



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[М.А. Бочев](#)

Сравнение
экспоненциальных и
неявных схем
интегрирования по времени
для нестационарных задач
адвекции-диффузии на
неравномерных сетках

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бочев М.А. Сравнение экспоненциальных и неявных схем интегрирования по времени для нестационарных задач адвекции-диффузии на неравномерных сетках // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 119. 18 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-119>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-119>

**ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

М.А.Бочев

**Сравнение экспоненциальных и неявных схем
интегрирования по времени
для нестационарных задач адвекции-диффузии
на неравномерных сетках**

Москва — 2020

Бочев М.А.

Сравнение экспоненциальных и неявных схем интегрирования по времени для нестационарных задач адвекции-диффузии на неравномерных сетках

Интегрирование по времени задач адвекции-диффузии с доминирующей адвекцией на сетках со сгущением может быть весьма трудной задачей. Локальное сгущение сетки нередко приводит к существенному ограничению на шаг по времени явных схем, в то время как неявные схемы, как правило, не подходят для интегрирования адвективных членов. В работе показано, что в этом случае эффективным и в то же время концептуально простым подходом могут быть экспоненциальные схемы. Представлены результаты тестов для трёх экспоненциальных схем интегрирования по времени и неявной двухстадийной схемы Розенброка ROS2. Последняя схема является популярной альтернативой методам расщепления при решении задач адвекции-диффузии.

Ключевые слова: адвекция-диффузия, сгущение сетки, экспоненциальные схемы интегрирования по времени, методы подпространства Крылова

Mikhail A. Botchev

Comparison of exponential and implicit time integrators for unsteady advection–diffusion problems on refined meshes

Time integration of advection dominated advection–diffusion problems on refined meshes can be a challenging task, since local refinement can lead to a severe time step restriction, whereas standard implicit time stepping is usually hardly suitable for treating advection terms. We show that exponential time integrators can be an efficient, yet conceptually simple, option in this case. Our comparison includes three exponential integrators and one conventional scheme, the two-stage Rosenbrock method ROS2 which has been a popular alternative to splitting methods for solving advection–diffusion problems.

Key words: advection-diffusion, grid refinement, exponential time integrators, Krylov subspace methods

Оглавление

Введение	3
Формулировка задачи и методы	5
Численные тесты	9
Выводы	13
Список литературы	14

Введение

Интегрирование по времени нестационарных задач адвекции-диффузии, дискретизированных по пространству на локально сгущённых сетках, может вызывать существенные трудности. Особенно часто это наблюдается для задач с доминирующей адвекцией. С одной стороны, требования точности, монотонности, уменьшении тотальной вариации (total variation diminishing, TVD) и другие обычно исключают использование неявных схем для интегрирования адвективных членов [1, гл. III.1.3] (одно из исключений из этого правила представлено в [2]). С другой стороны, сетки с локальным сгущением могут налагать серьёзные ограничения на шаг по времени явных схем, что делает эти схемы малоэффективными.

В рамках метода прямых, т.е. когда дискретизация по пространству предшествует интегрированию по времени, существуют различные подходы для преодоления этих трудностей. Простым и широко используемым подходом является операторное расщепление [1, гл. IV],[3, гл. 3] (см. также [4, 5, 6]), когда адвекция обычно интегрируется явно по времени, а диффузия — неявно.

Методы расщепления являются концептуально простыми и лёгкими в использовании, но неизбежно дают ошибки расщепления, см., например, [7, 8]. Кроме того, в некоторых случаях в методах расщепления неясно, как правильно использовать краевые условия, и возможно понижение порядка точности [9, 10]. Для снижения ошибок расщепления предложено несколько подходов, например, методы расщепления источника [11] и методы Розенброка [1, гл. IV.5]. Однако ни один из этих методов нельзя считать полностью решающим проблему негативных последствий расщепления.

Другие подходы для эффективного интегрирования по времени задач адвекции-диффузии включают в себя неявные-явные (implicit-explicit, IMEX) методы [1, гл. IV.4] и многоскоростные (multirate) методы [12, 13, 14]. Последняя группа методов, подразумевающих использование разных шагов по времени в разных подобластях пространственной области, концептуально сложна и требует значительных усилий при реализации.

В этой работе мы показываем, что в некоторых случаях экспоненциальные схемы интегрирования по времени могут быть эффективным и в то же время простым способом интегрирования по времени задач адвекции-диффузии на сетках с локальным сгущением. Подобно неявным схемам, экспоненциальные схемы обладают привлекательными свойствами устойчивости. Кроме того, экспоненциальные схемы также обладают превосходными свойствами точности и в некоторых случаях, особенно для линейных дифференциальных уравнений, способны давать точные решения решаемых задач Коши. Это свойство экспоненциальных схем существенно используется в данной работе.

