



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

Бочев М.А., Книжнерман Л.А.

Адаптивный
невязочно-временной
перезапуск методов
подпространств Крылова
для вычисления действий
матричной экспоненты

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бочев М.А., Книжнерман Л.А. Адаптивный невязочно-временной перезапуск методов подпространств Крылова для вычисления действий матричной экспоненты // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 127. 28 с.
<http://doi.org/10.20948/prepr-2019-127>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-127>

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

М.А. Бочев, Л.А. Книжнерман

**Адаптивный невязочно-временной перезапуск
методов подпространств Крылова для
вычисления действий матричной экспоненты**

Москва — 2019

Бочев М.А., Книжнерман Л.А.

Адаптивный невязочно-временной перезапуск методов подпространств Крылова для вычисления действий матричной экспоненты

В работе предложен новый способ перезапуска методов подпространств Крылова для вычисления действий матричной экспоненты. Поскольку наш подход существенно использует невязку, приводятся результаты сходимости нормы невязки. Показана также возможность адаптивного выбора числа шагов метода до следующего перезапуска. Представлены численные эксперименты, сравнивающие предложенный способ перезапуска с тремя другими известными способами перезапуска. Некоторые из алгоритмов, описанных в работе, реализованы в рамках пакета expmARPACK, доступного на <http://team.kiam.ru/botchev/expm/>.

Ключевые слова: методы подпространства Крылова; экспоненциальные схемы интегрирования по времени; метод Арнольди; перезапуск подпространств Крылова; метод подпространства Крылова «сдвиг-обращение»

M.A. Botchev, L.A. Knizhnerman

Adaptive residual–time restarting for Krylov subspace matrix exponential evaluations

In this paper a new restarting method for Krylov subspace matrix exponential evaluations is proposed. Since our restarting technique essentially employs the residual, some convergence results for the residual are given. We also discuss how the restart length can be adjusted after each restart cycle, which leads to an adaptive restarting procedure. Numerical tests are presented to compare our restarting with three other restarting methods. Some of the algorithms described in this paper are a part of the Octave/Matlab package expmARPACK available at <http://team.kiam.ru/botchev/expm/>.

Key words: Krylov subspace methods; exponential time integration; Arnoldi method; Krylov subspace restarting; shift-and-invert Krylov subspace methods

Введение

Вычисление действия матричной экспоненты на вектор для больших разреженных матриц — важная задача, возникающая, например, в интегрировании по времени систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), анализе сетей, моделях марковских цепей и других случаях. Методы подпространств Крылова — незаменимый инструмент для выполнения этой задачи, особенно для несимметричных или жёстких матриц. Другие методы для вычисления действий матричной экспоненты включают методы полиномиальной интерполяции [34, 43, 12], стабилизированные явные методы интегрирования по времени [41, 33, 10] и масштабируемые усечённые разложения в ряд Тейлора [2].

Чтобы быть вычислительно эффективными, методы подпространств Крылова для вычисления действий матричной экспоненты часто должны включать так называемый перезапуск [16]. Перезапуск позволяет сократить затраты вычислений и памяти в методах подпространств Крылова за счёт хранения (и использования) ограниченного числа векторов базиса подпространств Крылова. Заметим, что без перезапуска затраты вычислений и памяти на каждой итерации обычно растут с числом итераций. Следует подчеркнуть, что для матричных функций в общем случае не существует методов подпространств Крылова на основе коротких рекурсий, таких как, например, метод сопряжённых градиентов для решения линейных систем. С другой стороны, разработка способов перезапусков методов подпространств Крылова для матричных функций, вообще говоря, — более сложная задача, чем решения линейных систем [44].

Известны различные способы перезапуска методов подпространств Крылова для вычисления действий матричной экспоненты. Перезапуск пакета, используемый в пакете EXPOKIT [40], основан на делении временного интервала $[0, t]$ на меньшие интервалы для ускорения сходимости метода подпространства Крылова. Здесь $t > 0$ — это время, для которого требуется вычислить решение $y(t) = \exp(-tA)v$ задачи Коши (2). Авторы работы [11] предложили перезапуск, использующий концепт невязки (см. (7)): решение на итерациях до следующего перезапуска — приближённая поправка к решению по отношению к невязке. Невязочный перезапуск развит и протестирован в работе [8]. В диссертации [36, глава 3] предложен перезапуск, основанный на так называемой обобщённой невязке [25] и на аналогии методов подпространств Крылова для решения линейных систем и для вычисления действий матричной экспоненты. Ещё один перезапуск предложен в [44]: он использует наблюдение, что методы подпространств Крылова для вычисления $f(A)v$, где $f(\cdot)$ — заданная матричная функция, а v — данный вектор, можно рассматривать как полиномиальные методы, интерполирующие f в так называемых числах Ритца [38]. Другие известные способы перезапуска включают работы [1, 21, 17, 22, 28].

В этой работе мы представляем новый способ перезапуска методов под-

пространств Крылова, применяемых для вычисления действий матричной экспоненты. Наш способ перезапуска имеет привлекательное свойство: сходимость метода с таким перезапуском гарантирована (хотя и может быть медленной) для *любого* числа итераций между перезапусками*. Поскольку наша процедура перезапуска существенно полагается на поведение невязки (определённой ниже соотношением (7)), в данной работе мы также приводим некоторые результаты о сходимости нормы невязки. Кроме того, в работе показано, как представленный способ перезапуска может быть обобщён на адаптивную процедуру, позволяющую выбрать правильную длину перезапуска автоматически. Представленные численные эксперименты показывают потенциал такого адаптивного перезапуска. Мы также обсуждаем, как этот перезапуск может быть скомбинирован с методом подпространства Крылова «сдвиг-обращение». Другой вклад данной работы состоит в том, что наш перезапуск протестирован в численных экспериментах вместе с тремя другими перезапусками: (1) перезапуском шагами по времени пакета EXPOKIT [40], (2) перезапуском Нихоффа–Хохбрук [36] и (3) так называемым невязочным перезапуском [11, 8].

Данный препринт организован следующим образом. В разделе 2 приводятся предварительные сведения об аппроксимациях подпространства Крылова, а также некоторые результаты по сходимости невязки. Далее в этой же секции обсуждаются новая процедура перезапуска и адаптивный способ выбора правильной размерности подпространства Крылова. Также в этом разделе мы обсуждаем, как перезапуск может быть обобщён на метод подпространства Крылова «сдвиг-обращение». В разделе 3 описываются численные эксперименты и их результаты. В разделе 4 приводятся заключительные выводы.

Процедура перезапуска

2.1. Предварительные сведения. Во всей статье, если не оговорено иначе, считаем, что $\|\cdot\|$ — это вторая (евклидова) норма. Мы также предполагаем, что для матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ выполняется соотношение

$$\operatorname{Re}(x^* Ax) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{C}^n, \quad (1)$$

где $\operatorname{Re}(z)$ обозначает вещественную часть комплексного числа z . Это означает, что задача Коши

$$y'(t) = -Ay(t), \quad y(0) = v, \quad (2)$$

где $v \in \mathbb{R}^n$ задан, корректно поставлена, см., например, [27]. Более того, соотношение (1) означает, что

$$\|\exp(-tA)\| \leq e^{-t\omega}, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

*Условимся называть число итераций между перезапусками длиной перезапуска.

