

УДК 519.24.1

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

О. Б. Арушанян¹, С. Ф. Залёткин¹

Излагается численный алгоритм 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.

Ключевые слова: обыкновенные дифференциальные уравнения, численный анализ, численные методы, ортогональная прогонка Годунова, ортогонализация, краевые задачи.

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

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

Эту систему можно записать в векторно-матричной форме

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

где $A(x)$ — заданная квадратная матрица порядка n , $\mathbf{f}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))^T$ — заданный вектор-столбец, T — операция транспонирования, $\mathbf{y}(x) = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x))^T$ — 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 крайевых условия, имеющие вид:

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

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

Суть рассматриваемого метода (пока оставим в стороне вопрос ортогонализации) состоит в том, что $n - k$ крайевых 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

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

и вполне конкретное решение неоднородной системы

$$B\mathbf{y} = \mathbf{b}.$$

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 $B\mathbf{y} = \mathbf{0}$, т.е. то количество решений, из которых состоит фундаментальная система решений однородной системы $B\mathbf{y} = \mathbf{0}$ [1].

¹ Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992, Москва; e-mail: arush@sccc.msu.ru

Рассмотрим расширенную матрицу системы $B\mathbf{y} = \mathbf{b}$:

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

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

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & b_{1,n-k+1}^* & \dots & b_{1,n}^* & b_1^* \\ \vdots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & b_{n-k,n-k+1}^* & \dots & b_{n-k,n}^* & b_{n-k}^* \end{array} \right).$$

Первые $n - k$ компонент вектора неизвестных

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

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 $B\mathbf{y} = \mathbf{b}$, равное

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

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

Далее, выберем k наборов свободных переменных

$$\begin{aligned} & \{1, 0, \dots, 0, 0\}, \\ & \{0, 1, \dots, 0, 0\}, \\ & \dots \dots \dots \\ & \{0, 0, \dots, 0, 1\}. \end{aligned}$$

Решая k однородных систем

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & b_{1,n-k+1}^* & \dots & b_{1,n}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & b_{n-k,n-k+1}^* & \dots & b_{n-k,n}^* \end{array} \right) \begin{pmatrix} y_{11} \\ \vdots \\ y_{1,n-k} \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} y_{k1} \\ \vdots \\ y_{k,n-k} \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

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

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

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

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

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

и одна задача Коши вида

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

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

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

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

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

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

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

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

Определим искомые значения этих коэффициентов из правого краевого условия

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

Отсюда имеем:

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

или

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

Расписав покомпонентно произведения $C \mathbf{y}_i(\beta)$, $i = 1, \dots, k + 1$, мы получим линейную систему из k уравнений с k неизвестными d_1, \dots, d_k с матрицей $C \mathbf{y}_i(\beta)$, $i = 1, \dots, k$, и вектором правой части $\mathbf{c} - C \mathbf{y}_{k+1}(\beta)$. 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 $\mathbf{y}(\beta)$ 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

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

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 $\mathbf{y}(x)$, 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, \dots, d_k . Правое краевое условие выполнено по построению коэффициентов d_1, \dots, d_k .

Заметим, что если бы при решении задач (3) и (4) мы запомнили векторы $\mathbf{y}_1(x), \dots, \mathbf{y}_k(x)$ и $\mathbf{y}_{k+1}(x)$ 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 $\mathbf{y}_1(x), \dots, \mathbf{y}_k(x)$, 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 общие решения задач (3) могут быть представлены в виде