Примером задачи Коши, которая может быть решена экспоненциальными

схемами точно, является задача

$$y'(t) = -Ay(t) + g, \quad y(0) = v, \quad t \in [0, T], \quad (1)$$

где $v, g \in \mathbb{R}^N$ заданы, а $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ представляет собой дискретизированный по пространству оператор адвекции-диффузии. Формулировка любой экспоненциальной схемы, как правило, включает в себя матричную экспоненту или подобные ей так называемые φ -функции. Точное решение $y(t)$ задачи (1) можно записать в виде

$$y(t) = v + t\varphi(-tA)(g - Av), \quad t \geq 0, \quad (2)$$

где должно быть вычислено матрично-векторное произведение (матвек) матричной функции $\varphi(-tA)$ и вектора $g - Av$. Функция φ здесь определена так [15, 16]:

$$\varphi(z) = \begin{cases} \frac{e^z - 1}{z}, & \text{для } z \neq 0, z \in \mathbb{C}, \\ 1, & \text{для } z = 0. \end{cases}$$

В случае $g \equiv 0$ выражение (2) сводится к известному соотношению $y(t) = \exp(-tA)v$, $t \geq 0$. Разумеется, и эта последняя формула, и формула (2) могут быть использованы для точного вычисления решений задач вида (1) «напрямую», то есть без какой-либо схемы интегрирования по времени, точность которой зависит от шага по времени. Такое «прямое» точное решение задач вида (1) также возможно, если g — заданная вектор-функция $g(t)$ времени t , см. [17]. Более того, для решения нелинейных дифференциальных уравнений в рамках этого подхода с успехом могут применяться итерации типа релаксации формы волны (waveform relaxation) [18]. В этом случае на каждой итерации релаксации формы волны экспоненциальной схемой решается линейная задача Коши вида (1). Такой подход привлекателен с точки зрения эффективности, поскольку нет необходимости устраивать процесс пошагового интегрирования по времени, и решение зачастую может быть получено сразу для всего временного интервала $t \in [0, T]$.

Экспоненциальные схемы интегрирования по времени — это быстро развивающаяся область исследований [15, 16]. Можно выделить два больших класса экспоненциальных схем: (1) схемы пошагового интегрирования, имеющие определённый порядок точности, где матричная экспонента или подобные ей матричные функции вычисляются на каждом шаге по времени; (2) схемы, которые, вообще говоря, дают точное решение задачи Коши и где матричная экспонента или подобные ей матричные функции задействованы сразу по определённому временному интервалу.

Первый класс схем включает в себя экстраполированную схему Эйлера второго порядка (ЭЭ2), обсуждаемую и тестируемую ниже, экспоненциальные

схемы Розенброка [19] и экспоненциальные схемы предиктор-корректор [20]. Примерами схем второго класса являются схема (2), применённая к задаче (1), экспоненциальные схемы релаксации формы волны [21], где решение задачи (3) ищется итерационно с заменой A на предобусловливатель $M \approx A$, и экспоненциальный метод блочного подпространства Крылова (БПК), рассматриваемый и тестируемый ниже. Отметим, что экспоненциальные схемы обоих классов могут применяться для решения нелинейных задач, в частности уравнений Навье-Стокса для сжимаемой [22, 23] и несжимаемой [24] среды.

В данной работе представлены результаты сравнений трёх экспоненциальных и одной обычной схем интегрирования по времени. Все тестируемые экспоненциальные схемы основаны на методах подпространства Крылова, обсуждаемых в [25, 17, 26]. Методы подпространства Крылова успешно используются для вычисления действия матричной экспоненты и подобных ей функций с восьмидесятых годов прошлого столетия: в хронологическом порядке мы упоминаем работы [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33]. Важным свойством методов подпространства Крылова, которое выгодно отличает их от других методов вычисления действий матричных функций $f(A)v$ для больших матриц A , является их адаптивность по отношению к спектральным свойствам A и к вектору v , см., например, [34]. Для эффективной работы методов подпространства Крылова часто требуется их перезапуск — механизм, позволяющий ограничить размерность подпространства Крылова при сохранении, насколько это возможно, сходимости [35, 36].

Данный препринт имеет следующую структуру. В следующем разделе формулируется задача и рассматриваются методы её решения. Третий раздел посвящён описанию численных тестов. Наконец, в последнем разделе сформулированы выводы.

Формулировка задачи и методы

Предположим, что линейное дифференциальное уравнение в частных производных типа адвекции-диффузии решается методом прямых и что после дискретизации по пространству получена задача Коши

$$y'(t) = -Ay(t) + g(t), \quad y(0) = v, \quad t \in [0, T]. \quad (3)$$

Здесь $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ представляет собой дискретизированный оператор адвекции-диффузии, а вектор-функция $g(t)$ может учитывать возможные нестационарные источники и краевые условия.

Экспоненциальные схемы интегрирования по времени. Вероятно, простейшей экспоненциальной схемой является экспоненциальный метод Эйлера, кото-

рый для задачи (3) имеет вид

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \varphi(-\Delta t A)(g_n - Ay_n), \quad (4)$$

где Δt — шаг по времени, y_n — численное решение в момент времени $t = \Delta tn$, а $g_n = g(\Delta tn)$. Формулировка метода вытекает из соотношения (2): метод даёт точное решение, если функция источника g постоянна. Для произвольной достаточно гладкой g нетрудно убедиться, что метод имеет первый порядок точности.

Используя экстраполяцию [37, 38], т.е. комбинируя решения метода, полученные с разными шагами по времени, можно получить методы порядка выше первого. Обычно говорят о глобальной или о локальной экстраполяциях. Под глобальной понимается экстраполяция, проведённая после выполнения всех шагов по времени. В схемах с локальной экстраполяцией экстраполяция выполняется на каждом шаге по времени. Глобально экстраполированный метод Эйлера второго порядка (ЭЭ2) рассмотрен в [17]:

- (1) выполнить $T/\Delta t$ шагов (4) с Δt , сохранить результат $y_{\Delta t}(T)$,
- (2) выполнить $2T/\Delta t$ шагов (4) с $\Delta t/2$, сохранить результат $y_{\Delta t/2}(T)$,
- (3) экстраполировать: $y_{\text{ЭЭ2}}(T) := 2y_{\Delta t/2}(T) - y_{\Delta t}(T)$,

где метод ЭЭ2 применялся в комбинации с пакетом EXPOKIT [25], использовавшимся для вычисления матрично-векторных произведений с матричной функцией φ . Функция `phi v` пакета EXPOKIT вычисляет действия матричной функции на вектор φ с помощью процесса Арнольди, где перезапуск выполняется шагами по времени, выбираемыми на основе специальной оценки ошибки. В экспериментах, представленных далее в данной работе, показано, что такая комбинация ЭЭ2/EXPOKIT может быть значительно улучшена введением контроля ошибки на основе невязки [39, 40, 41] и заменой перезапуска на невязочно-временной (НВ) перезапуск, предложенный в [26, 42].

