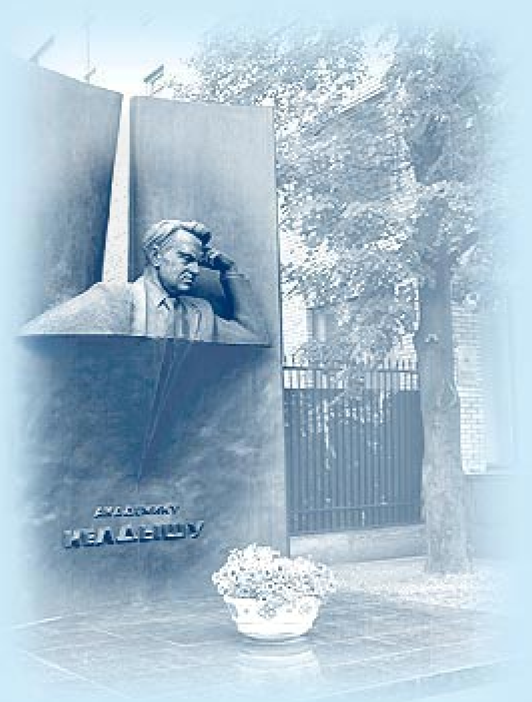
ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 21 за 2025 г.



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

М.А. Бочев, В.Т. Жуков

Адаптивные итеративные явные схемы интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бочев М.А., Жуков В.Т. Адаптивные итеративные явные схемы интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2025. № 21. 16 с. EDN: **ZFHRSZ**
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2025-21

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

М.А. Бочев, В.Т. Жуков

Адаптивные итеративные явные схемы интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности

Москва — 2025

Бочев М.А., В.Т. Жуков

Адаптивные итеративные явные схемы интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности

Проведено сравнение трёх явных схем интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности: монотонной схемы локальных итераций, нелинейной экспоненциальной схемы Эйлера и схемы на основе гиперболической модели теплопроводности, где для достижения устойчивости искусственно добавлен малый член со второй производной по времени. Монотонная схема локальных итераций и экспоненциальная схема Эйлера обладают свойством монотонности и позволяют использовать достаточно большой шаг по времени. Монотонная схема локальных итераций основана на специальной чебышёвской полиномиальной аппроксимации, а экспоненциальная схема Эйлера — на итерациях подпространства Крылова с перезапуском. Для этих двух схем предложен алгоритм адаптивного выбора шага по времени, который позволяет существенно снизить вычислительные затраты.

Ключевые слова: нелинейные задачи теплопроводности, экспоненциальное интегрирование по времени, матричная экспонента, методы подпространства Крылова

Mikhail A. Botchev, Victor T. Zhukov

Adaptive Iterative Explicit Time Integration for Nonlinear Heat Conduction Problems

Three explicit time integration schemes are compared for solving nonlinear heat conduction problems, local iteration monotone scheme, nonlinear exponential Euler scheme and a scheme based on the hyperbolic model of heat conduction, where an artificial second order time derivative term is added to stabilize the computations. The local iteration monotone and exponential Euler schemes are monotone and allow for a sufficiently large time step size. The local iteration monotone scheme is based on a special Chebyshev polynomial approximation, whereas the exponential Euler scheme employs a restarted Krylov subspace procedure. For these two schemes we propose an adaptive time step selection strategy which leads to a significant reduction in computational costs.

Key words: nonlinear heat conduction, exponential time integration, matrix exponential, Krylov subspace methods

Оглавление

1. Введение

Нелинейные задачи теплопроводности возникают в разнообразных приложениях, таких, например, как численное моделирование нестационарных процессов газодинамики [14], трёхтемпературные модели газовой динамики [12] или физика высокотемпературной сверхпроводимости [9]. Численное решение нелинейных задач теплопроводности вызывает трудности, в частности, из-за быстрого изменения решения (например, при возникновении тепловых волновых фронтов) и жёсткости нелинейного оператора теплопроводности. Явные стабилизированые схемы интегрирования по времени привлекательны для этого класса задач, потому что они концептуально просты, не требуют решения каких-либо (не)линейных систем и легко реализуются на современных суперкомпьютерах и платформах с графическими ускорителями.

В этой работе мы описываем, сравниваем и тестируем численно три явные схемы интегрирования по времени. Кроме того, для двух схем мы предлагаем алгоритм адаптивного выбора шага по времени и показываем, что он позволяет существенно повысить вычислительную эффективность. Первая из рассматриваемых схем — монотонная схема локальных итераций (ЛИ-М), построенная на основе чисто неявной схемы в сочетании со специальными итерациями Чебышёва [13]. Вторая схема — это экспоненциальная эйлерова (ЭЭ) схема, точнее, нелинейная версия [2] экспоненциального метода Эйлера [7], где матрично-векторные произведения (матвеки) с матричной функцией φ (определённой ниже около формулы (15)) вычисляются итерациями на крыловских подпространствах с перезапуском. Третья тестируемая нами схема — это схема на основе гиперболической модели (ГМ) теплопроводности, где для достижения устойчивости искусственно добавлен малый член со второй производной по времени [4]. Алгоритм адаптивного выбора шага по времени предлагается для схем ЛИ-М и ЭЭ.

Неотъемлемым требованием к схемам численного решения нелинейных уравнений теплопроводности является монотонность, т.е. схемы должны давать неотрицательные решения. В силу нелинейности даже самые небольшие отрицательные значения в численном решении приводят к неустойчивости. Как обсуждается ниже, схемы ЛИ-М и ЭЭ обладают свойством монотонности.