где $-\omega = \mu(-A) \leq 0$ — это логарифмическая вторая норма матрицы $-A$ [13, 27]. Пусть $\mathcal{K}_k(A, v)$ — подпространство Крылова

$$\mathcal{K}_k(A, v) = \text{span}\{v, Av, \dots, A^{k-1}v\}.$$

Чтобы вычислить ортонормальный базис подпространства Крылова v_1, \dots, v_k , обычно используют процесс Арнольди (или, если матрица A (косо)симметрична, процесс Ланцоша), см., например, работы [19, 37, 48, 39]. В результате получаем соотношение

$$\begin{aligned} V_k &= [v_1 \ \dots \ v_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}, & \text{colspan}(V_k) &= \mathcal{K}_k(A, v), \\ AV_k &= V_{k+1} \underline{H}_k, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\underline{H}_k \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$ — верхняя хессенбергова матрица. Соотношение (4) называется разложением Арнольди. Используя тот факт, что последняя строка матрицы \underline{H}_k содержит единственный ненулевой элемент $h_{k+1,k} \geq 0$, можно переписать соотношение (4) в виде

$$AV_k = V_{k+1} \underline{H}_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T, \quad (5)$$

где H_k — это матрица \underline{H}_k с опущенной последней строкой, а $e_k = (0, \dots, 0, 1)^T \in \mathbb{R}^k$. Приближение подпространства Крылова $y_k(t)$ к вектору $y(t) = \exp(-tA)v$ обычно вычисляется как [47, 15, 30, 38, 23]

$$y_k(t) = V_k \exp(-tH_k)(\beta e_1), \quad (6)$$

где $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^k$, а $\beta = \|v\|$.

Удобным способом отслеживания ошибки приближения подпространства Крылова y_k является отслеживание невязки приближения по отношению к обыкновенному дифференциальному уравнению (ОДУ) в задаче Коши (2)

$$r_k(t) = -y_k'(t) - Ay_k(t). \quad (7)$$

Невязка $r_k(t)$ легко вычислима [11, 14, 8]:

$$r_k(t) = \beta_k(t) v_{k+1}, \quad \beta_k(t) = -h_{k+1,k} e_k^T \exp(-tH_k)(\beta e_1). \quad (8)$$

Это определение невязки для матричной экспоненты известно и используется в литературе, в частности, для получения верхних границ ошибки, см. [14, соотношение (32)] и [8, лемма 4.1]). Тем не менее, какие-либо результаты сходимости для невязки $r_k(t)$ в литературе практически отсутствуют. Поэтому, учитывая существенное использование концепта невязки в данной работе, мы приводим общие результаты сходимости для её нормы.

2.2. Оценка невязки рядами Фабера. Ряды Фабера как аппарат исследования сходимости метода Арнольди введены в работе [30]; смотрите также [4]. Пусть $W(A) = \{x^*Ax \mid x \in \mathbb{C}^n, \|x\|=1\}$ — числовая область матрицы A , и пусть Φ_j — многочлены Фабера [45] на компакте $W(A)$. Рассмотрим разложение в ряд по многочленам Фабера

$$f(z; t) = e^{-tz} = \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t)\Phi_j(z), \quad z \in W(A), \quad t \geq 0, \quad (9)$$

где t будем считать параметром.

Утверждение 1. *Невязка метода Арнольди $r_k(t)$, определённая соотношением (7), удовлетворяет неравенству*

$$\|r_k(t)\| \leq 2h_{k+1,k} \sum_{j=k-1}^{+\infty} |f_j(t)| \leq 2\|A\| \sum_{j=k-1}^{+\infty} |f_j(t)|. \quad (10)$$

Доказательство. Для простоты обозначений в доказательстве мы опускаем индекс \cdot_k в H_k и V_k . Ряды Фабера сходятся сверхэкспоненциально по j , а их коэффициенты $f_j(t)$ — гладкие функции аргумента t [45, глава 3]. Это позволяет нам продифференцировать ряд (9) по t .

Подставляя разложение (9) в выражение для приближённого решения, получаем

$$y_k = Vf(H; t)e_1 = V \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t)\Phi_j(H)e_1. \quad (11)$$

Очевидно, что

$$zf(z; t) + \frac{\partial f(z; t)}{\partial t} = 0,$$

где

$$0 = z \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t)\Phi_j(z) + \sum_{j=0}^{+\infty} f'_j(t)\Phi_j(z) = \sum_{j=0}^{+\infty} [f_j(t)z + f'_j(t)]\Phi_j(z). \quad (12)$$

Используя соотношения (7), (11), (4), (12) с аргументом z , заменённым на H , и

равенство $\deg \Phi_j = j$, проведём следующие выкладки:

$$\begin{aligned}
 -r_k(t) &= AV \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t) \Phi_j(H) e_1 + V \sum_{j=0}^{+\infty} f'_j(t) \Phi_j(H) e_1 \\
 &= (VH + h_{k+1,k} q_{k+1} e_k^T) \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t) \Phi_j(H) e_1 + V \sum_{j=0}^{+\infty} f'_j(t) \Phi_j(H) e_1 \\
 &= V \sum_{j=0}^{+\infty} [f_j(t)H + f'_j(t)] \Phi_j(H) e_1 + h_{k+1,k} q_{k+1} e_k^T \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t) \Phi_j(H) e_1 \\
 &= h_{k+1,k} q_{k+1} e_k^T \sum_{j=0}^{+\infty} f_j(t) \Phi_j(H) e_1 = h_{k+1,k} q_{k+1} e_k^T \sum_{j=k-1}^{+\infty} f_j(t) \Phi_j(H) e_1.
 \end{aligned}$$

Отсюда с помощью оценки $\|\Phi_j(H)\| \leq 2$ (см. [3, теорема 1]) получаем (10). \square

Замечание 1. *Оценки величин $|f_j(t)|$ можно найти в [4, раздел 4].*

Замечание 2. *Сравнивая нашу оценку (10) с оценкой [4, теорема 3.2] для ошибки*

$$\|y(t) - y_k(t)\| \leq 4 \sum_{j=k}^{+\infty} |f_j(t)|,$$

мы видим, что эти две верхние оценки отличаются главным образом коэффициентом. Это вселяет надежду, что ошибка и невязка ведут себя схоже. Заметим также, что существуют верхние оценки для ошибки, основанные на невязке (см. [14, формула (32)] и [8, лемма 4.1]).

Обсудим теперь процедуру нашего перезапуска.

2.3. Алгоритм перезапуска. Предлагаемый нами перезапуск основан на наблюдении, что даже для малых k невязка $r_k(s)$ мала по норме на некотором интервале $s \in [0, \delta]$, где $\delta > 0$ достаточно мала. Более точно этот простой результат, приведённый здесь для полноты, формулируется ниже (см. утверждение 2). Введём функцию $\varphi_1(z)$ (см., например, [26])

$$\varphi_1(z) = (e^z - 1)/z.$$

Утверждение 2. *Пусть y_k — крыловская аппроксимация (6) функции $y(t) = \exp(-tA)v$, и пусть номер итерации k фиксирован. Тогда для невязки $r_k(t)$, определённой соотношением (8), выполняется оценка*

$$\|r_k(t)\| \leq th_{k+1,k} \|H_k\| \beta \varphi_1(-t\omega_k),$$


```

% Дано:  $t > 0$ ,  $\text{tol} > 0$ ,  $\underline{H}_k$  (см. (4)-(6))
%
% определяем шаг  $t/n_t$  для отслеживания невязки:
 $u := e_1$ 
 $n_t := 100$  % начальное значение  $n_t$ 
 $r := 2\text{tol}$ 
while  $r > \text{tol}$ 
     $E := \exp(-(t/n_t)H_k)$ 
     $u := Ee_1$ 
     $r := -h_{k+1,k}(e_k^T u)$ 
    if  $|r| \leq \text{tol}$ 
         $u := e_1$ 
        break the while loop
    end
     $n_t := 2n_t$ 
end
% вычисляем невязку в промежуточных точках,
% пока её норма не превысит точность  $\beta\text{tol}$ :
for  $i = 1, \dots, n_t$ 
     $u_0 := u$ 
     $u := Eu$ 
     $r := -h_{k+1,k}(e_k^T u)$ 
    if  $|r| > \text{tol}$ 
         $\delta_k := \frac{i-1}{n_t}t$ 
         $u := u_0$ 
        break the for loop
    end
end
end

```

Рис. 1. Алгоритм для нахождения величины $\delta_k > 0$, такой что $\|r_k(s)\| \leq \beta\text{tol}$ для $s \in [0, \delta_k]$, и вектора $u \in \mathbb{R}^k$, такого что $y_k(\delta_k) = V_k u$. Норма невязки отслеживается с шагом t/n_t , $n_t = 100$, или, если требуется, с меньшим шагом, пока её норма не превысит βtol . Начальное значение $n_t = 100$ может быть изменено.