ЭЭ2 — экспоненциальный интегратор первого типа, где матричные функции задействованы внутри пошагового процесса интегрирования по времени: на каждом шаге по времени действие φ вычисляется методом подпространства Крылова. Нередко оказывается более эффективным [43, 21] организовать вычисления так, чтобы матричные функции были задействованы сразу на каком-то временном интервале, не ограниченном шагом по времени. Например, как показано в [17], если на определённом временном интервале удаётся аппроксимировать

$$g(t) \approx Up(t), \quad U \in \mathbb{R}^{N \times m}, \quad p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad m \ll N, \quad (6)$$

то задачу (3) на этом интервале можно решить одной проекцией на блочное подпространство Крылова. Матрица U и функция p в (6) легко конструируются

усечённым сингулярным разложением матрицы со столбцами $g(t_i)$ при незначительных затратах [17]. Такая процедура одновременно даёт оценку ошибки аппроксимации (6), с помощью которой нетрудно подобрать нужное значение m .

Чтобы описать этот подход подробнее, рассмотрим (1), где для простоты изложения, не нарушая общности, предположим, что $v = 0$. Обычное решение задачи (1) методом подпространства Крылова подразумевает вычисление матрицы $V_k \in \mathbb{R}^{N \times k}$, ортонормальные столбцы которой формируют базис подпространства [34]

$$\text{span}(g, Ag, \dots, A^{k-1}g),$$

и поиск приближённого решения $y_k(t) = V_k u(t) \approx y(t)$ галёркинским проецированием задачи (1)

$$V_k^T V_k u'(t) = -V_k^T A V_k u(t) + V_k^T g \Leftrightarrow u'(t) = -H_k u(t) + \beta e_1, \quad (7)$$

где $H_k = V_k^T A V_k$, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^k$ — первый вектор канонического базиса и $\beta = \|g\|$. При этом $V_k^T g = V_k^T V_k (\beta e_1) = \beta e_1$, поскольку первый столбец матрицы V_k — это по построению $g/\|g\|$. Спроецированное дифференциальное уравнение (7) имеет малый размер ($k \ll N$) и может быть решено согласно формуле (2) вычислением $\varphi(-tH_k)$ с помощью хорошо развитых подходов, существующих для матриц малой размерности (см., например, [44]).

Теперь рассмотрим, по-прежнему предполагая $v = 0$, задачу (3), где $g(t)$ позволяет аппроксимацию (6). Проецируя (3) на блочное подпространство Крылова [45]

$$\text{span}(U, AU, \dots, A^{k-1}U) = \text{colspan} V_k, \quad V_k \in \mathbb{R}^{N \times km},$$

мы можем редуцировать задачу (3) к виду

$$u'(t) = -H_k u(t) + E_1 p(t), \quad (8)$$

где теперь $H_k \in \mathbb{R}^{km \times km}$, а $E_1 \in \mathbb{R}^{km \times m}$ — матрица, состоящая из первых m столбцов единичной матрицы размерности $km \times km$. Эти наблюдения позволяют получить метод блочного подпространства Крылова (БПК), описанный в [17].

Метод БПК использует остановочный критерий и перезапуск, основанные на концепции экспоненциальной невязки [39, 40, 41]. Точнее говоря, итерации метода БПК останавливаются, коль скоро невязка

$$r_k(t) \equiv -A y_k(t) + g(t) - y_k'(t), \quad t \in [0, T],$$

вычисленного приближённого решение $y_k(t)$ удовлетворяет

$$\|r_k(t)\| \leq \text{tol}, \quad t \in [0, T].$$

Алгоритм метода БПК можно описать так (подробности могут быть найдены в [17]):

- (1) вычислить аппроксимацию (6),
- (2) выполнить $k = 1, \dots, k_{\max}$ блочных шагов, вычислить V_k, H_k , (9)
- (3) решить спроецированное уравнение (8), вычислить $y_k(T) = V_k u(T)$.

Сравнивая схемы ЭЭ2 и БПК, мы видим, что привлекательным свойством схемы ЭЭ2 является её простота. С другой стороны, схема БПК привлекательна своей потенциальной эффективностью, поскольку одно блочное подпространство Крылова конструируется для всего временного интервала $t \in [0, T]$.