В данной работе рассматривается следующая нелинейная задача теплопроводности:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} u(\boldsymbol{x}, t) = \nabla \cdot (k(u) \nabla u(\boldsymbol{x}, t)) + g(\boldsymbol{x}, t), \\ &u(\boldsymbol{x}, 0) = u^0(\boldsymbol{x}), \quad u(\boldsymbol{x}, t)|_{\partial\Omega} = b(\boldsymbol{x}, t), \end{aligned} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{1, 2, 3\}$, $t \in [0, T]$, $\nabla \cdot$ — оператор дивергенции, ∇u — градиент $u(\boldsymbol{x}, t)$, а функции $u^0(\boldsymbol{x})$, $b(\boldsymbol{x}, t)$ и $g(\boldsymbol{x}, t)$ заданы. Мы предполагаем степенную зависимость коэффициента теплопроводности $k(u)$ от решения,

$$k(u) = k_0 u^\sigma, \tag{2}$$

где константы $k_0 > 0$ и $\sigma > 0$ заданы. В этой статье представлены результаты тестов только с $\sigma = 2$, однако и другие значения σ допустимы в наших схемах. Мы также предполагаем, что

$$b(\boldsymbol{x}, t) \geqslant 0, \quad g(\boldsymbol{x}, t) \geqslant 0, \quad u^0(\boldsymbol{x}) \geqslant 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega,\ t \geqslant 0. \tag{3}$$

Начально-краевая задача (1) сначала дискретизуется по пространству, при этом возникает задача Коши

$$y'(t) = -A(y(t))y(t) + g(t), \quad y(0) = v, \quad \text{где } v \geqslant 0. \tag{4}$$

Векторные неравенства здесь понимаются поэлементно, т.е. $v \geqslant 0$ означает, что все элементы вектора неотрицательны. Предполагается, что для любого $y \in \mathbb{R}^N$ матрица $A(y) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ в (4) — симметричная неотрицательно определённая, а её внедиагональные элементы неположительны, т.е.

$$a_{ij}(y) \leqslant 0, \quad i \neq j, \quad \forall y \in \mathbb{R}^N. \tag{5}$$

Поскольку функция источника $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^N$ в (4) может содержать вклады краевых условий вида $-a_{ij}(y)b(\boldsymbol{x}, t)$, естественно предположить, что

$$g(t) \geqslant 0, \quad t \geqslant 0. \tag{6}$$

Если не оговорено иначе, $\|\cdot\|$ обозначает евклидову векторную или соответствующую ей матричную норму. Мы предполагаем, что задача Коши (4) имеет единственное решение и существует такая константа $L > 0$, что

$$\|A(u) - A(v)\| \leqslant L\|u - v\|, \quad \forall u, v \in \mathbb{R}^N. \tag{7}$$

При выполнении условий (5) и (6) можно показать, что решение $y(t)$ задачи (4) неотрицательно, т.е. $y(t) \geqslant 0$, $t \geqslant 0$, см. [2, Утв. 1].

Дальнейшее содержание статьи организовано следующим образом. В разделе 2 обсуждаются три явные схемы и представлен алгоритм адаптивного выбора шага по времени для схем ЛИ-М и ЭЭ. Численные эксперименты представлены в разделе 3, а выводы делаются в разделе 4.

2. Явные схемы интегрирования по времени

2.1. Схема локальных итераций монотонная (ЛИ-М). Рассмотрим неявную схему Эйлера для решения задачи (4):

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = -A(y^{n+1})y^{n+1} + g^{n+1} \quad \Leftrightarrow$$
$$(I + \Delta t A(y^{n+1}))y^{n+1} = y^n + \Delta t g^{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots . \tag{8}$$

Здесь на каждом шаге по времени n нелинейная система для решения y^{n+1} на следующем слое может быть решена итерационно, см. [10, доп. I, гл. 2.11],

$$(I + \Delta t A(y^{(m)}))y^{(m+1)} = y^n + \Delta t g^{n+1}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \tag{9}$$

где индекс $\cdot^{(m)}$ обозначает номер итерации, а $y^{(0)} := y^n$. В [10, доп. I, гл. 2.11] показано, что схема (8) в сочетании с итерациями (9) монотонна для определённой конечно-разностной дискретизации одномерного уравнения теплопроводности (1). В [2, Утв. 2] свойство монотонности схемы (8),(9) установлено для задач вида (4) при условиях (5) и (6). Также в [2, Утв. 2] показано, что итерации (9) дают ограниченные по норме решения $y^{(m)}$, сходящиеся к решению y^{n+1} схемы (8) при условии, что $\Delta t > 0$ достаточно мал и выполняется (7).

На практике итерации (9) останавливаются при условии, что $m > 0$ (т.е. сделана по крайней мере одна итерация) и

$$\frac{\|y^n + \Delta t g^{n+1} - (I + \Delta t A(y^{(m)}))y^{(m+1)}\|}{\|y^n + \Delta t g^{n+1}\| + \epsilon} \leqslant \mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}}, \tag{10}$$

где ϵ — машинное эпсилон, а $\mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}}$ — точность, заданная для нелинейных итераций (9). Во всех представленных в этой работе тестах бралось $\mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}} = 10^{-2}$.