где $-\omega_k = \mu(-H_k)$ — логарифмическая норма $-H_k$. Следовательно, для любых k и $\varepsilon > 0$ найдётся такая величина $\delta_k > 0$, что

$$\|r_k(s)\| \leq \varepsilon, \quad \forall s \in [0, \delta_k].$$

Доказательство. Из соотношения (8) следует, что

$$\|r_k(t)\| = |\beta_k(t)| = h_{k+1,k} \cdot |e_k^T u(t)|,$$

где $u(t) = \exp(-tH_k)(\beta e_1)$ — решение задачи Коши

$$u'(t) = -H_k u(t), \quad u(0) = \beta e_1. \quad (13)$$

Тогда

$$u(t) - u(0) = (\exp(-tH_k) - I)u(0) = -tH_k \varphi_1(-tH_k)u(0).$$

Поскольку $H_k = V_k^T A V_k$ — галёркинская проекция матрицы A , из (1) следует, что

$$\begin{aligned} \lambda_{\min} \left(\frac{1}{2}(A + A^T) \right) &\leq \lambda_{\min} \left(\frac{1}{2}(H_k + H_k^T) \right), \\ \lambda_{\max} \left(\frac{1}{2}(H_k + H_k^T) \right) &\leq \lambda_{\max} \left(\frac{1}{2}(A + A^T) \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\lambda_{\min}(\cdot)$ и $\lambda_{\max}(\cdot)$ — соответственно минимальные и максимальные собственные числа. Далее заметим, что

$$\lambda_{\min} \left(\frac{1}{2}(A + A^T) \right) = \omega,$$

где ω — константа, определённая в (3) (см., например, [13, 27]). Обозначим $\omega_k = \lambda_{\min}(\frac{1}{2}(H_k + H_k^T))$. Следовательно, H_k наследует свойство (3) матрицы A , а именно

$$\|\exp(-tH_k)\| \leq e^{-t\omega_k}, \quad t \geq 0, \quad (15)$$

где $-\omega_k = \mu(-H_k) \leq -\omega$. Используя оценку в доказательстве леммы 2.4 статьи [26], нетрудно увидеть, что (3) означает

$$\|\varphi_1(-tA)\| \leq \varphi_1(-t\omega), \quad (16)$$

так что подобное соотношение выполняется для $\|\varphi_1(-tH_k)\|$. Следовательно,

$$\begin{aligned} |e_k^T u(t)| &= |e_k^T (u(t) - u(0))| \leq \|u(t) - u(0)\| \\ &\leq t \|H_k\| \|\varphi_1(-tH_k)\| \|u(0)\| \leq t \|H_k\| \beta \varphi_1(-t\omega_k). \end{aligned} \quad (17)$$

Последняя часть утверждения следует из того факта, что $0 < \varphi_1(z) \leq 1$ для $z \leq 0$. \square

Нетрудно убедиться, что оценка в утверждении 2 не может быть точной. Точность теряется в ходе выкладок (17), что подтверждается численными экспериментами, представленными ниже в этом разделе (см. также рис. 6). Теперь опишем, как работает наша процедура перезапуска, и представим для иллюстрации численные эксперименты.

```

% Дано:  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $v \in \mathbb{R}^n$ ,  $t > 0$ ,  $k_{\max}$  и  $\text{tol} > 0$ 
%
convergence := false
while not(convergence)
     $\beta := \|v\|$ ,  $v_1 := \frac{1}{\beta}v$ 
    for  $k = 1, \dots, k_{\max}$ 
         $w := Av_k$ 
        for  $i = 1, \dots, k$ 
             $h_{i,k} := w^T v_i$ 
             $w := w - h_{i,k}v_i$ 
        end
         $h_{k+1,k} := \|w\|$ 
         $s := (t/6)(1, 2, 3, 4, 5, 6)^T \in \mathbb{R}^6$ 
        for  $q = 1, \dots, 6$ 
             $u := \exp(-s_q H_k)e_1$ 
             $r(s_q) := -h_{k+1,k}(e_k^T u)$ 
        end
         $\text{rnorm} := \max\{r(s_1), \dots, r(s_6)\}$ 
        if  $\text{rnorm} \leq \text{tol}$ 
            convergence := true
            break
        elseif  $k = k_{\max}$ 
            % --- перезапуск после  $k_{\max}$  шагов
            % выполнить алгоритм рис. 1:
            % найти  $\delta_k$  и  $u = \exp(-\delta_k H_k)e_1$ 
             $v := V_k(\beta u)$ 
             $t := t - \delta_k$ 
            break
        end
         $v_{k+1} := \frac{1}{h_{k+1,k}}w$ 
    end
end
 $y_k := V_k(\beta u)$ 

```

Рис. 2. Алгоритм невязочно-временного (НВ) перезапуска. Алгоритм вычисляет крыловскую аппроксимацию $y_k(t) \approx \exp(-tA)v$, для невязки $r_k(t)$ которой выполняется $\|r_k(s)\| \leq \text{tol}$ в $s = t$ и нескольких других точках $s \in (0, t)$.