Метод ROS2: избегая расщепления. Методы Розенброка [1, гл. IV.5] являются популярной альтернативой методам расщепления. Они позволяют уменьшить ошибки расщепления и избежать других негативных последствий расщепления, таких как снижение порядка точности. Идеологически схемы Розенброка близки к методам расщепляющегося оператора и другим экономичным факторизованным схемам [5, гл. 10],[6, гл. IX]. Пусть $f(t, y) = -Ay(t) + g(t)$ — функция правой части дифференциального уравнения в (3). Двухстадийный метод Розенброка ROS2 имеет вид

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{3}{2}\Delta tk_1 + \frac{1}{2}\Delta tk_2, \\ (I - \gamma\Delta t\hat{A})k_1 &= f(t_n, y_n), \\ (I - \gamma\Delta t\hat{A})k_2 &= f(t_{n+1}, y_n + \Delta tk_1) - 2k_1. \end{aligned} \tag{10}$$

Этот метод имеет второй порядок точности для любой $\hat{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, но по соображениям устойчивости схемы обычно выбирают $\hat{A} \approx A$. Обычно \hat{A} соответствует тем членам в A , которые нужно интегрировать по времени неявно. Например, в работе [46] для решения задач адвекции-диффузии-реакции матрица \hat{A} выбирается так, чтобы

$$I - \gamma\Delta t\hat{A} = (I - \gamma\Delta tA_{\text{diff}})(I - \gamma\Delta tA_{\text{react}}),$$

где A_{diff} содержит диффузионные члены, а A_{react} — якобиан нелинейных уравнений реакции. В данной работе матрица \hat{A} берётся либо в виде всей матрицы A , либо в виде диффузионной части A_{diff} матрицы A . Следуя соображениям, изложенным в [1, гл. IV.5, замечание 5.2], мы берём $\gamma = 1$.

Численные тесты

Описанные в данной работе численные тесты выполнены в Матлабе на линукс-компьютере с шестью процессорами Intel Core i5-8400 2.80 ГГц с 16 Гб оперативной памяти.

Тест 1: зависящие от времени источник и краевые условия. В этом тесте решается задача (3), где A — конечно-элементная дискретизация двухмерного оператора адвекции-диффузии

$$L[u] = -\nu \nabla^2 u + \mathbf{v} \cdot \nabla u, \quad u = u(x, y), \quad (x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1], \quad (11)$$

где ν — параметр вязкости, а $\mathbf{v} = [v_1(x, y), v_2(x, y)]$ — поле скоростей,

$$v_1(x, y) = y(1 - x^2), \quad v_2(x, y) = x(y^2 - 1).$$

В этом тесте функция $g(t)$ в (3) задаётся как

$$g(t) \equiv y'_{\text{ex}}(t) + Ay_{\text{ex}}(t),$$

где $y_{\text{ex}}(t)$ — функция точного решения, выбранная так:

$$\begin{aligned} y_{\text{ex}}(t) &= \alpha(t)(A^{-1}g_{\text{bc}} + T\varphi(-TA)g_{\text{peak}}), \\ \alpha(t) &= 1 - e^{-t/300} + e^{-t/100}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $g_{\text{bc}} \in \mathbb{R}^N$ — это вектор, содержащий значения краевых условий Дирихле, описанных ниже, а вектор $g_{\text{peak}} \in \mathbb{R}^N$ содержит значения функции $e^{-10x^2 - 50y^2}$ на сетке. Краевые условия, налагаемые g_{bc} , такие:

$$u(-1, y) = u(1, y) = u(x, -1) = 5, \quad u(x, 1) = 5 + 5e^{-50x^2}.$$

Заметим, что $A^{-1}g_{\text{bc}}$ — стационарное решение задачи (3) при $g(t) \equiv g_{\text{bc}}$, а $T\varphi(-TA)g_{\text{peak}}$ — решение (3) при $g(t) \equiv g_{\text{peak}}$ в момент времени $t = T$. Конечно-время в этом тесте — $T = 1000$. На рис. 1 представлено точное решение $y_{\text{ex}}(T)$.

Для дискретизации применялся конечно-элементный пакет IFISS [47, 48] и брались билинейные базисные функции на четырёхугольниках (Q_1) со стабилизацией SUPG (streamline upwind Petrov–Galerkin stabilization). Расчёты проводились для вязкости $\nu = 1/6400$ на неравномерных декартовых сетках 256×256 и 512×512 , сгущающихся около границ области, со стандартными параметрами сгущения пакета IFISS, см. табл. 1.