Соотношение (9) можно формально переписать в виде $y^{(m+1)} = (I + \Delta t A(y^{(m)}))^{-1}(y^n + \Delta t g^{n+1})$, причём важно понимать, что обратную матрицу здесь вычислять не следует. Заменяя $(I + \Delta t A(y^{(m)}))^{-1}$ специальной аппроксимацией на основе чебышёвских многочленов, мы получаем схему ЛИ-М. В этой схеме на каждой внешней нелинейной итерации m выполняется определённое число внутренних чебышёвских итераций. Их число зависит от величины шага по времени $\Delta t > 0$: чтобы гарантировать ограниченность решения, чем больше Δt, тем больше чебышёвских итераций должно быть выполнено. Важным свойством схем локальных итераций [13] (и, в частности, схемы ЛИ-М) является то, что чебышёвский полином выбирается, чтобы не только гарантировать ограниченность решения, но и получить приближение матричной экспоненты $\exp(-\Delta t A(y^{(m)}))$, см. подробности в [13]. Другими словами, схема ЛИ-М существенно отличается от неявной схемы, где действие обратной матрицы заменено определённым числом итераций для решения линейных систем, как это сделано, например, в [3].

Если в неявной монотонной схеме заменить решение линейных систем прямым методом на приближённое решение каким-либо итерационным методом, то свойство монотонности, вообще говоря, не гарантировано. Чтобы сохранить монотонность, чебышёвские итерации в схеме ЛИ-М выполняются специальным образом [13]. Сначала выполняется p чебышёвских итераций, что гарантирует ограниченность решения. Затем для получения монотонности последние $p - 1$

итераций повторяются. Как показывают многочисленные тесты, такое квадратирование многочлена Чебышёва даёт монотонную схему интегрирования по времени.

Наш алгоритм адаптивного выбора шага по времени основан на оценке ошибки. Надёжная оценка ошибки может быть вычислена на основе известного подхода предиктор-корректор, где схема ЛИ-М берётся как предиктор, а в качестве корректора используется неявная схема трапеций, имеющая второй порядок аппроксимации. Пусть y^{n+1} — решение схемы ЛИ-М на временно́м шаге $n+1$. Тогда оценка ошибки e^{n+1} решения y^{n+1} вычисляется по отношению к решению y_{PC}^{n+1} схемы предиктор-корректор:

$$
\begin{aligned}
y_{\text{PC}}^{n+1} &= y^n + \frac{\Delta t}{2}\left(-A(y^n)y^n + g^n - A(y^{n+1})y^{n+1} + g^{n+1}\right), \\
e^{n+1} &= \frac{\|y^{n+1} - y_{\text{PC}}^{n+1}\|}{\|y_{\text{PC}}^{n+1}\|}.
\end{aligned} \tag{11}
$$

Хорошо известно (см., например, [6]), что поскольку схема-корректор имеет второй порядок аппроксимации, а схема ЛИ-М — первый порядок, решение y_{PC}^{n+1} должно иметь второй порядок, и, следовательно, мы получаем $e^{n+1} = \mathcal{O}(\Delta t)^2$ для достаточно малых Δt. Численные эксперименты подтверждают, что это так даже для достаточно больших шагов Δt, используемых в расчётах, см. рис. 1. Поэтому разумно выбирать величину шага по времени Δt для следующего шага по времени так:

$$
(\Delta t)_{\text{new}} = \sqrt{\frac{\mathtt{tol}_{\Delta t}}{e^{n+1}}} \cdot \Delta t, \tag{12}
$$

где $\mathtt{tol}_{\Delta t}$ — приемлемая точность, заданная во всех тестах как $\mathtt{tol}_{\Delta t} = 0.1 \cdot \mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}} = 10^{-3}$ (здесь $\mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}}$ — допустимая точность нелинейных итераций, введённая выше). Таким образом, правильная величина $(\Delta t)_{\text{new}}$ шага по времени определяется апостериори, после того, как шаг сделан. Представленные ниже численные тесты показывают, что соотношения (11),(12) позволяют надёжно контролировать величину шага. Другие способы контроля величины шага представлены, например, в [11].

2.2. Нелинейная экспоненциальная эйлерова (ЭЭ) схема. Эта схема предложена в [2]. По заданному численному решению $y^n \approx y(t_n)$ задачи (4) в $t = t_n$, решение $y^{n+1} \approx y(t_{n+1})$ этой задачи в $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ вычисляется как решение задачи Коши

$$
\tilde{y}'(t) = -A(\tilde{y}(t))\tilde{y}(t) + \bar{g}, \quad \tilde{y}(t_n) = y^n, \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \tag{13}
$$

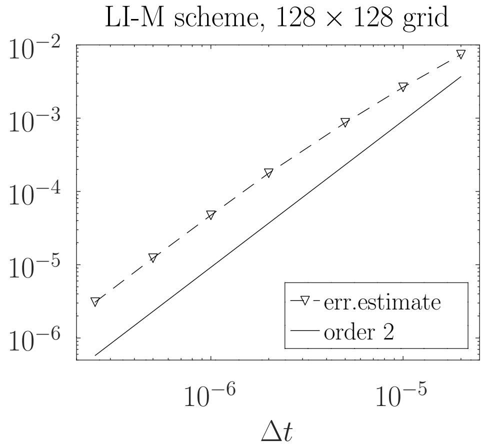


Рис. 1. Оценка ошибки (11), усреднённая по шагам по времени, для схемы ЛИ-М с различными постоянными шагами по времени Δt. Расчёты выполнены для двумерного теста, описанного ниже, на сетке 128×128. Второй порядок ошибки $e^n = \mathcal{O}(\Delta t)^2$ ясно прослеживается.