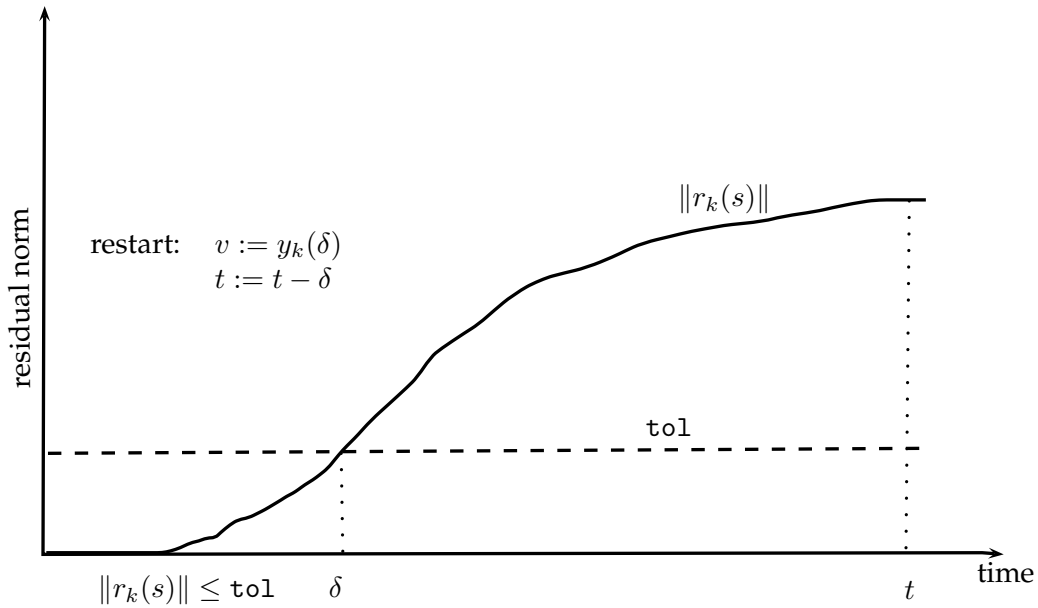


Рис. 3. Схема НВ-перезапуска

Пусть tol — заданная точность невязки, т.е. требуется вычислить такое приближение $\tilde{y}(t)$ подпространства Крылова к решению $\exp(-tA)v$, что для невязки \tilde{r} выполняется оценка $\|\tilde{r}(s)\| \leq \text{tol}$ для всех $s \in [0, t]$. Далее, пусть k_{\max} — наибольшая возможная размерность подпространства Крылова, так что затраты на вычисление V_{k+1} , \underline{H}_k и хранение V_{k+1} недопустимо высоки для $k > k_{\max}$. Обозначим δ_k длину такого интервала $[0, \delta_k] \ni s$, что $\|r_k(s)\| \leq \text{tol}$. Выполним (не более) k_{\max} шагов метода Крылова, попутно вычисляя на каждом шаге k норму невязки $\|r_k(s)\|$ для нескольких значений $s \in [0, t]$ (разумеется, не исключая значения $s = t$). Если на шаге k наибольшее по модулю из вычисленных значений $\|r_k(s)\|$ меньше заданной точности tol , то остановим вычисления (перезапуска в этом случае не требуется). Иначе, если после k_{\max} сделанных шагов остановочный критерий не выполняется, включается процедура перезапуска. Для этого прежде всего требуется найти величину $\delta_{k_{\max}}$. Принимая во внимание утверждение 2, это несложно сделать, отслеживая величины $\|r_k(s)\|$ для растущего аргумента s . Алгоритм для этой цели представлен на рис. 1. Переопределив начальный вектор $v := y_{k_{\max}}(\delta_{k_{\max}})$, решаем теперь задачу Коши (2) на укороченном интервале $[0, t - \delta_{k_{\max}}]$. При этом снова применяем нашу процедуру перезапуска.

Такой перезапуск назовём НВ (невязочно-временным) перезапуском. Такое название дано, чтобы подчеркнуть его существенную зависимость от поведения $r_k(s)$ как функции времени. Алгоритм НВ перезапуска представлен на рис. 2 и проиллюстрирован на рис. 3.

Нетрудно увидеть, что наша процедура НВ перезапуска гарантирует сходимость процесса Крылова для *любой* длины перезапуска k_{\max} . Действительно, всегда найдётся такое значение $\delta_{k_{\max}} > 0$, что невязка достаточно мала по норме

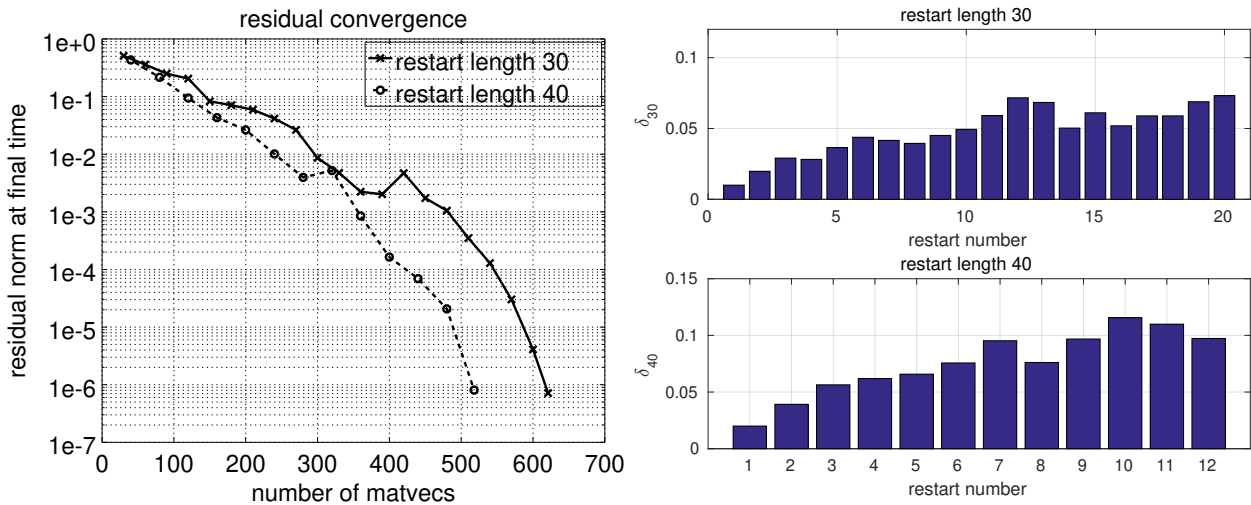


Рис. 4. Сходимость нормы невязки (левый график) и величины $\delta_{k_{\max}}$ в зависимости от номера перезапуска (правый график) для тестовой задачи конвекции-диффузии (см. раздел 3.1). Временной интервал на правом графике короче, так как он был уменьшен при первых двух перезапусках. Матрица A — дискретизированный оператор конвекции-диффузии для числа Пекле $Pe = 100$, сетка 102×102 ($n = 100^2$).

на интервале $[0, \delta_{k_{\max}}]$ (см. утверждение 2). Таким образом, после каждого перезапуска длина временного интервала сокращается, и сходимость за конечное число перезапусков гарантирована.

Для демонстрации работы процедуры перезапуска на рис. 4 представлены графики сходимости метода Арнольди с перезапуском при решении тестовой задачи конвекции-диффузии, описываемой в разделе 3.1. На этом рисунке также показаны величины $\delta_{k_{\max}}$ на каждом перезапуске. Кроме того, на рис. 5 представлены графики зависимости $\|r_k(s)\|$ от $s \in [0, t]$. Интересно также посмотреть на оценку утверждения 2. Для этого на рис. 6 представлены графики нескольких верхних оценок для норм невязок с рис. 5. Как и ожидалось, верхние оценки далеко не точные, но качественно правильно отражают поведение нормы $\|r_k(s)\|$ для $s \in [0, t]$.

2.4. Адаптивная процедура перезапуска. По результатам численных тестов видно (см. правые графики на рис. 4), что величина $\delta_{k_{\max}}$ имеет тенденцию мало меняться после первых нескольких циклов перезапуска. На каждом перезапуске временной интервал уменьшается с $[0, t]$ до $[0, t - \delta_{k_{\max}}]$. Следовательно, в конце каждого цикла перезапуска число оставшихся циклов перезапуска можно приближённо оценить как $t/\delta_{k_{\max}}$.

Это наблюдение позволяет нам сделать нашу процедуру перезапуска адаптивной следующим образом. Обозначим скобками $[\cdot]$ операцию округления к ближайшему целому. Выполняя шаги $k = 1, \dots, k_{\max}$ процесса Арнольди, будем