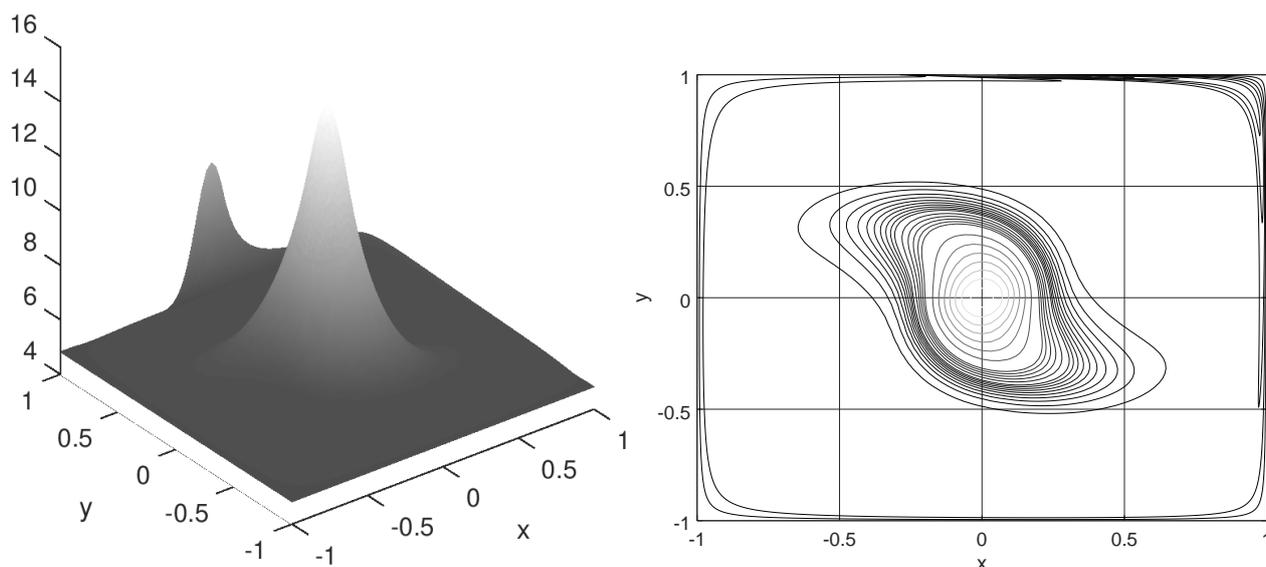


Рис. 1. Функция решения (12) на сетке 256×256 в момент времени $t = T = 1000$ как трёхмерный график (слева) и как линии уровня (справа).

Таблица 1. Параметры неравномерных декартовых сеток пакета IFISS, использованных в тестах. Здесь h — шаг сетки по направлениям x и y .

сетка	$\min h$	$\max h$	$\frac{\max h}{\min h}$	$\max.\text{elem.}Pe$
256×256	5.98e-04	0.0312	52.17	2.00e+02
512×512	2.01e-04	0.0176	87.55	1.12e+02

Таблица 2. Ошибка аппроксимации (6), сетка 256×256 . Ошибка метода БПК получена для допустимой точности $\text{tol} = 10^{-6}$.

n_s	$\max_{s \in [0, T]} \ g(s) - Up(s)\ $	$\frac{\int_0^T \ g(s) - Up(s)\ ds}{\int_0^T \ g(s)\ ds}$	ошибка БПК (13)
30	2.37e-03	1.82e-05	2.24e-05
60	1.27e-04	9.83e-07	1.23e-06
120	7.40e-06	5.73e-08	7.90e-08

При сборке матрицы адвекции-диффузии пакет IFISS выдаёт значения максимального сеточного числа Пекле, вычисляемого для каждого конечного элемента так:

$$\frac{1}{2\nu} \min \left\{ \frac{h_x}{\cos \alpha}, \frac{h_y}{\sin \alpha} \right\} \|\mathbf{v}\|_2, \quad \alpha = \arctan \frac{v_2}{v_1},$$

где $h_{x,y}$ и $v_{1,2}$ — соответственно размеры элемента (шаг сетки) и компоненты скорости. Значения максимального сеточного числа Пекле для использованных сеток также даны в табл. 1. За счёт стабилизации SUPG получаемые на обе-

Таблица 3. Тестовая задача 1. Результаты для сетки 256×256 .

метод	проц. время, с ^a	выч.функц. ^b , реш.лин.с. ^c	ошибка
БПК, $\text{tol} = 10^{-4}$	0.36	20, —	8.01e-08
БПК, $\text{tol} = 10^{-6}$	0.40	24, —	7.90e-08
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 20, \text{tol} = 10^{-4}$	1.84	500, —	1.51e-03
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 10, \text{tol} = 10^{-4}$	3.52	900, —	3.79e-04
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 5, \text{tol} = 10^{-4}$	6.93	1800, —	9.50e-05
ЭЭ2/EXPOKIT, $\Delta t = 20, \text{tol} = 10^{-4}$	17.99	9408, —	1.51e-03
ЭЭ2/EXPOKIT, $\Delta t = 10, \text{tol} = 10^{-4}$	24.53	12608, —	3.79e-04
ЭЭ2/EXPOKIT, $\Delta t = 5, \text{tol} = 10^{-4}$	37.74	19200, —	9.50e-05
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 20$	1.95	100, 100	3.03e-03
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 10$	3.59	200, 200	7.60e-04
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 5$	6.85	400, 400	1.91e-04
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 2$	19.55	1000, 1000	8.49e-04
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 1$	34.72	2000, 2000	7.59e-06
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 0.5$	68.33	4000, 4000	1.90e-06

^a процессорное время

^b число вычислений функции правой части или матвек произведений

^c число решений линейных систем

их сетках матрицы слабо несимметричны: отношение $\|A - A^T\|_1 / \|A + A^T\|_1$ оказывается равным примерно 0.022 (сетка 256×256) и 0.012 (сетка 512×512).

Метод БПК требует для работы три входных параметра: требуемую точность, число членов усечённого сингулярного разложения m и число n_s образцов $g(t_1), g(t_2), \dots, g(t_{n_s})$ для построения аппроксимации (6).

Из определения задачи ясно, что для любого t $y_{\text{ex}}(t)$ является линейной комбинацией двух линейно независимых векторов. Поэтому $g(t)$ — это линейная комбинация не более четырёх векторов, и следует брать $m \leq 4$. Реальная ситуация выявляется сингулярными числами, полученными усечённым сингулярным разложением: наибольшее из отсечённых сингулярных чисел σ_{m+1} является верхней границей ошибки $\|g(t) - Up(t)\|_2$, см., например, [49]. В данном случае оказывается, что достаточно взять $m = 2$.

Правильное число образцов n_s может быть оценено по функции $\alpha(t)$ или вычислением для построенных U и $p(t)$ реальной ошибки $\|g(t) - Up(t)\|$ апостериори, см. табл. 2. На основании таблицы мы берём $n_s = 120$ во всех запусках метода БПК для этого теста. Такая процедура выбора n_s вычислительно экономична и легко может быть выполнена один раз, до всех тестовых запусков.

