



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

М.А. Бочев

Решение анизотропных
уравнений теплопроводности
экспоненциальными схемами
на крыловских
полиномиальных
подпространствах и
подпространствах «сдвиг-
обращение»

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бочев М.А. Решение анизотропных уравнений теплопроводности экспоненциальными схемами на крыловских полиномиальных подпространствах и подпространствах «сдвиг-обращение» // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 4. 17 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-4>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-4>

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

М.А. Бочев

**Решение анизотропных уравнений
теплопроводности экспоненциальными схемами
на крыловских полиномиальных
подпространствах и подпространствах
«сдвиг-обращение»**

Москва — 2022

Бочев М.А.

Решение анизотропных уравнений теплопроводности экспоненциальными схемами на крыловских полиномиальных подпространствах и подпространствах «сдвиг-обращение»

Для решения класса параболических задач с сильной анизотропией в коэффициентах тестируется работа экспоненциальных схем интегрирования по времени на основе крыловских подпространств. Рассматриваются различные краевые условия, которые влияют на минимальное собственное значение дискретизированного оператора и, следовательно, на сходимость экспоненциальных крыловских решателей. Рассмотрены методы на основе полиномиальных подпространств Крылова и подпространств Крылова типа «сдвиг-обращение» в сочетании с алгебраическим многосеточным методом.

Ключевые слова: экспоненциальное интегрирование по времени, подпространства Крылова, подпространства Крылова типа «сдвиг-обращение», анизотропия

Mikhail A. Botchev

Solving anisotropic heat equations by exponential shift-and-invert and polynomial Krylov subspace methods

We assess performance of the exponential Krylov subspace methods for solving a class of parabolic problems with a strong anisotropy in coefficients. Different boundary conditions are considered, which have a direct impact on the smallest eigenvalue of the discretized operator and, hence, on the convergence behavior of the exponential Krylov subspace solvers. Restarted polynomial Krylov subspace methods and shift-and-invert Krylov subspace methods combined with algebraic multigrid are considered.

Key words: exponential time integration, Krylov subspace methods shift-and-invert Krylov subspace methods, anisotropy

Оглавление

Введение	3
Тестовая задача и методы	4
Численные эксперименты	7
Выводы	12
Список литературы	14

Введение

Экспоненциальные схемы интегрирования по времени считаются эффективным средством решения реальных прикладных задач [1, 2, 3] и являются активно развивающейся областью исследований [4]. Эти схемы обладают хорошими свойствами устойчивости, позволяют получать решения различных эволюционных задач с высокой точностью и особенно эффективны для решения параболических уравнений. Характерным свойством экспоненциальных схем является то, что схемы точны для определённого класса линейных задач и включают в себя матричную экспоненту [5, 6, 7] или другие матричные функции (для гиперболических задач это может быть, например, матричный косинус). Для параболических задач, помимо матричной экспоненты, эти схемы могут включать в себя матричную функцию φ , определяемую так:

$$\varphi(z) \equiv \frac{e^z - 1}{z}, \quad (1)$$

где по определению полагаем $\varphi(0) \equiv 1$. Чтобы вычислять матрично-векторные произведения с этими матричными функциями в задачах большой размерности, существуют различные подходы вычислительной линейной алгебры. Они могут быть основаны на полиномах Чебышёва, масштабировании и квадратуре приближений Тейлора или Паде, методе вещественных точек Лея и других подходах, см., например, [8, 9, 10, 11, 12]. Универсальным и эффективным подходом для вычисления действия матричных экспоненты и функции φ являются методы, использующие подпространство А.Н. Крылова [13, 14], среди публикаций по которым отметим первые работы по матричным функциям [15, 16, 17, 18, 19, 20].

Хотя экспоненциальные схемы показали себя успешными для решения некоторых крупномасштабных задач [21, 22], их эффективность для конкретных областей применения часто ещё предстоит доказать. Это, в частности, относится к приложениям, основанным на параболических уравнениях в частных производных. Для этих задач разработаны многочисленные эффективные подходы к интегрированию по времени, включая методы расщепления, линеаризованные схемы Рунге-Кутты, явные итерационные схемы и многие другие методы, см., например, [23]. Существует несколько причин, по которым в реальных вычислениях эти обычные схемы интегрирования по времени могут быть более эффективными, чем, на первый взгляд, очень многообещающие экспоненциальные схемы. Во-первых, экспоненциальные схемы интегрирования по времени могут приводить к слишком точным и, следовательно, потенциально слишком дорогим с точки зрения вычислительных затрат результатам [24]. Напомним, что при численном решении начально-краевых задач в общей ошибке обычно преобладает ошибка дискретизации по пространству [23], так что зачастую нет необходимости интегрировать эти задачи по времени с большой точностью. Во-

вторых, современные реализации традиционных схем интеграции по времени часто основаны на эффективных численных методах линейной алгебры, таких как методы подпространства Крылова [25, 26] или высокопараллельные итерации Чебышёва и многосеточные методы [27, 28]. Следовательно, обычная схема неявного интегрирования по времени, включающая, например, оптимизированный решатель линейных систем на подпространствах Крылова, может быть весьма схожа по вычислительной сложности с экспоненциальными схемами интегрирования по времени на подпространствах Крылова.