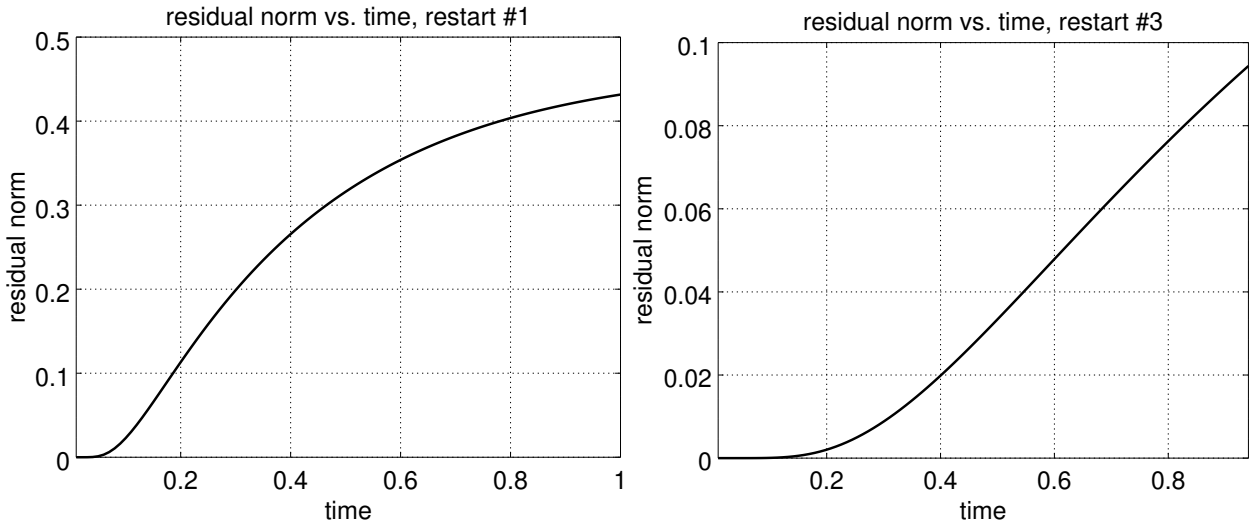


Рис. 5. Норма невязки $\|r_k(s)\|$ в зависимости от $s \in [0, t]$ в конце первого (левый график) и третьего (правый график) циклов перезапуска длиной 40 для тестовой задачи конвекции-диффузии (см. раздел 3.1). Временной интервал на правом графике короче, так как он был уменьшен при первых двух перезапусках. Матрица A — дискретизированный оператор конвекции-диффузии для числа Пекле $Pe = 100$, сетка 102×102 ($n = 100^2$).

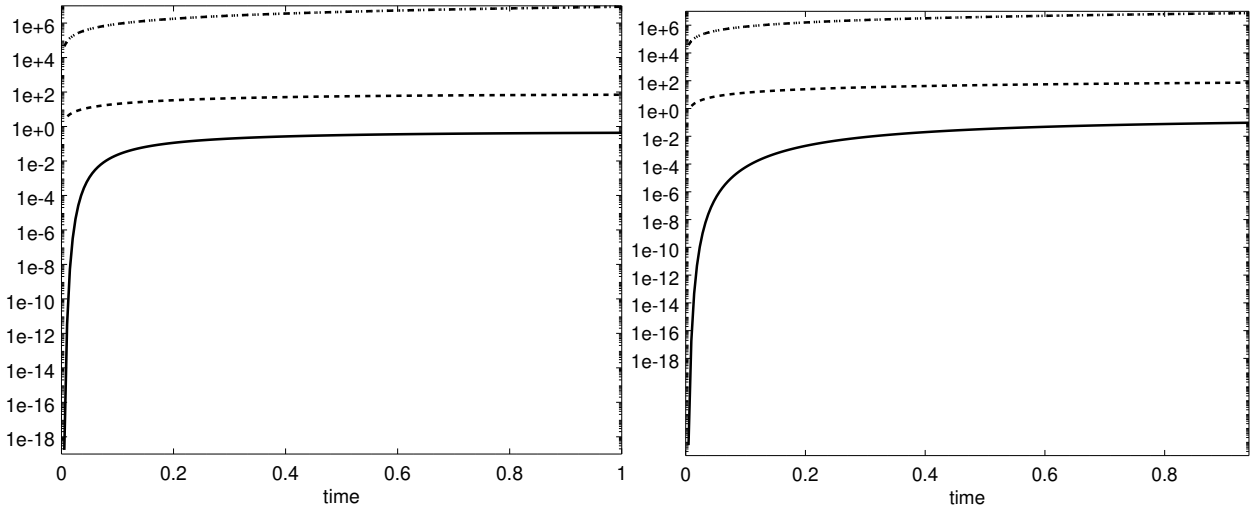


Рис. 6. Норма невязки $\|r_k(s)\|$ в зависимости от $s \in [0, t]$ (левый и правый графики, сплошные линии) с рис. 5 вместе с их верхними оценками из утверждения 2 и соотношения (17). Штриховая линия: $h_{k+1,k}\|u(s) - u(0)\|$. Штрих-пунктирная и пунктирная линии (совпадают): $s\beta h_{k+1,k}\|H_k\| \|\varphi_1(-sH_k)\|$ и $s\beta h_{k+1,k}\|H_k\| \|\varphi_1(-s\omega_k)\|$.

записывать для нескольких значений k (в наши численные эксперименты мы брали в качестве таких значений $[k_{\max}/3]$, $[2k_{\max}/3]$, $[5k_{\max}/6]$ и k_{\max}) величины δ_k и процессорное время t_k^{cpu} , потраченное на выполнение этих k шагов. Тогда величины

$$\frac{t}{\delta_k} t_k^{\text{cpu}}, \quad k = [k_{\max}/3], [2k_{\max}/3], [5k_{\max}/6], k_{\max}$$

можно рассматривать как прогнозные оценки процессорного времени, требуемого для выполнения расчёта с перезапусками длиной $[k_{\max}/3]$, $[2k_{\max}/3]$, $[5k_{\max}/6]$ и k_{\max} соответственно. Вычислив эти величины в ходе выполнения цикла перезапуска, мы можем изменить длину перезапуска для следующего цикла так, чтобы оценённое процессорное время было бы минимальным. В экспериментах, представленных в этой работе, мы меняем таким образом длину перезапуска только в случае, если ожидаемый выигрыш процессорного времени оказывается не менее 5%. Такая адаптация длины перезапуска выполняется в конце каждого цикла перезапуска. В ходе адаптации длина перезапуска также может быть увеличена. Это происходит, если текущая длина перезапуска \tilde{k} меньше максимально возможной, $\tilde{k} < k_{\max}$, а оценки процессорного времени указывают, что текущая длина — наилучшая, т.е. сокращать длину перезапуска не следует. В этом случае задаётся новая длина перезапуска $\min\{\tilde{k} + 5, k_{\max}\}$. Будем называть такую процедуру адаптивным невязочно-временным перезапуском (АНВ). Далее перезапуск АНВ тестируется и обсуждается в разделе 3.

2.5. НВ-перезапуск для крыловского подпространства типа «сдвиг-обращение». Методы подпространства Крылова типа «сдвиг-обращение» (СО) для вычисления действия матричной экспоненты — это класс рациональных методов подпространства Крылова, разработанный для достижения сходимости при существенно меньшей размерности подпространства, чем в обычном полиномиальном методе подпространства Крылова [35, 46]. Методы подпространства Крылова СО характеризуются тем, что вместо A крыловское подпространство строится для «сдвинутой» и «обращённой» матрицы $(I + \gamma A)^{-1}$, $\gamma > 0$. Таким образом, ценой за быструю сходимость является решение на каждом крыловском шаге линейной системы с матрицей $I + \gamma A$. Если эти системы решаются итерационно, то можно воспользоваться методикой сокращения численных затрат, огрубляя в ходе шагов процесса Арнольди точность, с которой системы решаются [46]. Величина γ , называемая сдвигом, может быть выбрана в зависимости от требуемой точности tol . Для точностей порядка 10^{-5} to 10^{-7} обычно выбирают $\gamma := t/10$, где t — длина временного интервала [46]. Эту величину мы и используем во всех численных экспериментах. Привлекательным свойством методов подпространства Крылова СО является их достаточно часто наблюдаемая сеточно-независимая сходимость. В некоторых случаях она может быть доказана

для дискретизаций параболических уравнений в частных производных, когда числовое поле получаемой матрицы близко к положительной вещественной полуоси [46, 18].