после чего полагается $y^{n+1} := \tilde{y}(t_{n+1})$. Здесь $n = 0, 1, 2, \dots$, $y^0 = v$, а $\bar{g} \approx \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(s)ds$. Задача Коши в (13) решается итерационно. На каждой итерации $m = 0, 1, 2, \dots$ мы решаем задачу Коши

$$(y^{(m+1)}(t))' = -A_m y^{(m+1)}(t) + \bar{g}, \quad y^{(m+1)}(t_n) = y^n, \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \tag{14}$$

где матрица $A_m = A(y^{(m)}(t_{n+1}))$ постоянна (т.е. не зависит от y или t), а $y^{(0)}(t) \equiv y^n$ для $t \in [t_n, t_{n+1}]$. Заменим в (14) постоянную матрицу A_m на зависящую от времени матрицу $\tilde{A}_m(t) = A(\tilde{y}^{(m)}(t))$ и рассмотрим итерации

$$(\tilde{y}^{(m+1)}(t))' = -\tilde{A}_m(t)\tilde{y}^{(m+1)}(t) + \bar{g}, \quad \tilde{y}^{(m+1)}(t_n) = y^n, \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \tag{14$'$}$$

с $\tilde{y}^{(0)}(t) \equiv y^n$, $t \in [t_n, t_{n+1}]$. Для итераций (14′) можно показать, см. [2, Утв. 4], что итерации сходятся (т.е. $\tilde{y}^{(m)}(t)$ сходится к решению задачи (13)) при условии, что выполняется (7) и шаг $\Delta t > 0$ достаточно мал. Также можно показать, что решение $\tilde{y}^{(m)}(t)$ ограничено по норме и поэлементно неотрицательно для любых $\Delta t > 0$ [2, Утв. 4],[5, Chapter 10.3]. Как оказывается, в реальных расчётах итерационные соотношения (14′) и (14) дают практически неотличимые решения, по крайней мере, для интересующих нас задач и используемых Δt, см. [2, Утв. 3]. Более того, заметим, что для $m = 0$ матрица $\tilde{A}_m(t) = A(y^n)$ постоянна и, следовательно, итерационные решения (14′) и (14) совпадают на первой итерации. Считать итерациями (14), а не (14′) вычислительно выгодно, так как решение задачи Коши в (14) можно найти одним вычислением матричной функции $\varphi(-\Delta t A_m)$,

$$y^{(m+1)}(t_{n+1}) = y^n + \Delta t \varphi(-\Delta t A_m)(\bar{g} - A_m y^n), \tag{15}$$

где $\varphi(z) = (e^z - 1)/z$, $\varphi(0) = 1$. На практике сама матрица $\varphi(-\Delta t A_m)$ не вычисляется, а вычисляется только её произведение на вектор $\bar{g} - A_m y^n$. Делается это процедурой на крыловских подпространствах с перезапуском, представленной в [1].

Таким образом, на каждой внешней нелинейной итерации (14) задача Коши в (14) решается действием матричной функции φ, которое приближённо вычисляется внутренними итерациями на подпространствах Крылова. Чтобы отследить эффект неточности, вносимой внутренними итерациями, введём функцию невязки $r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t)$. Эта невязка определяется для приближённого решения $y^{(m+1)}(t)$ уравнения (14):

$$r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t) \equiv -A_m y^{(m+1)}(t) + \bar{g} - (y^{(m+1)}(t))', \quad t \in [t_n, t_{n+1}]. \tag{16}$$

Следовательно, вычисленное итерационное приближение $y^{(m+1)}(t)$ вместо (14) удовлетворяет возмущённому дифференциальному уравнению

$$(y^{(m+1)}(t))' = -A_m y^{(m+1)}(t) + \bar{g} - r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t), \quad y^{(m+1)}(t_n) = y^n, \quad t \in [t_n, t_{n+1}]. \tag{17}$$

Здесь на невязку $r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t)$ наложим требование

$$\frac{\|r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t_{n+1})\|}{\|\bar{g} - A_m y^n\|} \leqslant \mathtt{tol}_{\mathtt{lin}}, \tag{18}$$

где $\mathtt{tol}_{\mathtt{lin}}$ — допустимая точность, а $\|\bar{g} - A_m y^n\|$ — норма вектора, на который действует матричная функция $\varphi(-\Delta t A_m)$. Как будет ясно из обсуждения соотношения (21) ниже, достаточно задать умеренное значение $\mathtt{tol}_{\mathtt{lin}}$. Во всех представленных здесь тестах мы берём $\mathtt{tol}_{\mathtt{lin}} = 0.1$.

Сходимость итераций (14) можно отслеживать, подставляя итерационное решение $y^{(m+1)}(t)$ в (13) и оценивая нелинейную невязку

$$\begin{aligned} r_{\mathtt{nonl}}^{(m+1)}(t) &\equiv -A(y^{(m+1)}(t))y^{(m+1)}(t) + \bar{g} - (y^{(m+1)}(t))' \\ &= -A(y^{(m+1)}(t))y^{(m+1)}(t) + \bar{g} + A_m y^{(m+1)}(t) - \bar{g} + r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t) \\ &= \left[A_m - A(y^{(m+1)}(t))\right] y^{(m+1)}(t) + r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t), \qquad t \in [t_n, t_{n+1}]. \end{aligned} \tag{19}$$

На практике мы вычисляем эту невязку, пренебрегая членом $r_{\mathtt{lin}}^{(m+1)}(t)$, и останавливаем итерации (14), как только $r_{\mathtt{nonl}}^{(m+1)}(t_{n+1})$ достаточно мала по норме относительно членов правой части уравнения (13):

$$\frac{\|r_{\mathtt{nonl}}^{(m+1)}(t_{n+1})\|}{\|\bar{g}\|+\|A_{m+1}y^{(m+1)}(t_{n+1})\|+\epsilon} \approx \frac{\|(A_m - A_{m+1})y^{(m+1)}(t_{n+1})\|}{\|\bar{g}\|+\|A_{m+1}y^{(m+1)}(t_{n+1})\|+\epsilon} \leqslant \mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}}, \tag{20}$$

где ϵ — машинное эпсилон, а $\mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}}$ — допустимая точность для нелинейных итераций (14). Во всех представленных здесь тестах бралось $\mathtt{tol}_{\mathtt{nonl}} = 10^{-2}$.

