МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М. В. ЛОМОНОСОВА

Научно-исследовательский вычислительный центр

О. Б. Арушанян, С. Ф. Залеткин

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

Учебное пособие

Москва, 2021

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

О. Б. Арушанян, С. Ф. Залеткин

Настоящее учебное пособие посвящено рассмотрению численного алгоритма решения линейной краевой задачи для систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка методом ортогональной прогонки С. К. Годунова без запоминания прогоночных матриц, возникающих в процессе ортогонализации.

Предлагаемое учебное пособие предназначено для студентов механико-математического факультета МГУ, однако может быть использовано на других факультетах МГУ, учебные программы которых включают в себя изучение численных методов. Кроме того, пособие может быть полезно для аспирантов и научных сотрудников, интересующихся вопросами развития численного программного обеспечения ЭВМ.

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

$$\begin{aligned}
y_1' &= a_{11}(x)y_1 + a_{12}(x)y_2 + \dots + a_{1n}(x)y_n + f_1(x),\\
y_2' &= a_{21}(x)y_1 + a_{22}(x)y_2 + \dots + a_{2n}(x)y_n + f_2(x),\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
y_n' &= a_{n1}(x)y_1 + a_{n2}(x)y_2 + \dots + a_{nn}(x)y_n + f_n(x).
\end{aligned}$$

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,

$$\boldsymbol{f}(x) = \big(f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)\big)^T$$

— заданный вектор-столбец, T — операция транспонирования и

$$\boldsymbol{y}(x) = \big(y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)\big)^T$$

— вектор-функция, подлежащая определению. Предполагается, что элементы $a_{ij}(x)$ матрицы A и $f_i(x)$, $i, j = 1, \dots, n$, являются непрерывными на отрезке $[\alpha, \beta]$ функциями.

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

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

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

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

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 $B\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$, т.е. то количество решений, из которых состоит фундаментальная система решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$ [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

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

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

$$\boldsymbol{y}_p = (b_1^*, \ldots, b_{n-k}^*, 0, \ldots, 0).$$

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

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

Решая k однородных систем

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

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

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

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

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

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

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

$$\boldsymbol{y}_1(x), \ldots, \boldsymbol{y}_k(x), \boldsymbol{y}_{k+1}(x), \quad \alpha \leqslant x \leqslant \beta.$$

Значения этих функций 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

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

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

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

При этом $\boldsymbol{y}(x)$ удовлетворяет левому краевому условию при любых $d_1, \ldots, d_k$ по построению векторов $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_k$ и $\boldsymbol{y}_p$. Таким образом, если бы мы знали значения коэффициентов $d_1, \ldots, d_k$, 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:

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

или

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

Расписав покомпонентно произведения $C\boldsymbol{y}_i(\beta)$, $i = 1, \ldots, k+1$, мы получим линейную систему из k уравнений с k неизвестными $d_1, \ldots, d_k$ с матрицей $C\boldsymbol{y}_i(\beta)$, $i = 1, \ldots, k$, 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 $d_1, \ldots, d_k$ определяются однозначно.

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

На третьем, заключительном, этапе метода мы, решая задачу Коши

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

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 $d_1, \ldots, d_k$, 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, названном методом 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 [3, 4].

Пусть матрица $A(x)$ имеет постоянные элементы и является матрицей простой структуры, т.е. имеет n линейно независимых собственных векторов. Тогда 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, соответствующее 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 столбцы, 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 $n \times (k+1)$. Ее столбцы совпадают с векторами $\boldsymbol{y}_i(\alpha_1)$, $i = 1, \ldots, k+1$. Выполним QR-разложение этой матрицы (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 треугольной 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 $Y^{(1)}(\alpha_1)$ — прямоугольная матрица размеров $n \times (k+1)$, а R_{α_1} — верхняя треугольная матрица порядка $k+1$:

