y^{(s)}(\alpha_s)$ тем, что первые k ее столбцов нормированы, а $(k+1$-й столбец ненормирован.

Из соотношения

$$Y^{(s-1)}(\alpha_s)=Y^{(s)}(\alpha_s)\,R(\alpha_s)$$

следует, что матрицы $Y^{(s-1)}(\alpha_s)$ и $U^{(s)}(\alpha_s)$ связаны соотношением

$$Y^{(s-1)}(\alpha_s)=U^{(s)}(\alpha_s)\,T(\alpha_s),$$

где $T(\alpha_s)$ есть треугольная матрица, полученная из матрицы $R(\alpha_s)$ заменой последнего диагонального элемента на 1, т.е. матрица $T(\alpha_s)$ имеет вид

$$T(\alpha_s) = \begin{pmatrix} r_{11}^{(\alpha_s)} & \dots & r_{1k}^{(\alpha_s)} & r_{1,k+1}^{(\alpha_s)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & & r_{k,k}^{(\alpha_s)} & r_{k,k+1}^{(\alpha_s)} \\ & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Из (16) и (17) получаем

$$Y^{(s-1)}(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)} = U^{(s)}(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s)},$$

или

$$U^{(s)}(\alpha_s)\,T(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)} = U^{(s)}(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s)}.$$

Отсюда имеем

$$\boldsymbol{d}^{(s)} = \left[U^{(s)}(\alpha_s)\right]^{-1} U^{(s)}(\alpha_s)\,T(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)} = T(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)}.$$

Таким образом коэффициенты в (14) и (15) связаны друг с другом рекуррентным соотношением

$$\boldsymbol{d}^{(s)} = T(\alpha_s)\,\boldsymbol{d}^{(s-1)},$$

представляющим собой линейную систему с треугольной матрицей $T(\alpha_s)$. Поскольку вектор $\boldsymbol{d}^{(m)}$ нам известен, то по этому рекуррентному соотношению мы последовательно находим $\boldsymbol{d}^{(m-1)}, \boldsymbol{d}^{(m-2)}, \dots, \boldsymbol{d}^{(1)}$. Следовательно, решение исходной задачи в узлах ортогонализации может быть вычислено по формуле (15) или (17).

Описанный процесс вычисления решения исходной задачи в узлах ортогонализации называют обратной прогонкой, а $U^{(s)}(\alpha_s)$ и $\boldsymbol{d}^{(s)}$ — прогоночными матрицами и прогоночными векторами.

Значение $\boldsymbol{y}(\alpha)$ может быть найдено из (13) при $x = \alpha$ и $s = 1$ и будет равно

$$\boldsymbol{y}(\alpha) = d_1^{(0)}\boldsymbol{y}_1 + \dots + d_k^{(0)}\boldsymbol{y}_k + \boldsymbol{y}_{k+1},$$

где $\boldsymbol{y}_1, \dots, \boldsymbol{y}_k$ есть фундаментальная система решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = 0$, а $\boldsymbol{y}_{k+1}$ есть частное решение неоднородной системы $B\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$, которые мы вычислили на первом этапе метода.

Изложенный метод без запоминания прогоночных матриц, возникающих в процессе ортогонализации, реализован С. Ф. Залеткиным в виде комплекса программ на Фортране, который был включен в Библиотеку численного анализа НИВЦ МГУ [5] (электронный адрес Библиотеки: `http://www.srcc.msu.su/num_anal`). Численный алгоритм, положенный в основу этого комплекса, представляет собой модификацию метода, разработанного С. К. Годуновым [6]. Другие способы решения задачи (1), (2) изложены, например, в [3] и [7].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Курош А.Г.* Курс высшей алгебры. М.: Наука, 1968.

2. *Воеводин В.В.* Вычислительные основы линейной алгебры. М.: Наука, 1977.

3. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: Наука, 1987.

4. *Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф.* Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.

5. *Арушанян О.Б.* Автоматизация конструирования библиотек программ. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1988.

6. *Годунов С.К.* О численном решении краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // Успехи матем. наук. 1961. **16**, № 3. 171–174.

7. *Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И.* Вычислительные методы. Т. 2. М.: Наука, 1977.