Цель этой статьи — оценить производительность крыловских экспоненциальных схем интегрирования по времени для определённого класса анизотропных параболических задач, приведённых ниже (2). Статья организована следующим образом. Тестовая задача и методы подпространства Крылова, которые мы рассматриваем в этой статье, описаны в разделе 2. В разделе 3 описываются численные тесты и обсуждаются их результаты. Выводы представлены в последнем разделе.

Тестовая задача и методы

Если не указано иначе, $\|\cdot\|$ означает евклидову векторную норму или соответствующую ей операторную матричную норму.

Тестовая задача. В области $(x, y, z) \in \Omega \equiv [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ рассмотрим начально-краевую задачу

$$u_t = k_1 u_{xx} + k_2 u_{yy} + k_3 u_{zz}, \quad u|_{t=0} = u^0(x, y, z), \quad (2)$$

где заданы функция $u^0(x, y, z)$ и одни из трёх следующих краевых условий:

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\partial\Omega} = 0, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\substack{x=0, x=1 \\ y=0, y=1}} = 0, \quad u|_{z=0, z=1} = 0. \quad (5)$$

Здесь $\frac{\partial u}{\partial n}$ обозначает нормальную производную к границе области. Нетрудно увидеть, что любое аналитическое решение задачи (2) может быть представлено в виде (возможно бесконечной) суммы собственных функций

$$\sum_{i,j,\ell} e^{-\lambda_{ij\ell} t} u_{ij\ell}(x, y, z), \quad \lambda_{ij\ell} = \pi^2(k_1 i^2 + k_2 j^2 + k_3 \ell^2), \quad (6)$$

Таблица 1. Аналитические собственные функции в зависимости от краевых условий (к.у.)

к.у.	функции $u_{ij\ell}(x, y, z)$	диапазон суммирования
(3)	$u_{ij\ell}(x, y, z) = \sin(i\pi x) \sin(j\pi y) \sin(\ell\pi z)$	$i, j, \ell = 1, 2, \dots$
(4)	$u_{ij\ell}(x, y, z) = \cos(i\pi x) \cos(j\pi y) \cos(\ell\pi z)$	$i, j, \ell = 0, 1, 2, \dots$
(5)	$u_{ij\ell}(x, y, z) = \cos(i\pi x) \cos(j\pi y) \sin(\ell\pi z)$	$i, j = 0, 1, 2, \dots, \ell = 1, 2, \dots$

где диапазоны суммирования и функции $u_{ij\ell}(x, y, z)$ определены в зависимости от краевых условий (см. табл. 1).

Применяя для дискретизации оператора $-k_1 u_{xx} - k_2 u_{yy} - k_3 u_{zz}$ стандартную конечно-разностную схему второго порядка точности, получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y'(t) = -Ay(t), \quad y(0) = y^0, \quad (7)$$

где $A = A^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$ — неотрицательно определённая матрица, а элементы y^0 — значения функции начальных значений $u^0(x, y, z)$ на сетке. Заметим, что краевые условия (3) приводят к невырожденной матрице A , краевые условия (4) — к вырожденной A , а краевые условия (5) — к матрице, близкой к вырожденной (см. (17)). Это влияет на сходимость методов подпространств Крылова [29, 24].

Экспоненциальные схемы интегрирования по времени на подпространствах Крылова.

Методы подпространств Крылова. Точное решение задачи (7) может быть записано в виде $y(t) = \exp(-tA)y^0$, где $\exp(-tA)$ — матричная экспонента. Методы полиномиального подпространства Крылова вычисляют матрично-векторное произведение $\exp(-tA)y^0$ следующим образом. Сначала выполняются k шагов ($k \ll N$) процесса Ланцоша или, для $A \neq A^T$, процесса Арнольди. Начиная с вектора $v_1 = y^0 / \|y^0\|$, этот процесс вычисляет последовательно вектора v_{q+1} , $q = 1, \dots, k$, получая каждый вектор умножением $v_{q+1} := Av_q$, ортогонализацией v_{q+1} по отношению к последним двум вычисленным векторам v_{q-1}, v_q и затем нормализацией $v_{q+1} := v_{q+1} / \|v_{q+1}\|$, см., например, [13, 14]. В процессе Ланцоша получаем матрицу $V_{k+1} \in \mathbb{R}^{N \times (k+1)}$ с ортонормальными столбцами v_1, \dots, v_{k+1} и трёхдиагональную матрицу $H_{k+1,k} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$, для которых выполняется [13, 14]

$$AV_k = V_{k+1}H_{k+1,k} = V_k H_{k,k} + h_{k+1,k} e_k^T v_{k+1}, \quad (8)$$

где $H_{k,k} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ состоит из первых k строк матрицы $H_{k+1,k}$, $h_{k+1,k}$ — единственный ненулевой элемент последней строки $H_{k+1,k}$, а $e_k = (0, \dots, 0, 1)^T \in \mathbb{R}^k$.