Чтобы получить приемлемое решение $y^{n+1} = \tilde{y}(t_{n+1})$ задачи (13), для разумных значений Δt достаточно всего лишь нескольких (обычно одной или двух) нелинейных итераций (14). Оценим, как внутренняя и внешняя невязки (16),(19) влияют на точность решения. Пусть $\tilde{y}(t), t \in [t_n, t_{n+1}]$ — численное решение (13), полученное одной нелинейной итерацией (14), для которого критерии сходимости (18),(20) как внутренних, так и внешних итераций выполнены. Подставляя $\tilde{y}(t)$ в (4), мы получаем невязку $\tilde{r}_{\mathtt{ode}}(t)$ решения $\tilde{y}(t)$ по отношению к решаемому уравнению:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{\mathtt{ode}}(t) &\equiv -A(\tilde{y}(t))\tilde{y}(t) + g(t) - \tilde{y}'(t) \\ &= -A(\tilde{y}(t))\tilde{y}(t) + g(t) + A(\tilde{y}(t))\tilde{y}(t) - \bar{g} + \tilde{r}_{\mathtt{nonl}}(t), \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \end{aligned} \tag{21}$$

где $\tilde{r}_{\mathtt{nonl}}(t)$ — нелинейная невязка $\tilde{y}(t)$ по отношению к (13), см. (19). Учитывая (19), получаем

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{\mathtt{ode}}(t) &= g(t) - \bar{g} + \tilde{r}_{\mathtt{nonl}}(t) \\ &= g(t) - \bar{g} + [A_m - A(\tilde{y}(t))]\,\tilde{y}(t) + \tilde{r}_{\mathtt{lin}}(t), \quad t \in [t_n, t_{n+1}], \end{aligned} \tag{22}$$

где $\tilde{r}_{\mathtt{lin}}(t)$ — невязка внутренних итераций решения $\tilde{y}(t)$. Как видно из соотношения (18), для получения приемлемо точного решения $\tilde{y}(t)$ должно быть достаточно умеренного значения $\mathtt{tol}_{\mathtt{lin}}$. Действительно, выбор $\mathtt{tol}_{\mathtt{lin}} = 0.1$ означает, что $\tilde{r}_{\mathtt{lin}}(t)$ примерно на порядок меньше по норме, чем члены $A_m\tilde{y}(t) - \bar{g}$. При этом малость членов $(A_m - A(\tilde{y}(t)))\tilde{y}(t)$ по норме обеспечивается условием (20).

Соотношение (22) показывает также, что если $\|g(t) - \bar{g}\| = \mathcal{O}(\Delta t)$, $t \in [t_n, t_{n+1}]$, то $\|\tilde{r}_{\mathtt{ode}}(t)\| = \mathcal{O}(\Delta t)$, $t \in [t_n, t_{n+1}]$. Тогда, оценивая с помощью невязки ошибку полученного решения (13) (см., например, последнее соотношение в [8, раздел I.2.3]), получаем, что схема ЭЭ имеет первый порядок аппроксимации. Поэтому для схемы ЭЭ можно применить такие же оценку ошибки (11) и выбора шага по времени (12), как и для схемы ЛИ-М. В представленных ниже тестах для схемы ЭЭ использовались в точности такие же формулы адаптивного выбора Δt, с тем лишь очевидным отличием, что предикторное решение схемы ЛИ-М было заменено решением схемы ЭЭ. При этом наблюдалась квадратичная зависимость $e^{n+1} = \mathcal{O}(\Delta t)^2$ оценки ошибки e^{n+1}, подобная представленной на рис. 1.

2.3. Схема на основе гиперболической модели (ГМ). Пусть $\omega > 0$ — малый параметр. Рассмотрим задачу Коши

$$y'(t) + \omega y''(t) = -A(y(t))y(t) + g(t), \quad y(0) = v, \tag{23}$$

приближающую исходную задачу задачу (4). Задачу (23) можно трактовать как гиперболическую модель нелинейной теплопроводности [4]. Мы интегрируем (23) по времени явной схемой

$$\begin{gathered}\frac{y^{n+1}-y^{n-1}}{2\Delta t}+\omega\frac{y^{n+1}-2y^n+y^{n-1}}{(\Delta t)^2}=-A(y^n)y^n+g^n,\\ y^0=v,\quad y^1=y^0+\Delta t\left(-A(y^0)y^0+g^0\right),\qquad n=1,2,\dots,\end{gathered}\tag{24}$$

которую назовём схемой гиперболической модели (ГМ) [4]. Благодаря искусственно добавленному члену второго порядка $\omega y''(t)$ ограничение на шаг по времени в (24) гораздо мягче, чем в явной схеме Эйлера для задачи (4). Поскольку для $\omega = 0$ схема ГМ безусловно (для любого $\Delta t > 0$) неустойчива, ω должно выбираться не слишком малым. С другой стороны, оно не может быть взято слишком большим, чтобы задача (23) оставалась разумным приближением исходной задачи (4). Во всех представленных ниже тестах бралось $\omega := 20\Delta t$. Можно оценить, что с таким значением ω максимально допустимый для устойчивости шаг по времени схемы ЭЭ примерно в 40 раз превосходит максимально допустимый шаг по времени явной схемы Эйлера для (4).