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

при этом столбцы $\boldsymbol{y}_1^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{y}_k^{(1)}, \boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)}$ 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

$$\boldsymbol{y}_1^{(0)} = r_{11}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_1^{(1)},$$

$$\boldsymbol{y}_2^{(0)} = r_{12}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_1^{(1)} + r_{22}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_2^{(1)},$$

$$\boldsymbol{y}_3^{(0)} = r_{13}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_1^{(1)} + r_{23}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_2^{(1)} + r_{33}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_3^{(1)},$$

$$\ldots\ldots\ldots$$

$$\boldsymbol{y}_i^{(0)} = \sum_{l=1}^{i-1} r_{li}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_l^{(1)} + r_{ii}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_i^{(1)}, \qquad i = 4, \ldots, k-1,$$

$$\ldots\ldots\ldots$$

$$\boldsymbol{y}_k^{(0)} = \sum_{l=1}^{k-1} r_{lk}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_l^{(1)} + r_{kk}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_k^{(1)},$$

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

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

$$\boldsymbol{y}_1^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_1^{(0)}}{r_{11}^{(\alpha_1)}},$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{y}_i^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_i^{(0)} - \sum_{l=1}^{i-1} r_{li}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{ii}^{(\alpha_1)}}, \qquad i = 2, \ldots, k-1,$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{y}_k^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_k^{(0)} - \sum_{l=1}^{k-1} r_{lk}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{kk}^{(\alpha_1)}},$$

$$\boldsymbol{y}_{k+1}^{(1)} = \frac{\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)} - \sum_{l=1}^{k} r_{l,k+1}^{(\alpha_1)} \boldsymbol{y}_l^{(1)}}{r_{k+1,k+1}^{(\alpha_1)}}.$$

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

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

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 $\boldsymbol{y}_j^{(0)}$, $j = 1, \ldots, k$, есть решения задач (3) на отрезке $[\alpha, \beta]$, а $\boldsymbol{y}_{k+1}^{(0)}(x)$ — 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

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

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

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

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

Покажем, что $\boldsymbol{y}(x)$ удовлетворяет левому краевому условию при любых значениях коэффициентов $d_1, \ldots, d_k$. Действительно, решение $\boldsymbol{y}_i(x)$, $i = 1, \ldots, k$, 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 $\sum\limits_{j=1}^{i} \gamma_j \boldsymbol{y}_j^{(0)}(x)$ 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

$$B\boldsymbol{y}_i(\alpha) = \mathbf{0},$$

так как векторы $\boldsymbol{y}_j$ по построению образуют фундаментальную систему решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$. 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

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

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

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

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

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

В силу равенства

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

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

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

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

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

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):

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

Здесь $\boldsymbol{y}^{(m)}_i$, $i = 1, \ldots, k$, есть столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$. Так как столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$ ортогональны, то квадратная матрица $C\boldsymbol{y}^{(m)}_i$, $i = 1, \ldots, k$, 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 внесем 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

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

где $\boldsymbol{y}^{(s-1)}_i(x)$, $i = 1, \ldots, k+1$, 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

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

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 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 $U^{(s)}(\alpha_s)$ — 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 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 $T(\alpha_s)$ — треугольная матрица, полученная из матрицы $R(\alpha_s)$ заменой последнего диагонального элемента на 1, т.е. матрица $T(\alpha_s)$ имеет вид

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

Из (16) и (17) получаем

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

или

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

Слева и справа в полученном равенстве стоят линейные комбинации столбцов матрицы $U^{(s)}(\alpha_s)$. Поскольку столбцы матрицы линейно независимы, отсюда имеем

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

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 $\boldsymbol{d}^{(m-1)}, \boldsymbol{d}^{(m-2)}, \ldots, \boldsymbol{d}^{(1)}$. 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

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

где $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_k$ — фундаментальная система решений однородной системы $B\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$, а $\boldsymbol{y}_{k+1}$ — 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 (в настоящее время этот комплекс оформлен также и на языках Си и Паскаль), который был включен в Библиотеку численного анализа НИВЦ МГУ [5] (электронный адрес Библиотеки: `http://num-anal.srcc.msu.ru`). 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].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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.