После этого крыловское приближение $y_k(t) \approx \exp(-tA)y^0$ вычисляется по формуле

$$y(t) = \exp(-tA)y^0 = \beta \exp(-tA)V_k e_1 \approx y_k(t) = \beta V_k \exp(-tH_{k,k})e_1, \quad (9)$$

где $\beta = \|y^0\|$, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^k$. Подчеркнём, что матрица $\exp(-tA)$ не вычисляется, и, как видим, для вычисления матрично-векторного произведения $\exp(-tA)y^0$ требуется только матричная экспонента $\exp(-tH_{k,k})$ маленькой матрицы $H_{k,k}$. Она вычисляется стандартными методами линейной алгебры [6, 7]. Отметим также, что одни и те же матрицы V_k и $H_{k,k}$ используются для всех моментов времени $t > 0$, хотя качество аппроксимации $y(t) \approx y_k(t)$ падает с ростом t . Когда остановить процесс Ланцоша, указывает норма экспоненциальной невязки $r_k(t)$, которая определяется как $r_k(t) \equiv -Ay_k - y'_k(t)$, см. [30, 31, 32]. С помощью соотношений (8),(9) нетрудно показать, что [30, 31]

$$\begin{aligned} r_k(t) &= [-\beta h_{k+1,k} e_k^T \exp(-tH_{k,k})e_1] v_{k+1}, \\ \|r_k(t)\| &= \beta h_{k+1,k} |e_k^T \exp(-tH_{k,k})e_1|. \end{aligned} \quad (10)$$

Методы подпространства Крылова типа «сдвиг-обращение» (СО). Обычный полиномиальный метод подпространства Крылова, рассмотренный выше, имеет тенденцию аппроксимировать компоненты решения, связанные с доминирующими по модулю собственными значениями A , лучше, чем другие компоненты [13, 14]. Следовательно, для жёстких задач, где собственные значения A значительно различаются по величине, может потребоваться много шагов Крылова k , прежде чем важные низкочастотные компоненты, связанные с малыми собственными значениями A , будут хорошо аппроксимированы. Чтобы избежать такой задержки в сходимости, обычно применяются два подхода. Во-первых, используются методы перезапуска, которые пытаются сохранить сходимость при ограничении k , см., например, [33]. Во-вторых, вместо обычных полиномиальных методов подпространства Крылова, могут использоваться рациональные методы подпространства Крылова [34]. Среди рациональных методов подпространства Крылова популярны так называемые методы подпространства Крылова «сдвиг-обращение» (СО) [35, 36]. Они строят подпространство Крылова для матрицы $\tilde{A} = (I + \gamma A)^{-1}$, обратной к «сдвинутой» матрице $I + \gamma A$ (отсюда название). Обычно берётся $\gamma := t_{\max}/10$, где t_{\max} — длина интервала по времени [36]. Метод Ланцоша-СО генерирует матрицу $V_{k+1} \in \mathbb{R}^{N \times (k+1)}$ с ортонормальными столбцами $v_1 = y^0/\|y^0\|$, v_2, \dots, v_{k+1} и матрицу $\tilde{H}_{k+1,k} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$, такие что выполняется соотношение, подобное (8):

$$\tilde{A}V_k = V_{k+1}\tilde{H}_{k+1,k} = V_k\tilde{H}_{k,k} + \tilde{h}_{k+1,k}e_k^T v_{k+1}, \quad (11)$$

где $\tilde{H}_{k,k}$ и $\tilde{h}_{k+1,k}$ определены так же, как и в (8). После этого приближение Ланцоша-СО $y_k(t) \approx \exp(-tA)y^0$ вычисляется так [35, 36]:

$$H_{k,k} := \frac{1}{\gamma}(\tilde{H}_{k,k}^{-1} - I), \quad y_k(t) = \beta V_k \exp(-tH_{k,k})e_1, \quad (12)$$

где $\beta = \|y^0\|$, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^k$. Подчеркнём, что СО-матрица $(I + \gamma A)^{-1}$ не вычисляется. Вместо этого линейная система с матрицей $I + \gamma A$ решается каждый раз, когда матрицу $(I + \gamma A)^{-1}$ нужно умножить на вектор. Эти системы необязательно должны решаться очень точно, существует эффективная стратегия выбора точности для решения этих систем [36]. В этой работе показано, что с ростом числа крыловских СО-итераций системы с СО-матрицей можно решать всё менее точно. Для контроля сходимости в методе Ланцоша-СО мы отслеживаем норму $\|r_k(t)\|$ для невязки $r_k(t) \equiv -Ay_k - y'_k(t)$. Она может быть вычислена так [36, 32]:

$$\begin{aligned} r_k(t) &= \frac{\beta}{\gamma} \tilde{h}_{k+1,k} e_k^T \tilde{H}_{k,k}^{-1} \exp(-tH_{k,k}) e_1 (I + \gamma A) v_{k+1}, \\ \|r_k(t)\| &= \frac{\beta}{\gamma} \tilde{h}_{k+1,k} |e_k^T \tilde{H}_{k,k}^{-1} \exp(-tH_{k,k}) e_1| \|(I + \gamma A) v_{k+1}\|. \end{aligned} \quad (13)$$