Поскольку задача двумерная, линейные системы с матрицей A могут быть

эффективно решены прямыми разреженными методами. Поэтому для решения линейных систем в методе ROS2 использовалось стандартное разреженное LU разложение (пакета UMFPACK в Матлабе), которое вычислялось один раз и применялось на каждом шаге по времени. Значения ошибки, приводимые ниже, получены так:

$$\text{ошибка} = \frac{\|y(T) - y_{\text{ex}}(T)\|_2}{\|y_{\text{ex}}(T)\|_2}. \quad (13)$$

Результаты тестовых прогонов представлены в табл. 3 и 4. Как видим, метод БПК оказывается более эффективным, чем остальные методы. Далее заметим, что смена крыловского решателя внутри схемы ЭЭ2 с `phiv` пакета EXPOKIT на наш алгоритм с НВ перезапуском [26, 42] приводит к повышению эффективности схемы ЭЭ2. Следует, однако, подчеркнуть, что необходимости в перезапуске, как правило, не возникает, так как из-за небольшого шага по времени Δt в схеме ЭЭ2 на каждом шаге выполняется лишь несколько крыловских итераций. Таким образом, метод ЭЭ2/НВ превосходит ЭЭ2/EXPOKIT не за счёт перезапуска, а за счёт более адекватной оценки ошибки, основанной в методе ЭЭ2/НВ на контроле невязки. Разумеется, правильная оценка ошибки при вычислении матричной функции φ в схеме ЭЭ2 принципиально важна: избыточное число крыловских итераций на каждом шаге по времени означает потерю схемой экономичности, недостаточное число может привести к неточности и неустойчивости схемы.

Из табл. 3 и 4 мы также видим, что метод Розенброка ROS2 на мелкой сетке становится менее эффективным, чем ЭЭ2/НВ, когда затраты на решение линейных систем становятся заметнее.

Тест 2: зависящие от времени краевые условия. Успешная работа метода БПК в первом тесте, вероятно, обусловлена выбором функции источника, обеспечивавшим быструю сходимость. Хотя подобная ситуация не исключение, рассмотрим другой тест, более трудный для метода БПК. В этом тесте матрица A берётся так же, как в первом тесте, а вектор v и функция источника $g(t)$ следующим образом:

$$g(t) = \alpha(t)g_{\text{bc}}, \quad v = -T\varphi(-TA)g_{\text{peak}},$$

где $\alpha(t)$ и g_{bc} заданы в (12). В этом тесте точное решение неизвестно, поэтому вычисляем точное решение $y_{\text{ref}}(t)$ методом ЭЭ2/НВ, запущенным с очень малым шагом по времени. Ошибки полученных численных решений $y(t)$, приведённые ниже, вычисляются по отношению к $y_{\text{ref}}(t)$ так:

$$\text{ошибка} = \frac{\|y(T) - y_{\text{ref}}(T)\|_2}{\|y_{\text{ref}}(T)\|_2}.$$

Таблица 4. Тест 1. Результаты для сетки 512×512 .

метод	проц. время, с ^a	выч.функц. ^b , реш.лин.с. ^c	ошибка
БПК, $\text{tol} = 10^{-4}$	1.26	4, —	3.08e-08
БПК, $\text{tol} = 10^{-6}$	1.31	8, —	2.33e-08
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 20, \text{tol} = 10^{-4}$	9.10	450, —	8.91e-04
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 10, \text{tol} = 10^{-4}$	17.97	900, —	2.40e-04
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 5, \text{tol} = 10^{-4}$	35.90	1800, —	8.07e-05
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 20$	11.82	100, 100	1.90e-03
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 10$	22.68	200, 200	5.46e-04
ROS2, $\hat{A} = A, \Delta t = 5$	36.91	400, 400	1.85e-04
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 2$	86.55	1000, 1000	5.73e-03
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 1$	167.95	2000, 2000	4.44e-06
ROS2, $\hat{A} = A_{\text{diff}}, \Delta t = 0.5$	331.38	4000, 4000	1.11e-06

^a процессорное время

^b число вычислений функции правой части или матвек произведений

^c число решений линейных систем

Отметим, что $y_{\text{ref}}(t)$ и $y(t)$ вычислены на одной и той же пространственной сетке и, следовательно, содержат примерно одинаковую ошибку по пространству. Поэтому разницу этих решений можно считать надёжным индикатором ошибки по времени.

Из определения задачи следует, что число членов m усечённого сингулярного разложения в соотношении (6) не может превышать 2. Поэтому в этом тесте метод БПК выполняется с размером блока $m = 2$. Число образцов функции источника определяется так же, как и в первом тесте, и получает значение $n_s = 80$. В этом тесте мы сравниваем два решателя, оказавшиеся наиболее эффективными в первом тесте, — БПК и ЭЭ2/НВ. Результаты, представленные в табл. 5, показывают, что метод БПК требует больше затрат, чем в первом тесте, но по-прежнему значительно более эффективен, чем ЭЭ2/НВ.

Выводы

Сравнение методов показывает эффективность экспоненциальных схем интегрирования по времени при решении задач адвекции-диффузии. В представленных тестах они превосходят современные неявные-явные методы интегрирования по времени — методы Розенброка ROS2.

Среди экспоненциальных схем метод БПК, где матричные функции задействованы на всём временном интервале, а не заново на каждом шаге по времени, оказывается наиболее эффективным.