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

где ξ_{ij} — постоянные, λ_j — собственные значения матрицы A , 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 $\mathbf{y}_i(x)$ становятся все более и более коллинеарными (как бы “слипаются”). Тогда при решении системы (6) для определения коэффициентов d_1, \dots, d_k матрица $C\mathbf{y}_i(\beta)$ будет иметь почти линейно зависимые столбцы, т.е. матрица системы (6) окажется плохо обусловленной. Следовательно, коэффициенты d_1, \dots, 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 $\alpha < \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m = \beta$, которые назовем точками ортогонализации. Эти точки надо взять настолько частыми, чтобы процесс “слипания” векторов $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k$ не привел при подходе к каждой следующей точке ортогонализации к большой потере значащих цифр из-за роста вычислительной погрешности, если среди решений $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k$ однородной системы $\mathbf{y}' = A(x)\mathbf{y}$ есть быстро растущие с ростом x . Будем решать задачи (3) и (4) до первой точки ортогонализации α_1 . Рассмотрим матрицу

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

размеров $n \times (k+1)$, столбцы которой совпадают с векторами $\mathbf{y}_i(\alpha_1)$, $i = 1, \dots, k+1$. 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

и

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

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

$$\mathbf{y}(x) = \mathbf{y}_{k+1}(x) + d_1 \mathbf{y}_k(x) + \dots + d_k \mathbf{y}_1(x) \tag{11}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

$$\mathbf{y}(\beta) = \mathbf{y}_{k+1}^{(m-1)} + d_1 \mathbf{y}_1^{(m-1)} + \dots + d_k \mathbf{y}_k^{(m-1)}. \quad (12)$$

В силу равенства

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

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

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

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

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

или

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

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

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

Здесь $\mathbf{y}_i^{(m)}$, $i = 1, \dots, k$, есть столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$. Так как столбцы матрицы $Y^{(m)}(\alpha_m)$ ортогональны, то квадратная матрица $C\mathbf{y}_i^{(m)}$, $i = 1, \dots, k$, 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, \dots, 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 $R(\alpha_s)$, $s = 1, \dots, m$, то для получения решения исходной задачи в узлах ортогонализации $\alpha_1, \dots, \alpha_{m-1}$ 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

$$\mathbf{y}(x) = \mathbf{y}_{k+1}^{(s-1)}(x) + d_1^{(s-1)} \mathbf{y}_1^{(s-1)}(x) + \dots + d_k^{(s-1)} \mathbf{y}_k^{(s-1)}(x), \quad (13)$$

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

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

где $\mathbf{y}_i^{(s)}(x)$, $i = 1, \dots, k+1$, 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:

$$\mathbf{y}(\alpha_s) = \mathbf{y}_{k+1}^{(s-1)}(\alpha_s) + d_1^{(s-1)} \mathbf{y}_1^{(s-1)}(\alpha_s) + \dots + d_k^{(s-1)} \mathbf{y}_k^{(s-1)}(\alpha_s), \quad (14)$$

$$\mathbf{y}(\alpha_s) = r_{k+1,k+1}^{(\alpha_s)} \mathbf{y}_{k+1}^{(s)}(\alpha_s) + d_1^{(s)} \mathbf{y}_1^{(s)}(\alpha_s) + \dots + d_k^{(s)} \mathbf{y}_k^{(s)}(\alpha_s). \quad (15)$$

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

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

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

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

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

$$\mathbf{y}(\alpha_s) = U^{(s)}(\alpha_s) \mathbf{d}^{(s)}, \quad (17)$$

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

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

Из (16) и (17) получаем

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

или

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

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

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

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

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

представляющим собой линейную систему с треугольной матрицей $T(\alpha_s)$. Поскольку вектор $\mathbf{d}^{(m)}$ нам известен, то по этому рекуррентному соотношению мы последовательно находим $\mathbf{d}^{(m-1)}, \mathbf{d}^{(m-2)}, \dots, \mathbf{d}^{(1)}$. 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 $\mathbf{d}^{(s)}$ — прогоночными матрицами и прогоночными векторами.

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

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

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

Изложенный метод без запоминания прогоночных матриц, возникающих в процессе ортогонализации, реализован С. Ф. Залёткиным в виде комплекса программ на Фортране (в настоящее время этот комплекс оформлен также и на языке Си), 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., Залёткин 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., Монастырский П.И. Вычислительные методы. Т. 2. М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию
25.09.2001