Методы подпространства Крылова для функции φ . Вычисление действия матричной функции φ (1) позволяет решить задачу Коши, более общую, чем (7):

$$y'(t) = -Ay(t) + g, \quad y(0) = y^0, \quad (14)$$

где вектор $g \in \mathbb{R}^N$ задан. Нетрудно проверить, что

$$y(t) = y^0 + t\varphi(-tA)(g - Ay^0), \quad t \geq 0 \quad (15)$$

является точным решением (14). Для него крыловскую аппроксимацию $y_k(t) \approx y(t)$ можно вычислить так же, как и для матричной экспоненты. Устраивая процесс Ланцоша или Арнольди для $v_1 := (g - Ay^0)/\beta$, $\beta = \|g - Ay^0\|$, мы получаем

$$y_k(t) = y^0 + \beta t V_k \varphi(-tH_{k,k}) e_1. \quad (16)$$

Для отслеживания сходимости так же, как и для матричной экспоненты, можно контролировать норму невязки $\|r_k(t)\|$ для $r_k(t) \equiv -Ay_k(t) + g - y'_k(t)$ [24]. Подход СО может быть применён в этом случае таким же образом.

Численные эксперименты

Во всех тестах в (2) задавались значения

$$k_1 = 10^4, \quad k_2 = 10^2, \quad k_3 = 1. \quad (17)$$

Таблица 2. Сходимость относительных норм невязки (18) для наибольшего аналитического собственного значения $\lambda_{1,1,1}$ и соответствующей собственной функции для различных краевых условий (к.у.)

сетка	норма невязки (18)		
	к.у. (3)	к.у. (4)	к.у. (5)
$10 \times 12 \times 14$	6.739e+02	8.147e+02	8.147e+02
$20 \times 24 \times 28$	1.852e+02	2.042e+02	2.042e+02
$40 \times 48 \times 56$	4.862e+01	5.108e+01	5.108e+01
$80 \times 96 \times 112$	1.246e+01	1.277e+01	1.277e+01
$160 \times 192 \times 224$	3.154e+00	3.193e+00	3.193e+00

Результаты тестов представлены для трёх решателей на подпространствах Крылова:

- (i) решателя Ланцош `phiRT(30)` — метода Ланцоша для функции φ с невязочно-временным (НВ) перезапуском [24] и максимальной размерностью подпространства Крылова 30 (см. (8),(16)),
- (ii) решателя Ланцош-СО `exp` — метода Ланцоша-СО для матричной экспоненты (см. (11),(12)) и
- (iii) решателя Ланцош-СО `phi` — метода Ланцоша-СО для функции φ (см. (11), (16)).

В решателях СО параметр γ был равен одной десятой длины интервала по времени.

Численные эксперименты, описанные в этом разделе, выполнены в пакете Матлаб (MATLAB) на линукс-кластере. Если не оговорено иное, линейные системы с матрицей $I + \gamma A$ в методах СО решались стандартным решателем Матлаба для систем с разреженными матрицами UMFPACK [37].

В табл. 2 представлены — для матриц A , полученных на разных сетках и для разных краевых условий — относительные нормы невязки

$$\|Av_{1,1,1} - \lambda_{1,1,1}v_{1,1,1}\|/\|v_{1,1,1}\|, \quad (18)$$

где вектор $v_{1,1,1}$ содержит сеточные значения аналитической собственной функции $u_{1,1,1}(x, y, z)$, см. соотношение (6) и табл. 1. В таблице во всех случаях прослеживается второй порядок сходимости, что подтверждает правильность вычисления матриц A .

Во всех случаях бралась длина интервала по времени $t = 10^{-4}$. Относительная ошибка, значения которой приводятся в таблицах ниже, вычислялась по формуле

$$\|y_k(t) - y_{\text{exact}}(t)\|/\|y_{\text{exact}}(t)\|, \quad (19)$$

где $y_k(t)$ — полученное численное решение, а $y_{\text{exact}}(t)$ содержит сеточные значения аналитического решения в конечный момент времени t . Поскольку ошибка

Таблица 3. Результаты для тестовой задачи (2) с краевыми условиями Дирихле (3)

решатель	относительная ошибка (19)	крыловские итерации / процессорное время, с
сетка $20 \times 22 \times 24$		
Ланцош phiRT(30)	2.132e-02	234 / 0.68
Ланцош-СО exp	2.132e-02	16 / 0.64
Ланцош-СО phi	2.132e-02	10 / 0.61
сетка $40 \times 44 \times 48$		
Ланцош phiRT(30)	5.550e-03	805 / 5.9
Ланцош-СО exp	5.550e-03	16 / 20.3
Ланцош-СО phi	5.550e-03	10 / 19.3
сетка $80 \times 88 \times 96$		
Ланцош phiRT(30)	1.419e-03	2722 / 109
Ланцош-СО exp	1.419e-03	16 / 1322
Ланцош-СО phi	1.419e-03	10 / 1297

вычисляется по отношению к аналитическому решению, достижимая точность ограничена ошибкой дискретизации по пространству. Для неё можно ожидать второй порядок сходимости по мере сгущения сетки.