Опишем теперь, как процедура НВ-перезапуска может быть применена в методах подпространства Крылова «сдвиг-обращение». Для таких методов обычное разложение Арнольди (4),(5) принимает вид

$$(I + \gamma A)^{-1} V_k = V_{k+1} \tilde{H}_k = V_k \tilde{H}_k + \tilde{h}_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T, \quad (18)$$

где элементы $\tilde{H}_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ — это первые k строк матрицы \tilde{H}_k . Приближение $y_k(t) \approx \exp(-tA)v$ вычисляется согласно (6), где H_k — матрица проекции, подвергнувшаяся обратному преобразованию «сдвиг-обращение»:

$$H_k = \frac{1}{\gamma} (\tilde{H}_k^{-1} - I). \quad (19)$$

Перепишав разложение Арнольди (18) в виде [46, соотношение (4.1)]

$$AV_k = V_k H_k - \frac{\tilde{h}_{k+1,k}}{\gamma} (I + \gamma A) v_{k+1} e_k^T \tilde{H}_k^{-1}, \quad (20)$$

видим, что невязка $r_k(t) = -y'_k(t) - Ay_k(t)$ в методах подпространства Крылова «сдвиг-обращение» имеет вид [8]

$$r_k(t) = \beta_k(t)(I + \gamma A)v_{k+1}, \quad \beta_k(t) = \beta \frac{\tilde{h}_{k+1,k}}{\gamma} e_k^T \tilde{H}_k^{-1} \exp(-tH_k) e_1. \quad (21)$$

Данная функция невязки $r_k(s)$ имеет совсем другую зависимость от аргумента $s \in [0, t]$, чем невязка обычных методов подпространства Крылова (8): её сходимость по норме $\|r_k(s)\| \rightarrow 0$ с ростом k гораздо более равномерна по $s \in [0, t]$. Это означает, что мы не можем ожидать, что $\|r_k(s)\|$ — невозрастающая функция от s . Типичное поведение нормы невязки метода «сдвиг-обращение» $\|r_k(s)\|$ от $s \in [0, t]$ показано на рис. 7.

Как видим, имеется несколько различных точек s на интервале $[0, t]$, где $\|r_k(s)\|$ принимает гораздо меньшие значения, чем среднее $\frac{1}{t} \int_0^t \|r_k(s)\| ds$. Поэтому можно выполнить процедуру НВ-перезапуска, выбрав δ_k так:

$$\delta_k := \arg \min_{s \in [0, t]} \|r_k(s)\|.$$

В остальном процедура перезапуска НВ выполняется таким же образом, как и в обычном методе подпространства Крылова: мы обновляем вектор начального значения $v := y_{k_{\max}}(\delta_{k_{\max}})$ и продолжаем вычисления, решая задачу Коши (2) на

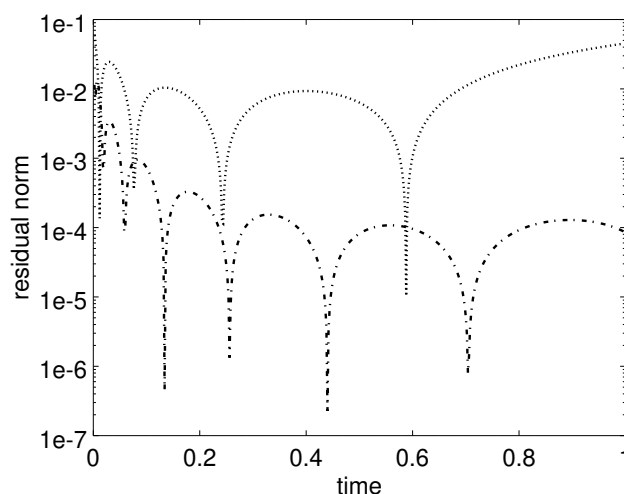


Рис. 7. Норма невязки $\|r_k(s)\|$ в зависимости от $s \in [0, t]$ метода подпространства Крылова СО после $k = 5$ (пунктирная линия) и $k = 10$ (штрих-пунктирная линия) шагов для тестовой задачи конвекции-диффузии (см. раздел 3.1). Матрица A — дискретизированный оператор конвекции-диффузии для числа Пекле $Pe = 100$, сетка 102×102 ($n = 100^2$).

укороченном интервале $[0, t - \delta_{k_{\max}}]$. Недостаток такого подхода состоит в том, что достижимая точность ограничена величиной $\|r_k(\delta_k)\| = \min_{s \in [0, t]} \|r_k(s)\|$ — ошибкой, привнесённой в задачу Коши при перезапуске операцией $v := y_{k_{\max}}(\delta_{k_{\max}})$. Например, как видно из рис. 7, при длине перезапуска $k_{\max} = 5$ имеем $\delta_k \approx 0.6$ и достижимая точность $\min_{s \in [0, t]} \|r_k(s)\| \approx 10^{-5}$. В программных реализациях метода при потере точности в ходе перезапуска (т.е. если оказывается, что $\min_{s \in [0, t]} \|r_k(s)\|$ больше, чем заданная точность `tol`) должно выдаваться предупреждение. Далее НВ-перезапуск для метода подпространства Крылова СО обсуждается в разделе 3.

Численные эксперименты

Все численные тесты выполнены на персональном компьютере с 8 процессорами Intel Xeon E5504 2.00GHz в Матлабе. Кроме автоматической параллелизации Матлабом разреженного LU-разложения в методе подпространства Крылова СО, параллелизация не выполнялась.

3.1. Тестовая задача конвекции–диффузии. В этой тестовой задаче матрица A получена обычной пятиточечной дискретизацией следующего оператора конвекции-диффузии, действующего на функции $u(x, y)$, определённые для $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$ и удовлетворяющие однородным краевым условиям первого

рода:

$$L[u] = -(D_1 u_x)_x - (D_2 u_y)_y + Pe \left(\frac{1}{2}(v_1 u_x + v_2 u_y) + \frac{1}{2}((v_1 u)_x + (v_2 u)_y) \right)$$

$$D_1(x, y) = \begin{cases} 10^3 & (x, y) \in [0.25, 0.75]^2, \\ 1 & \text{иначе,} \end{cases} \quad D_2(x, y) = \frac{1}{2}D_1(x, y),$$

$$v_1(x, y) = x + y, \quad v_2(x, y) = x - y.$$

Здесь конвективные члены (т.е. члены, содержащие первые производные u) записаны в специальном виде, гарантирующем, что вклады конвективных членов в матрицу A образуют кососимметричную матрицу [32]. В экспериментах использовались сетки 802×802 (при числе Пекле $Pe = 200$) и 1202×1202 (при числе Пекле $Pe = 300$). Размер задачи на этих сетках — $n = 640\,000$ и $n = 1\,440\,000$ соответственно. Для обеих сеток и при соответствующих числах Пекле $\|\frac{1}{2}(A + A^T)\|_2 \approx 6000$ и $\|\frac{1}{2}(A - A^T)\|_2 \approx 0.5$, так что получаемая матрица в обоих случаях — слабо несимметричная. Начальному вектору v присваивались значения функции $\sin(\pi x) \sin(\pi y)$ на конечно-разностной сетке, после чего вектор нормализовывался, $v := v/\|v\|$. В экспериментах задавались длина временного интервала $t = 1$ и требуемая точность $\text{tol} = 10^{-6}$.

Мы сравниваем метод подпространства Крылова, основанный на процессе Арнольди и нашем НВ-перезапуске, со следующими тремя методами:

1. функция `phi v` пакета EXPOKIT [40], где реализован метод подпространства Крылова с перезапуском процесса Арнольди шагами по времени;
2. метод подпространства Крылова, где для процесса Арнольди реализован перезапуск Нихоффа–Хохбрук (НХ) [36, глава 3];
3. метод подпространства Крылова с невязочным перезапуском процесса Арнольди [11, 8].

Отметим, что наша реализация процесса Арнольди не включает реортогонализации векторов базиса Крылова и что серьёзной потери ортогональности замечено не было. В таблицах этого раздела, содержащих численные результаты, последние два метода указаны как «НХ» и «Нев» соответственно. Методы перезапуска, представленные в этой работе, обозначены в этих таблицах соответственно сокращениями «НВ» (невязочно-временной перезапуск) и «АНВ» (адаптивный НВ-перезапуск).