3. Численные тесты

В представленных здесь тестах решалась двумерная задача (1) в области $\Omega = [0,1]\times[0,1]$ с $k_0 = 1$, $\sigma = 2$ в (2) и $t \in [t_0, T] = [0.0001, 0.0051]$. Эта задача имеет точное решение

$$u_{\text{exact}}(x,y,t)=\frac{1}{\sqrt[3]{t}}\sqrt{\frac{\max\left\{0;\left(1.3-\frac{x^2+y^2}{\sqrt[3]{t}}\right)\right\}}{6}},\tag{25}$$

по которому задаются начальное и краевые условие в (1). В представленных тестах ошибка вычислялась как относительная сеточная L_2 норма ошибки:

$$\texttt{error}=\frac{\|y^n-y(T)\|}{\|y(T)\|},$$

где y^n — численное решение на конечном временно́м шаге n, а вектор $y(T)$ состоит из сеточных значений точного решения в конечный момент времени $t = T$. Как уже упоминалось, в (10),(20) для нелинейной допустимой точности бралось значение $\texttt{tol}_{\texttt{nonl}} = 10^{-2}$, для точности в процедуре выбора шага (12) — $\texttt{tol}_{\Delta t} = 0.1\cdot\texttt{tol}_{\texttt{nonl}} = 10^{-3}$, а для точности вычисления действий матричной функции φ — значение $\texttt{tol}_{\texttt{lin}} = 10\cdot\texttt{tol}_{\texttt{nonl}} = 0.1$. Наибольшая размерность подпространства Крылова при вычислении матричной функции φ выбиралась

Таблица 1. Значения ошибки и затраты, выраженные числом вычислений матрицы $A(y)$ и матрично-векторных произведений (матвеков) с $A(y)$ для трёх схем на сетках по пространству 64×64 и 128×128. В таблице ‘‘—’’ означает, что схема не запускалась, «нет сходимости» относится к нелинейным итерациям (9).

Δt	схема ЛИ-М ошибка, вычисления A (матвеки)	схема ЭЭ ошибка, вычисления A (матвеки)	схема ГМ ошибка, вычисления A (матвеки)
	сетка 64×64, $\max_{t\in[t_0,T]}\|A(y(t))\|_1 \approx 3.3 \cdot 10^6$		
5e-07	—	—	1.54e-02, 10000 (10000)
1e-06	1.25e-02, 5000 (7306)	1.20e-02, 5000 (5079)	1.96e-02, 5000 (5000)
5e-06	1.19e-02, 1003 (3207)	1.16e-02, 1038 (1601)	6.62e-02, 1000 (1000)
1e-05	1.18e-02, 557 (2295)	1.17e-02, 613 (1806)	1.26e-01, 500 (500)
5e-05	нет сходимости	1.75e-02, 479 (4164)	неустойчивость
адаптивно	1.14e-02, 862 (2182)	1.05e-02, 398 (1074)	
	сетка 128×128, $\max_{t\in[t_0,T]}\|A(y(t))\|_1 \approx 1.3 \cdot 10^7$		
5e-07	—	—	1.10e-02, 10000 (10000)
1e-06	7.54e-03, 5000 (15556)	7.20e-03, 5000 (6135)	1.62e-02, 5000 (5000)
5e-06	7.21e-03, 1040 (5716)	7.51e-03, 1103 (4129)	6.58e-02, 1000 (1000)
1e-05	7.13e-03, 677 (6173)	8.52e-03, 732 (5210)	1.28e-01, 500 (500)
5e-05	нет сходимости	2.51e-02, 1045 (18403)	неустойчивость
адаптивно	6.88e-03, 1342 (4854)	7.03e-03, 740 (2767)	

равной 30. Во всех тестах с адаптивным выбором шага Δt изначально задавалось значение $\Delta t = 10^{-6}$. Вектор $\bar{g}$ выбирался на каждом шаге n равным $(g(t_n) + g(t_{n+1}))/2$.

Результаты тестов представлены в табл. 1 (для сеток по пространству 64×64 и 128×128) и табл. 2 (для сеток с меньшим шагом h). Для схем ЛИ-М и ЭЭ с

Таблица 2. Значения ошибки и затраты, выраженные числом вычислений матрицы $A(y)$ и матрично-векторных произведений (матвеков) с $A(y)$ для трёх схем на сетках по пространству 256×256, 512×512 и 1024×1024. В таблице ‘‘—’’ означает, что схема не запускалась, «нет сходимости» относится к нелинейным итерациям (9).

Δt	схема ЛИ-М ошибка, вычисления A (матвеки)	схема ЭЭ ошибка, вычисления A (матвеки)	схема ГМ ошибка, вычисления A (матвеки)
сетка 256×256, $\max_{t\in[t_0,T]}\|A(y(t))\|_1 \approx 5.3 \cdot 10^7$			
1e-07	—	—	4.02e-03, 50000 (50000)
5e-07	—	—	8.09e-03, 10000 (10000)
1e-06	3.22e-03, 5000 (27700)	3.34e-03, 5000 (12746)	1.43e-02, 5000 (5000)
5e-06	3.20e-03, 1162 (13586)	5.88e-03, 1202 (10800)	неустойчивость
1e-05	3.54e-03, 873 (18059)	9.51e-03, 1067 (17955)	
5e-05	нет сходимости	3.76e-02, 2759 (106907)	
адаптивно	2.87e-03, 2128 (11650)	4.75e-03, 1326 (7220)	
сетка 512×512, $\max_{t\in[t_0,T]}\|A(y(t))\|_1 \approx 2.1 \cdot 10^8$			
1e-07	—	—	2.39e-03, 50000 (50000)
2.5e-07	—	—	4.03e-03, 20000 (20000)
5e-07	—	—	неустойчивость
адаптивно	1.54e-03, 3476 (28816)	4.60e-03, 2316 (18463)	
сетка 1024×1024, $\max_{t\in[t_0,T]}\|A(y(t))\|_1 \approx 8.4 \cdot 10^8$			
5e-08	—	—	1.21e-03, 10^5 (10^5)
1e-07	—	—	неустойчивость
адаптивно	9.86e-04, 5762 (72366)	5.06e-03, 3970 (45965)	