Для всех экспоненциальных решателей использовался невязочный остановочный критерий с высокой требуемой точностью $\text{tol} = 1e-10$. Это означает, что итерации решателя останавливаются при условии

$$\|r_k(t)\|/\beta \leq \text{tol}, \quad t \in [0, 10^{-4}], \quad (20)$$

где либо $\beta = \|y^0\|$ (для решателя Ланцош-СО exp), либо $\beta = \|g - Ay^0\|$ (для двух других решателей). Принимая во внимание, что измеряемая ошибка ограничена ошибкой дискретизации по пространству, используемую требуемую точность $\text{tol} = 1e-10$ можно считать избыточной. Такая точность выбрана для того, чтобы протестировать сходимость решателей.

В табл. 3 показаны результаты численного решения задачи (2),(3), где вектор y^0 выбран так, чтобы $u_{\text{exact}}(x, y, z, t) = \sum_{i,j,\ell=1}^3 e^{-\lambda_{ij\ell}t} u_{ij\ell}(x, y, z)$ было аналитическим решением с $\lambda_{ij\ell}$ и $u_{ij\ell}(x, y, z)$, определёнными в (6) и табл. 1. В этой задаче для конечного времени $t = 10^{-4}$ на сетке $80 \times 88 \times 96$ имеем $t\|A\|_1 > 26\,000$, что даёт представление о примерном числе шагов, которое бы требовалось явной схемой. В таблице прослеживается второй порядок сходимости со сгущением сетки.

Кроме того, в табл. 3 видим, что решатель Ланцош-СО phi во всех случаях требует меньшего числа крыловских итераций, чем решатель Ланцош-СО exp. Это отличие является следствием того, что в этих решателях используются различные начальные вектора (см. (20)), а не следствием того, что решатели

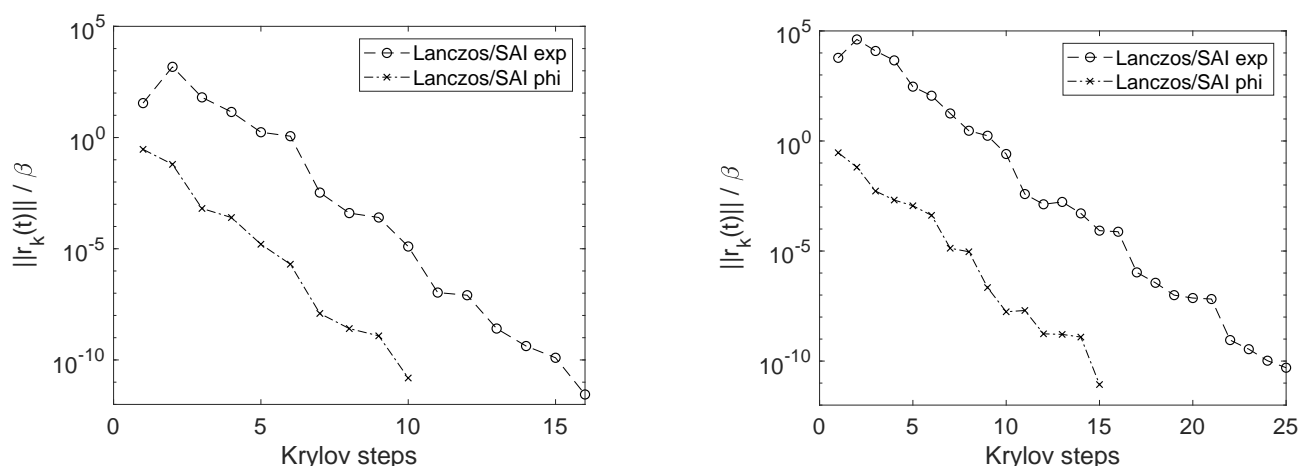


Рис. 1. Сходимость нормы невязки для решателей Ланцош-СО exp и Ланцош-СО phi для краевых условий (3) (левый график) и (4) (правый график). Для обоих решателей наблюдается одинаковая скорость сходимости. Сходимость для краевых условий Дирихле (левый график) лучше в силу отделения спектра от нуля.

сходятся с разной скоростью. Скорость сходимости для обоих решателей одинакова, что видно из графика на рис. 1. Отметим также, что требуемая точность $\text{tol} = 1e-10$ действительно оказывается избыточной: подобная относительная ошибка может быть достигнута для точности $\text{tol} = 1e-5$ или $\text{tol} = 1e-6$.

Табл. 3 показывает, что число крыловских итераций во всех решателях типа СО остаётся примерно одинаковым по мере сгущения сетки, в то время как процессорное время значительно растёт. Это происходит за счёт увеличения расходов, требуемых прямым разреженным методом для решения систем с матрицей $I + \gamma A$.

При тестировании решателей на задаче (2),(4) вектор y^0 получал значения при $t = 0$ аналитического решения $u_{\text{exact}}(x, y, z, t) = \sum_{i,j,\ell=0}^3 e^{-\lambda_{ij\ell}t} u_{ij\ell}(x, y, z)$ (см. (6)). В этой задаче для конечного времени $t = 10^{-4}$ имеем $t\|A\|_1 > 25\,000$ на сетке $80 \times 88 \times 96$. Результаты тестов представлены в табл. 4. Так же как и в первой задаче, наблюдаются второй порядок сходимости численного решения и сеточно-независимая сходимость крыловских СО решателей.