Таблица 5. Тест 2. Результаты для сетки 256×256 .

метод	проц. время, с ^a	выч.функц. ^b , реш.лин.с. ^c	ошибка
БПК, $\text{tol} = 10^{-4}$, $n_s = 80$	0.77	36, —	1.83e-05
БПК, $\text{tol} = 10^{-6}$, $n_s = 80$	1.32	50, —	1.91e-07
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 10$, $\text{tol} = 10^{-6}$	6.53	1306, —	8.91e-05
ЭЭ2/НВ, $\Delta t = 5$, $\text{tol} = 10^{-6}$	11.54	2406, —	5.58e-05

^a процессорное время

^b число вычислений функции правой части или матвек произведений

^c число решений линейных систем

Список литературы

- [1] Hundsdorfer W., Verwer J. G. Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations. — Springer Verlag, 2003.
- [2] Lie K.-A., Mykkeltvedt T. S., Møyner O. A fully implicit WENO scheme on stratigraphic and unstructured polyhedral grids // Computational Geosciences. — 2020. — Vol. 24, no. 2. — P. 405–423.
- [3] Zlatev Z. Computer treatment of large air pollution models. — Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [4] Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — Новосибирск : Наука. Сибирское отделение., 1967. — <http://www.prometeus.nsc.ru/math/yanenko/pdf/013.pdf>.
- [5] Годунов С. К., Рябенький В. С. Разностные схемы: введение в теорию. — Наука, 1973.
- [6] Самарский А. А. Теория разностных схем. — Москва : Наука, 1989.
- [7] Lanser D., Verwer J. G. Analysis of operator splitting for advection–diffusion–reaction problems from air pollution modelling // J. Comput. Appl. Math. — 1999. — Vol. 111, no. 1–2. — P. 201–216.
- [8] Csomós P., Faragó I., Havasi Á. Weighted sequential splittings and their analysis // Computers & Mathematics with Applications. — 2005. — Vol. 50, no. 7. — P. 1017–1031.
- [9] Sommeijer B. P., van der Houwen P. J., Verwer J. G. On the treatment of time-dependent boundary conditions in splitting methods for parabolic differential equations // J. Numer. Methods Engrg. — 1981. — Vol. 17, no. 3. — P. 335–346. — Access mode: <https://doi.org/10.1002/nme.1620170304>.

- [10] Einkemmer L., Ostermann A. Overcoming order reduction in diffusion-reaction splitting. part 1: Dirichlet boundary conditions // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2015. — Vol. 37, no. 3. — P. A1577–A1592. — Access mode: <https://doi.org/10.1137/140994204>.
- [11] Verwer J. G., Hundsdorfer W., Blom J. G. Numerical time integration for air pollution models // *Surveys for Mathematics in Industry.* — 2002. — Vol. 10. — P. 107–174. — <https://ir.cwi.nl/pub/4620>.
- [12] Savcenco V., Hundsdorfer W., Verwer J. G. A multirate time stepping strategy for stiff ordinary differential equations // *BIT Numerical Mathematics.* — 2007. — Vol. 47, no. 1. — P. 137–155.
- [13] Constantinescu E. M., Sandu A. Multirate timestepping methods for hyperbolic conservation laws // *Journal of Scientific Computing.* — 2007. — Vol. 33, no. 3. — P. 239–278.
- [14] Multirate Runge–Kutta schemes for advection equations / Martin Schlegel, Oswald Knoth, Martin Arnold, Ralf Wolke // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* — 2009. — Vol. 226, no. 2. — P. 345–357. — Access mode: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2008.08.009>.
- [15] Hochbruck M., Ostermann A. Exponential integrators // *Acta Numer.* — 2010. — Vol. 19. — P. 209–286.
- [16] Галанин М. П., Конев С. А. О методе Лоусона и условиях жесткого порядка для экспоненциальных методов // *Препринты Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.* — 2018. — no. 261. — P. 1–26.
- [17] Botchev M. A. A block Krylov subspace time-exact solution method for linear ordinary differential equation systems // *Numer. Linear Algebra Appl.* — 2013. — Vol. 20, no. 4. — P. 557–574. — <http://dx.doi.org/10.1002/nla.1865>.
- [18] Kooij G. L., Botchev M. A., Geurts B. J. A block Krylov subspace implementation of the time-parallel Paraexp method and its extension for nonlinear partial differential equations // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* — 2017. — Vol. 316, no. Supplement C. — P. 229–246. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.09.036>.
- [19] Hochbruck M., Ostermann A., Schweitzer J. Exponential Rosenbrock-type methods // *SIAM J. Numer. Anal.* — 2008/09. — Vol. 47, no. 1. — P. 786–803. — <http://dx.doi.org/10.1137/080717717>.