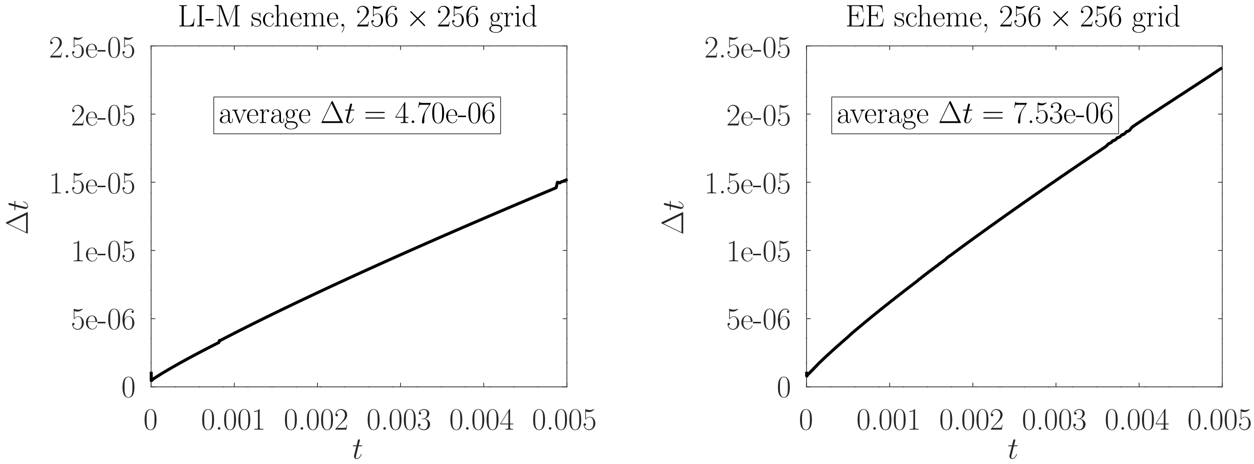


Рис. 2. Адаптивно выбранные значения Δt в зависимости от времени для схем ЛИ-М (левый график) и ЭЭ (правый график), сетка 256×256.

фиксированным Δt видим, что вычислительные затраты зависят от Δt немонотонно, каждая схема имеет оптимальное значение Δt, для которого затраты наиболее низкие. Следовательно, чтобы минимизировать затраты, разумно применить подходящую процедуру выбора шага. Мы также видим, что для обеих схем алгоритм адаптивного выбора шага по времени работает хорошо и приводит к существенному снижению затрат на всех сетках по пространству. По этой причине результаты для схем ЛИ-М и ЭЭ, полученные на мелких сетках 512×512 и 1024×1024, показаны только для адаптивно выбранного Δt (так же как и на остальных сетках, затраты для фиксированных Δt выше). На рис. 2 для сетки 256×256 представлены графики зависимости адаптивных значений Δt от времени.

Сравнивая результаты схемы ГМ с результатами двух других схем на сетках размером не более 256×256, мы видим, что схема ГМ менее эффективна для малых значений шага Δt и даёт менее точные результаты для бóльших значений шага. Графики на рис. 3 подтверждают, что ошибка в схеме ГМ действительно может быть значительной. На сетках размером более 256×256 схема ГМ требует сравнимое количество матвеков, но гораздо менее эффективна по числу вычислений $A(y)$.

Сравнивая результаты схем ЛИ-М и ЭЭ, видим что схема ЭЭ более эффективна, чем схема ЛИ-М, но даёт менее точные решения на самых мелких сетках 512×512 и 1024×1024. Меньшие значения $\texttt{tol}_{\texttt{nonl}}$ в схеме ЭЭ восстанавливают точность схемы, при этом число вычислений матрицы $A(y)$ и число вычислений матвеков с A в схеме ЭЭ слегка превосходят эти величины в схеме ЛИ-М.