В табл. 4 также показаны результаты для аналитического решения $u_{\text{exact}}(x, y, z, t) = \sum_{i,j,\ell=1}^3 e^{-\lambda_{ij\ell}t} u_{ij\ell}(x, y, z, t)$ (эти результаты отмечены в таблице неравенством « $\lambda_{ij\ell} > 0$ »). Выбирая решение таким образом, мы «отключаем» компоненту, соответствующую нулевому собственному значению, что должно привести к отделению активной части спектра от нуля и, следовательно, к улучшению сходимости (см., например, [29, 24]). Действительно, как видим, сходимость в этом случае схожа со сходимостью, наблюдаемой для краевых условий Дирихле (см. табл. 3).

Табл. 4 также содержит результаты для случая, когда для решения систем

Таблица 4. Результаты для тестовой задачи (2) с краевыми условиями Неймана (4)

решатель	относительная ошибка (19)	крыловские итерации / процессорное время, с
сетка $20 \times 22 \times 24$		
Ланцош phiRT(30)	3.774e-03	344 / 1.0
Ланцош-CO exp	3.774e-03	24 / 0.9
Ланцош-CO phi	3.774e-03	15 / 0.8
сетка $40 \times 44 \times 48$		
Ланцош phiRT(30)	9.432e-04	1009 / 7.4
Ланцош-CO exp	9.432e-04	25 / 22.2
Ланцош-CO phi	9.432e-04	15 / 19.8
Ланцош-CO/AGMG exp	9.432e-04	28 (433) / 6.6
Ланцош-CO/AGMG phi	9.432e-04	15 (198) / 3.2
сетка $80 \times 88 \times 96$		
Ланцош phiRT(30)	2.358e-04	3466 / 141
Ланцош-CO exp	2.358e-04	26 / 1241
Ланцош-CO phi	2.358e-04	15 / 1210
Ланцош-CO/AGMG exp	2.358e-04	30 (518) / 65
Ланцош-CO/AGMG phi	2.358e-04	15 (240) / 31
сетка $20 \times 22 \times 24, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	1.846e-03	210 / 0.7
Ланцош-CO exp	1.846e-03	17 / 0.6
Ланцош-CO phi	1.846e-03	10 / 0.6
сетка $40 \times 44 \times 48, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	5.828e-03	749 / 5.8
Ланцош-CO exp	5.828e-03	17 / 20.4
Ланцош-CO phi	5.828e-03	10 / 19.6
Ланцош-CO/AGMG exp	5.828e-03	23 (295) / 4.6
Ланцош-CO/AGMG phi	5.828e-03	10 (137) / 2.4
сетка $80 \times 88 \times 96, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	1.454e-03	2706 / 110
Ланцош-CO exp	1.454e-03	17 / 1262
Ланцош-CO phi	1.454e-03	10 / 1175
Ланцош-CO/AGMG exp	1.454e-03	22 (337) / 43.3
Ланцош-CO/AGMG phi	1.454e-03	10 (157) / 20.9

СО с матрицей $I + \gamma A$ используется итерационный алгебраический многосеточный метод AGMG (AGgregation-based algebraic MultiGrid), см. [38, 39, 40, 41]. Мы видим, что число крыловских итераций в экспоненциальных методах при переходе от прямого СО-решателя к AGMG остаётся тем же или слегка возрастает. Это увеличение можно объяснить ослабленными требованиями к точности решения СО-систем при использовании итерационного метода AGMG [36]. Тем не менее, экспоненциальные схемы СО/AGMG по-прежнему проявляют сеточно-независимую сходимость, а число итераций метода AGMG растёт со сгущением сетки умеренно.

Результаты для задачи (2),(5) показаны в табл. 5. В этой задаче выбрано аналитическое решение $u_{\text{exact}}(x, y, z, t) = \sum_{i,j=0, \ell=1}^3 e^{-\lambda_{ij\ell}t} u_{ij\ell}(x, y, z)$ (см. (6)). Учитывая значения $k_{1,2,3}$ (см. (17)), мы видим, что наименьшее собственное значение A очень близко к нулю. Поэтому в таблице также приведены результаты для аналитического решения с $i, j = 1, 2, 3$, где компонента, соответствующая почти нулевому собственному значению, «отключена». Эти результаты отмечены в таблице неравенством « $\lambda_{ij\ell} > 0$ ». Табл. 5 позволяет сделать наблюдения, схожие со сделанными для табл. 4.

Заметим, что на сетке $64 \times 64 \times 64$ решатель Ланцош `phiRT(30)` достигает наилучшей возможной точности $2.342e-03$ (величина эта определяется ошибкой дискретизации по пространству) примерно за 900 крыловских итераций. Чтобы получить схожую точность, явная стабилизированная схема локальных итераций ЛИ-М [42] требует примерно 3500 матрично-векторных умножений.