- [20] An exponential time-integrator scheme for steady and unsteady inviscid flows / Shu-Jie Li, Li-Shi Luo, Z. J. Wang, Lili Ju // *Journal of Computational Physics*. — 2018. — Vol. 365. — P. 206–225.
- [21] Botchev M. A., Oseledets I. V., Tyrtshnikov E. E. Iterative across-time solution of linear differential equations: Krylov subspace versus waveform relaxation // *Computers & Mathematics with Applications*. — 2014. — Vol. 67, no. 12. — P. 2088–2098. — <http://dx.doi.org/10.1016/j.camwa.2014.03.002>.
- [22] Li S.-J. Efficient p -multigrid method based on an exponential time discretization for compressible steady flows. — arXiv preprint 1807.01151. — 2018. — <https://arxiv.org/abs/1807.01151>.
- [23] Li S.-J. Time advancement of the Navier-Stokes equations: p -adaptive exponential methods // *Journal of Flow Control, Measurement & Visualization*. — 2020. — Vol. 8, no. 2. — P. 63–76.
- [24] Kooij G., Botchev M. A., Geurts B. J. An exponential time integrator for the incompressible Navier–Stokes equation // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2018. — Vol. 40, no. 3. — P. B684–B705. — <https://doi.org/10.1137/17M1121950>.
- [25] Sidje R. B. Expokit. A software package for computing matrix exponentials // *ACM Trans. Math. Softw.* — 1998. — Vol. 24, no. 1. — P. 130–156. — www.maths.uq.edu.au/expokit/.
- [26] Botchev M. A., Knizhnerman L. A. ART: Adaptive residual-time restarting for Krylov subspace matrix exponential evaluations // *J. Comput. Appl. Math.* — 2020. — Vol. 364. — P. 112311. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.027>.
- [27] Park T. J., Light J. C. Unitary quantum time evolution by iterative Lanczos reduction // *J. Chem. Phys.* — 1986. — Vol. 85. — P. 5870–5876.
- [28] van der Vorst H. A. An iterative solution method for solving $f(A)x = b$, using Krylov subspace information obtained for the symmetric positive definite matrix A // *J. Comput. Appl. Math.* — 1987. — Vol. 18. — P. 249–263.
- [29] Druskin V. L., Knizhnerman L. A. Two polynomial methods of calculating functions of symmetric matrices // *U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys.* — 1989. — Vol. 29, no. 6. — P. 112–121.

- [30] Knizhnerman L. A. Calculation of functions of unsymmetric matrices using Arnoldi's method // U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys. — 1991. — Vol. 31, no. 1. — P. 1–9.
- [31] Saad Y. Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator // SIAM J. Numer. Anal. — 1992. — Vol. 29, no. 1. — P. 209–228.
- [32] Druskin V. L., Knizhnerman L. A. Krylov subspace approximations of eigenpairs and matrix functions in exact and computer arithmetic // Numer. Lin. Alg. Appl. — 1995. — Vol. 2. — P. 205–217.
- [33] Hochbruck M., Lubich C. On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator // SIAM J. Numer. Anal. — 1997. — Oct. — Vol. 34, no. 5. — P. 1911–1925.
- [34] van der Vorst H. A. Iterative Krylov methods for large linear systems. — Cambridge University Press, 2003.
- [35] Eiermann M., Ernst O. G. A restarted Krylov subspace method for the evaluation of matrix functions // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 2006. — Vol. 44. — P. 2481–2504.
- [36] Güttel S., Frommer A., Schweitzer M. Efficient and stable Arnoldi restarts for matrix functions based on quadrature // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2014. — Vol. 35, no. 2. — P. 661–683.
- [37] Botchev M. A., Verwer J. G. Numerical integration of damped Maxwell equations // SIAM J. Sci. Comput. — 2009. — Vol. 31, no. 2. — P. 1322–1346. — <http://dx.doi.org/10.1137/08072108X>.
- [38] Richardson extrapolation: Practical aspects and applications / Zahari Zlatev, Ivan Dimov, István Faragó, Ágnes Havasi. — De Gruyter, 2018.
- [39] Celledoni E., Moret I. A Krylov projection method for systems of ODEs // Appl. Numer. Math. — 1997. — Vol. 24, no. 2-3. — P. 365–378.
- [40] Druskin V. L., Greenbaum A., Knizhnerman L. A. Using nonorthogonal Lanczos vectors in the computation of matrix functions // SIAM J. Sci. Comput. — 1998. — Vol. 19, no. 1. — P. 38–54.
- [41] Botchev M. A., Grimm V., Hochbruck M. Residual, restarting and Richardson iteration for the matrix exponential // SIAM J. Sci. Comput. — 2013. — Vol. 35, no. 3. — P. A1376–A1397. — <http://dx.doi.org/10.1137/110820191>.

- [42] Botchev M. A., Knizhnerman L. A., Tyrtyshnikov E. E. A residual concept for Krylov subspace evaluation of the φ matrix function. — Preprint arXiv:2010.08494. — 2020. — October. — <https://arxiv.org/abs/2010.08494>.
- [43] Botchev M. A. Krylov subspace exponential time domain solution of Maxwell's equations in photonic crystal modeling // J. Comput. Appl. Math. — 2016. — Vol. 293. — P. 24–30. — <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2015.04.022>.
- [44] Higham N. J. Functions of Matrices: Theory and Computation. — Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.
- [45] van der Vorst H. A. Computational methods for large eigenvalue problems. — Lecture Notes. — 2000. — October. — www.math.uu.nl/people/vorst/lecture.html.
- [46] A second order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems / Jan G. Verwer, Edwin J. Spee, Joke G. Blom, Willem Hundsdorfer // SIAM J. Sci. Comput. — 1999. — Vol. 20. — P. 456–480.
- [47] Silvester D. J., Elman H. C., Ramage A. Incompressible flow & iterative solver software. — <http://www.manchester.ac.uk/ifiss/>. — 2019.
- [48] Elman H. C., Ramage A., Silvester D. J. IFISS: A computational laboratory for investigating incompressible flow problems // SIAM Review. — 2014. — Vol. 56, no. 2. — P. 261–273.
- [49] Golub G. H., Van Loan C. F. Matrix Computations. — Third edition. — Baltimore and London : The Johns Hopkins University Press, 1996. — P. 694.