Простым способом перезапуска вычислений действий матричной экспоненты методами подпространства Крылова является деление временного интервала на меньшие интервалы (шаги по времени), на каждом из которых метод сходится за приемлемое число шагов. Возникает вопрос, как такой перезапуск шагами по времени работает в сравнении с нашим НВ-перезапуском. Чтобы ответить на этот вопрос, мы и включили в тесты пакет EXPOKIT, использующий такой

Таблица 1. Результаты решения тестовой задачи конвекции-диффузии методом подпространства Крылова с перезапусками: «Нев» (невязочный), «НХ» (Нихоффа–Хохбрук), «НВ» (невязочно-временной) и «АНВ» (адаптивный НВ). В пакете ЕХРОКИТ используется перезапуск шагами по времени.

метод	длина, метод перезапуска	время расчёта, с	число шагов	точность
$Pe = 200$, сетка 802×802				
ЕХРОКИТ	30	57.3	800	3.82e-08
Арнольди	30, Нев	67.8	316	1.18e-07
Арнольди	30, НХ	71.7	317	1.02e-08
Арнольди	30, НВ	44.6	569	2.28e-08
Арнольди	30, АНВ	41.1	572	2.05e-08
ЕХРОКИТ	40	63.6	756	5.22e-09
Арнольди	40, Нев	74.9	298	4.40e-08
Арнольди	40, НХ	78.1	299	9.80e-09
Арнольди	40, НВ	45.1	505	1.18e-08
Арнольди	40, АНВ	42.9	499	1.27e-08
$Pe = 300$, сетка 1202×1202				
ЕХРОКИТ	30	129.2	800	3.25e-08
Арнольди	30, Нев	136.9	310	8.34e-08
Арнольди	30, НХ	145.0	312	9.99e-09
Арнольди	30, НВ	90.7	539	2.83e-08
Арнольди	30, АНВ	85.8	538	2.55e-08
ЕХРОКИТ	40	147.3	756	4.09e-09
Арнольди	40, Нев	161.1	292	2.51e-08
Арнольди	40, НХ	154.2	293	1.08e-08
Арнольди	40, НВ	98.3	489	1.26e-08
Арнольди	40, АНВ	93.7	492	1.01e-08

перезапуск [40].

Результаты сравнений методов представлены в таблицах 1 и 2. Числа, представленные в столбце таблиц «точность» — это относительные ошибки по отношению к решению, полученному пакетом ЕХРОКИТ. Результаты таблицы 1 показывают, что наши методы перезапуска НВ и АНВ превосходят остальные методы перезапуска по счётному времени. Кроме того, методы невязочного перезапуска и перезапуска НХ проигрывают методу ЕХРОКИТ по счётному времени. Причиной этого является решение спроецированной задачи в первых двух методах, требующее дополнительных вычислительных затрат. Так, например, выполнение 5 перезапусков длиной $k_{\max} = 30$ методом перезапуска НХ означает необходимость вычисления матричной экспоненты матрицы размера

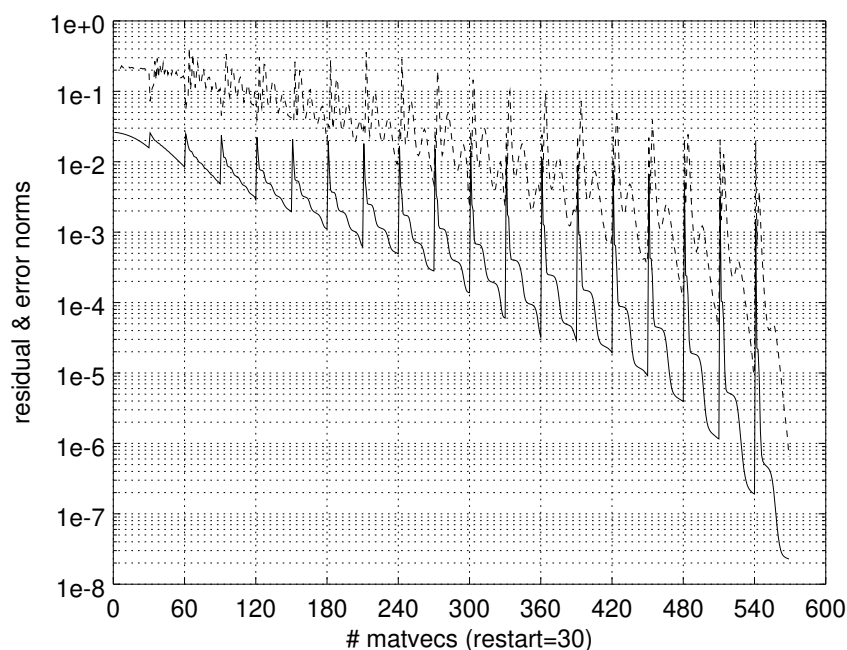


Рис. 8. Графики сходимости норм невязки (штриховая линия) и ошибки (сплошная линия) при решении тестовой задачи конвекции-диффузии, $Pe = 200$, сетка 802×802 , длина перезапуска 30.

150×150 . В методе невязочного перезапуска дополнительные затраты требуются для решения спроецированной задачи Коши, которая в этом методе не может быть решена вычислением матричной экспоненты [8]. Отметим также, что матрично-векторные произведения относительно дешёвы в этой двумерной тестовой задаче, что делает прочие вычислительные затраты более заметными.

На рис. 8 показаны графики сходимости норм невязки и ошибки для длины перезапуска 30 и матрицы, полученной при $Pe = 200$ на сетке 802×802 . Как видим, перезапуски возмущают процесс сходимости, что, в принципе, представляется неизбежным. В таблице 2 приведены результаты работы метода подпространства Крылова СО с различными перезапусками. Поскольку метод СО сходится гораздо быстрее обычного метода подпространства Крылова и требуется меньше матрично-векторных умножений, эффект перезапуска менее заметен. Тем не менее, мы видим, что все методы перезапуска на этой тестовой задаче работают хорошо. Недостатком нашего НВ-перезапуска является то, что, как обсуждалось в разделе 2.5, они имеют тенденцию к потере точности при небольшой длине перезапуска. Мы планируем заняться решением этой проблемы в будущем.

3.2. Тестовая задача «фотонный кристалл». В этой тестовой задаче рассматривается дискретизированная по пространству система трёхмерных уравнений

Таблица 2. Результаты решения тестовой задачи конвекции-диффузии методом подпространства Крылова СО с перезапусками: «Нев» (невязочный), «НХ» (Нихоффа–Хохбрук), «НВ» (невязочно-временной) и «АНВ» (адаптивный НВ).