Выводы

Протестированные экспоненциальные схемы интегрирования по времени на крыловских подпространствах с невязочным остановочным критерием показали себя надёжным инструментом для решения параболических задач с сильной анизотропией. Требуемая точность для нормы невязки должна браться на один-два порядка меньше ошибки дискретизации по пространству. Методы демонстрируют сеточно-независимую сходимость и успешную работу для различных краевых условий, влияющих на наименьшее собственное значение дискретизированного дифференциального оператора по пространству. Экспоненциальные схемы типа СО могут быть эффективно реализованы на основе алгебраических многосеточных решателей.

Благодарности. Автор выражает благодарность Виктору Тимофеевичу Жукову за полезные обсуждения. Часть представленных здесь экспериментов выполнена с помощью гибридного суперкомпьютера К-100, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Таблица 5. Результаты для тестовой задачи (2) с краевыми условиями Дирихле-Неймана (5)

решатель	относительная ошибка (19)	крыловские итерации / процессорное время, с
сетка $20 \times 22 \times 24$		
Ланцош phiRT(30)	3.777e-03	294 / 0.9
Ланцош-CO exp	3.777e-03	24 / 0.7
Ланцош-CO phi	3.777e-03	15 / 0.6
Ланцош-CO/AGMG exp	3.777e-03	28 (351) / 1.1
Ланцош-CO/AGMG phi	3.777e-03	15 (168) / 0.5
сетка $40 \times 44 \times 48$		
Ланцош phiRT(30)	9.441e-04	1008 / 7.7
Ланцош-CO exp	9.441e-04	24 / 21.6
Ланцош-CO phi	9.441e-04	15 / 19.8
Ланцош-CO/AGMG exp	9.441e-04	28 (433) / 6.6
Ланцош-CO/AGMG phi	9.441e-04	15 (197) / 3.1
сетка $80 \times 88 \times 96$		
Ланцош phiRT(30)	2.360e-04	3466 / 142
Ланцош-CO exp	2.360e-04	26 / 1288
Ланцош-CO phi	2.360e-04	15 / 1202
Ланцош-CO/AGMG exp	2.360e-04	30 (518) / 65
Ланцош-CO/AGMG phi	2.360e-04	15 (240) / 31
сетка $20 \times 22 \times 24, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	2.350e-02	209 / 0.6
Ланцош-CO exp	2.350e-02	17 / 0.7
Ланцош-CO phi	2.350e-02	10 / 0.6
Ланцош-CO/AGMG exp	2.350e-02	22 (239) / 0.8
Ланцош-CO/AGMG phi	2.350e-02	10 (119) / 0.4
сетка $40 \times 44 \times 48, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	5.828e-03	749 / 5.5
Ланцош-CO exp	5.828e-03	17 / 4.5
Ланцош-CO phi	5.828e-03	10 / 2.2
Ланцош-CO/AGMG exp	5.828e-03	23 (295) / 4.5
Ланцош-CO/AGMG phi	5.828e-03	10 (137) / 2.2
сетка $80 \times 88 \times 96, \lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	1.454e-03	2636 / 109
Ланцош-CO exp	1.454e-03	17 / 1240
Ланцош-CO phi	1.454e-03	10 / 1182
Ланцош-CO/AGMG exp	1.454e-03	22 (336) / 43
Ланцош-CO/AGMG phi	1.454e-03	10 (157) / 21

Продолжение Таблицы 5

сетка $120 \times 132 \times 144$, $\lambda_{ijl} > 0$		
Ланцош phiRT(30)	6.460e-04	5208 / 688
Ланцош-CO/AGMG exp	6.460e-04	23 (361) / 155
Ланцош-CO/AGMG phi	6.460e-04	10 (168) / 74

Список литературы

- [1] Efficient time integration for discontinuous Galerkin approximations of linear wave equations / M. Hochbruck, T. Pažur, A. Schulz et al. // *ZAMM*. — 2015. — Vol. 95, no. 3. — P. 237–259. — URL: <http://doi.org/10.1002/zamm.201300306>.
- [2] Exponential integration algorithm for large-scale wind farm simulation with Krylov subspace acceleration / Xiaopeng Fu, Chengshan Wang, Peng Li, Liwei Wang // *Applied Energy*. — 2019. — Vol. 254. — P. 113692. — <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113692>.
- [3] Wang X., Chen P., Cheng C. Stability and convergency exploration of matrix exponential integration on power delivery network transient simulation // *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*. — 2019. — P. 1–1. — <https://doi.org/10.1109/TCAD.2019.2954473>.
- [4] Hochbruck M., Ostermann A. Exponential integrators // *Acta Numer.* — 2010. — Vol. 19. — P. 209–286.
- [5] Gantmacher F. R. *The Theory of Matrices*. Vol. 1. — AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 1998. — Translated from the Russian by K. A. Hirsch, Reprint of the 1959 translation.
- [6] Moler C. B., Van Loan C. F. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later // *SIAM Rev.* — 2003. — Vol. 45, no. 1. — P. 3–49.
- [7] Higham N. J. *Functions of Matrices: Theory and Computation*. — Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.
- [8] Tal-Ezer H. Spectral methods in time for parabolic problems // *SIAM J. Numer. Anal.* — 1989. — Vol. 26, no. 1. — P. 1–11.
- [9] One-step finite-difference time-domain algorithm to solve the Maxwell equations / H. De Raedt, K. Michielsen, J. S. Kole, M. T. Figge // *Phys. Rev. E*. — 2003. — Vol. 67. — P. 056706.