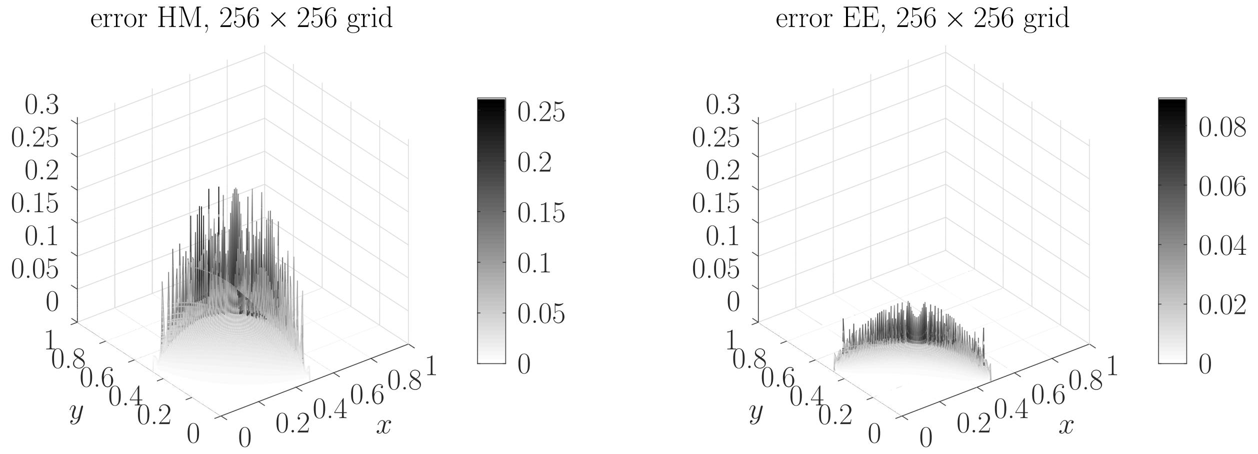


Рис. 3. Абсолютная ошибка численного решения схемы ГМ (левый график) и схемы ЭЭ (правый график), сетка 256×256. Затраты схемы ГМ (шаг $\Delta t =$ `1e-06`): 5000 вычислений $A(y)$ и 5000 матвеков с $A(y)$. Затраты схемы ЭЭ (адаптивно выбираемый Δt): 1326 вычислений $A(y)$ и 7220 матвеков с $A(y)$. Ошибка достигает значений ≈ 0.25 ($\approx 10\,\%$ от максимальных значений решения) в схеме ГМ и ≈ 0.085 ($\approx 3.5\,\%$ от максимальных значений решения) в схеме ЭЭ. Значения относительной сеточной L_2 нормы ошибки для схем ГМ и ЭЭ (данные приведены также в табл. 2) равны соответственно `1.43e-02` и `4.75e-03`.

4. Выводы

Проведено сравнение трёх явных схем интегрирования по времени для решения нелинейных задач теплопроводности. Для двух схем, монотонной схемы локальных итераций (ЛИ-М) и экспоненциальной эйлеровой схемы (ЭЭ), мы предложили алгоритм адаптивного выбора шага по времени. Представленные численные тесты показывают, что адаптивный выбор шага позволяет существенно снизить вычислительные затраты как в схеме ЛИ-М, так и в схеме ЭЭ. Для рассмотренной тестовой задачи схемы ЛИ-М и ЭЭ превосходят схему гиперболической модели (ГМ) как по точности, так и по вычислительной работе. Схемы ЛИ-М и ЭЭ оказываются примерно равными по вычислительным затратам при одинаковых требованиях к точности.

Благодарности. При выполнении работы использовались ресурсы гибридного суперкомпьютера K-100, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Список литературы

1. *Botchev M. A.*, *Knizhnerman L.*, *Tyrtyshnikov E. E.* Residual and Restarting in Krylov Subspace Evaluation of the φ Function // SIAM J. Sci. Comput. — 2021. — Vol. 43, no. 6. — A3733–A3759. — `https://doi.org/10.1137/20M1375383`.

2. *Botchev M. A.*, *Zhukov V. T.* Exponential Euler and backward Euler methods for nonlinear heat conduction problems // Lobachevskii J. Math. — 2023. — Vol. 44, no. 1. — P. 10–19. — `https://doi.org/10.1134/S1995080223010067`.
3. *Botchev M. A.*, *Sleijpen G. L. G.*, *Vorst H. A. van der*. Stability control for approximate implicit time stepping schemes with minimum residual iterations // Appl. Numer. Math. — 1999. — Vol. 31, no. 3. — P. 239–253. — ISSN 0168-9274. — `https://doi.org/10.1016/S0168-9274(98)00138-X`.
4. *Chetverushkin B. N.*, *Olkhovskaya O. G.*, *Gasilov V. A.* An explicit difference scheme for non-linear heat conduction equation // Math. Models Comput. Simul. — 2023. — Vol. 15, no. 3. — P. 529–538. — `https://doi.org/10.1134/S2070048223030031`.
5. *Dekker K.*, *Verwer J. G.* Stability of Runge–Kutta methods for stiff non-linear differential equations. — North-Holland Elsevier Science Publishers, 1984.
6. *Hairer E.*, *Nørsett S. P.*, *Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems. — Springer–Verlag, 1987. — (Springer Series in Computational Mathematics 8).
7. *Hochbruck M.*, *Ostermann A.* Exponential integrators // Acta Numer. — 2010. — Vol. 19. — P. 209–286. — ISSN 0962-4929.
8. *Hundsdorfer W.*, *Verwer J. G.* Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations. — Springer Verlag, 2003.
9. Multigrid method for numerical modelling of high temperature superconductors / O. B. Feodoritova [et al.] // Mathematica Montisnigri. — 2022. — Vol. 53. — P. 72–89.
10. *Tikhonov A. N.*, *Samarskii A. A.* Equations of mathematical physics. — Courier Corporation, 2013.
11. *Vabishchevich P. N.* A Priori Estimation of a Time Step for Numerically Solving Parabolic Problems // Mathematical Modelling and Analysis. — 2015. — Vol. 20, no. 1. — P. 94–111. — `http://dx.doi.org/10.3846/13926292.2015.1003108`.
12. *Zabrodin A. V.*, *Prokopov G. P.* Methods of Numerical Modeling of 2D Nonstationary Gasdynamic Flow with Heat Conduction in Three-Temperature Approach // Voprosy Atomnoy Nauki i Tekhniki (VANT), series Mathematical Modeling of Physical Processes. — 1998. — Vol. 3. — P. 3–16.
13. *Zhukov V. T.* Explicit methods of numerical integration for parabolic equations // Math. Models Comput. Simul. — 2011. — Vol. 3, no. 3. — P. 311–332. — `https://doi.org/10.1134/S2070048211030136`.

14. A Numerical Method for Conjugate Heat Transfer Problems in Multicomponent Flows / O. B. Feodoritova [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. — 2021. — Vol. 2028, no. 012024. — https://www.doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012024.