- [10] Schmelzer T., Trefethen L. N. Evaluating matrix functions for exponential integrators via Carathéodory-Fejér approximation and contour integrals // *Electron. Trans. Numer. Anal.* — 2007/08. — Vol. 29. — P. 1–18.
- [11] Caliari M., Ostermann A. Implementation of exponential Rosenbrock-type integrators // *Appl. Numer. Math.* — 2009. — Vol. 59, no. 3-4. — P. 568–581.
- [12] Al-Mohy A. H., Higham N. J. Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2011. — Vol. 33, no. 2. — P. 488–511. — <http://doi.org/10.1137/100788860>.
- [13] Saad Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems.* — 2d edition. — SIAM, 2003. — Available from <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>.
- [14] Van der Vorst H. A. *Iterative Krylov methods for large linear systems.* — Cambridge University Press, 2003.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] Gallopoulos E., Saad Y. Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods // *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* — 1992. — Vol. 13, no. 5. — P. 1236–1264. — <http://doi.org/10.1137/0913071>.
- [19] 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.
- [20] 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.

- [21] 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://doi.org/10.1016/j.cam.2015.04.022>.
- [22] From circuit theory, simulation to SPICEDiego: A matrix exponential approach for time-domain analysis of large-scale circuits / H. Zhuang, X. Wang, Q. Chen et al. // *IEEE Circuits and Systems Magazine.* — 2016. — Vol. 16, no. 2. — P. 16–34.
- [23] Hundsdorfer W., Verwer J. G. Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations. — Springer Verlag, 2003.
- [24] Botchev M. A., Knizhnerman L. A., Tyrtysnikov E. E. A residual concept for Krylov subspace evaluation of the φ matrix function. — Preprint arXiv:2010.08494. — October 16, 2020. To appear in SISC, <https://arxiv.org/abs/2010.08494>.
- [25] Botchev M. A., Sleijpen G. L. G., van der Vorst H. A. Stability control for approximate implicit time stepping schemes with minimum residual iterations // *Appl. Numer. Math.* — 1999. — Vol. 31, no. 3. — P. 239–253.
- [26] Botchev M. A., van der Vorst H. A. A parallel nearly implicit scheme // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* — 2001. — Vol. 137. — P. 229–243.
- [27] Zhukov V. T., Novikova N. D., Feodoritova O. B. On the solution of evolution equations based on multigrid and explicit iterative methods // *Comput. Math. Math. Phys.* — 2015. — Vol. 55, no. 8. — P. 1276–1289. — <https://doi.org/10.1134/S0965542515080151>.
- [28] Zhukov V. T., Feodoritova O. B. On development of parallel algorithms for solving parabolic and elliptic equations // *J. Math. Sci.* — 2021. — Vol. 254, no. 5. — P. 606–624. — <https://doi.org/10.1007/s10958-021-05329-y>.
- [29] Grimm V. Resolvent Krylov subspace approximation to operator functions // *BIT.* — 2012. — Vol. 52, no. 3. — P. 639–659.
- [30] Celledoni E., Moret I. A Krylov projection method for systems of ODEs // *Appl. Numer. Math.* — 1997. — Vol. 24, no. 2-3. — P. 365–378. — [https://doi.org/10.1016/S0168-9274\(97\)00033-0](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(97)00033-0).
- [31] 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.

- [32] 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://doi.org/10.1137/110820191>.
- [33] 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.
- [34] Güttel S. Rational Krylov approximation of matrix functions: Numerical methods and optimal pole selection // *GAMM Mitteilungen.* — 2013. — Vol. 36, no. 1. — P. 8–31. — www.guettel.com.
- [35] Moret I., Novati P. RD rational approximations of the matrix exponential // *BIT.* — 2004. — Vol. 44. — P. 595–615.
- [36] Van den Eshof J., Hochbruck M. Preconditioning Lanczos approximations to the matrix exponential // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2006. — Vol. 27, no. 4. — P. 1438–1457.
- [37] Davis T. A. A column pre-ordering strategy for the unsymmetric-pattern multifrontal method // *ACM Trans. Math. Software.* — 2004. — Vol. 30, no. 2. — P. 167–195.
- [38] Notay Y., AGMG team. AGMG: Iterative solution with AGgregation-based algebraic MultiGrid. — Software package, <http://agmg.eu>.
- [39] Notay Y. An aggregation-based algebraic multigrid method // *Electronic Transactions on Numerical Analysis.* — 2010. — Vol. 37. — P. 123–146.
- [40] Napov A., Notay Y. An algebraic multigrid method with guaranteed convergence rate // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2012. — Vol. 32. — P. A1079–A1109.
- [41] Notay Y. Aggregation-based algebraic multigrid for convection-diffusion equations // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2012. — Vol. 34. — P. A2288–A2316.
- [42] Zhukov V. T. Explicit methods of numerical integration for parabolic equations // *Mathematical Models and Computer Simulations.* — 2011. — Vol. 3, no. 3. — P. 311–332.