метод	длина, метод перезапуска	время расчёта, с	число шагов	точность
<i>Pe</i> = 200, сетка 802 × 802				
Арнольди, СО	30, Нев	46.8	16	1.35e-09
Арнольди, СО	30, НХ	46.2	14	8.52e-09
Арнольди, СО	30, НВ	44.7	14	8.52e-09
Арнольди, СО	10, Нев	48.1	18	3.90e-07
Арнольди, СО	10, НХ	45.4	14	1.24e-08
Арнольди, СО	10, НВ	46.2	20	2.50e-07
Арнольди, СО	5, Нев	54.5	20	1.08e-09
Арнольди, СО	5, НХ	45.4	14	1.43e-08
Арнольди, СО	5, НВ	43.8	13	4.25e-05
<i>Pe</i> = 300, сетка 1202 × 1202				
Арнольди, СО	10, Нев	159.8	17	2.58e-07
Арнольди, СО	10, НХ	155.5	14	8.16e-09
Арнольди, СО	10, НВ	154.3	14	8.03e-08
Арнольди, СО	5, Нев	159.1	15	1.75e-07
Арнольди, СО	5, НХ	155.5	14	8.31e-09
Арнольди, СО	5, НВ	153.6	15	8.14e-06
<i>Pe</i> = 300, сетка 1202 × 1202, <i>t</i> = 10				
Арнольди, СО	30, Нев	110.3	17	2.94e-09
Арнольди, СО	30, НХ	108.0	15	1.25e-08
Арнольди, СО	30, НВ	106.0	15	1.25e-08
Арнольди, СО	10, Нев	109.5	18	1.42e-06
Арнольди, СО	10, НХ	106.5	15	1.57e-08
Арнольди, СО	10, НВ	104.0	15	1.57e-05

Максвелла в непроводящей среде без источников:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}, \\ \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H}, \end{aligned} \tag{22}$$

где ε и μ — скалярные функции переменных (x, y, z) , представляющие собой относительные диэлектрическую и магнитную проницаемости соответственно. Далее, \mathbf{H} и \mathbf{E} — это вектор-функции переменных (x, y, z, t) , неизвестные магнитное и электрическое поле соответственно. Краевые условия задают ну-

левые тангенциальные компоненты электрического поля на границе области. Физически такие условия могут означать, что граница является идеальным проводником. В данном же случае краевые условия — так называемые условия «большого бака», см., например, [42, 31], означающие, что граница области помещена достаточно далеко от интересующих нас объектов. Моделированию в неограниченных областях с граничными условиями типа «идеально подогнанные слои» (perfectly matched layers, PML [5, 29]) методами подпространства Крылова посвящена работа [7]. Пространственная постановка этой тестовой задачи и краевые условия взяты нами из работы [31]: в область $[-6.05, 6.05] \times [-6.05, 6.05] \times [-6.05, 6.05]$, заполненную воздухом (относительная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_r = 1$), помещена заготовка из диэлектрика, занимающая область $[-4.55, 4.55] \times [-4.55, 4.55] \times [-4.55, 4.55]$. В заготовке имеются 27 сферических полостей ($\varepsilon_r = 1$) радиуса 1.4, центры которых расположены в точках с координатами $(x_i, y_j, z_k) = (3.03i, 3.03j, 3.03k)$, $i, j, k = -1, 0, 1$. Задана диэлектрическая проницаемость материала заготовки $\varepsilon_r = 5.0$. В качестве начальных значений для обоих полей (кроме x - и y -компонент поля E) заданы нули. Компонентам электрического поля по направлению x - и y -присваиваются ненулевые значения локально в центре области, что соответствует испусканию светового импульса в начальный момент времени. Кроме того, вектор начальных значений v нормализуется: $v := v/\|v\|$. Стандартная конечно-разностная дискретизация по пространству на разнесённой сетке (схема Yee) приводит к системе дифференциальных уравнений вида (2). Для сеток $40 \times 40 \times 40$ и $80 \times 80 \times 80$, используемых в этом тесте, размеры этой системы — $n = 413\,526$ и $n = 3\,188\,646$ соответственно. Сравнение результатов, полученных на этих двух сетках, показывает, что более мелкие сетки для этой задачи не требуются. Длина временного интервала в этом тесте — $t = 10$, а требуемая точность — $\text{tol} = 10^{-6}$.

На этой тестовой задаче мы сравниваем два метода, которые оказались лучшими при решении первой тестовой задачи. Ими являются функция `phiv` пакета EXROKIT [40] и наш НВ-перезапуск (вместе со своей адаптивной версией АНВ). Как показывает наш опыт, методы «сдвиг-обращение» неэффективны для этой тестовой задачи. Это ожидаемо ввиду сильной несимметричности матрицы A . Заметим, что в случае уравнений Максвелла с неотражающими краевыми условиями (применяемыми, например, для моделирования распространения волн в неограниченных областях [5, 29]) или в проводящих средах крыловские методы «сдвиг-обращение» могут быть достаточно эффективны [7]. Это так потому, что дискретизация в обоих этих случаях приводит к ненулевой симметричной части в матрице A , что способствует эффективности крыловских методов [49, 7].

Результаты расчётов представлены в таблице 3, где данные в столбце «ошибка» — нормы относительной ошибки, вычисленной по отношению к решению

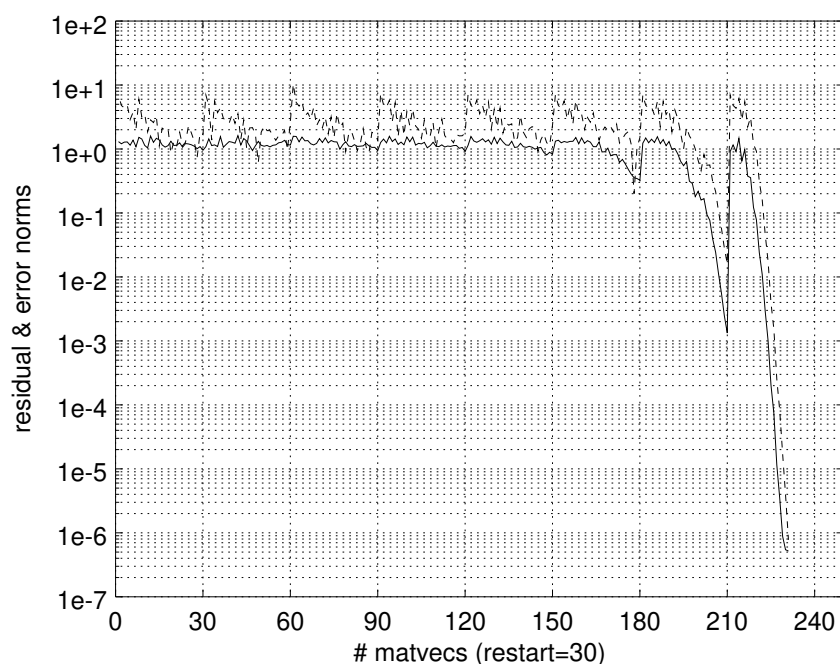


Рис. 9. Сходимость норм невязки (штриховая линия) и ошибки (сплошная линия) в тестовой задаче «фотонный кристалл» на сетке $40 \times 40 \times 40$ для длины перезапуска 30.

метода EXROKIT. Как видим, НВ-перезапуск работает хорошо и превосходит EXROKIT на больших длинах перезапуска. Заметим также, что, как и следовало ожидать, адаптивный вариант перезапуска, АНВ, снижает расчётное время, хотя и приводит в некоторых случаях к увеличению общего числа шагов крыловского метода.

На рис. 9 представлены графики сходимости невязки и ошибки для сетки $40 \times 40 \times 40$ и длины перезапуска 30. Как видно на рисунке, сходимость стагнирует до последних двух или трёх перезапусков. Вероятной причиной этого является то, что ненулевые элементы начального вектора v локализованы в центре области, а ненулевые значения вектора решения $\exp(-tA)v$ рассеяны для больших значений t по всей области. Поскольку A — локальная конечно-разностная дискретизация дифференциального оператора, линейные комбинации векторов подпространства Крылова v, Av, A^2v, \dots могут хорошо описать вектор решения только при достаточно большой размерности подпространства. Для тестовой задачи конвекции-диффузии такой стагнации не наблюдается (см. рис. 8), поскольку начальный вектор v в этом случае не локализован.

Выводы

В данной работе предложен невязочно-временной (НВ) перезапуск методов подпространства Крылова для вычисления действия матричной экспоненты на вектор. Представлены результаты по анализу перезапуска, процедура переза-

Таблица 3. Результаты решения тестовой задачи «фотонный кристалл» методом подпространства Крылова с перезапусками: «Нев» (невязочный), «НХ» (Нихоффа–Хохбрук), «НВ» (невязочно-временной) и «АНВ» (адаптивный НВ). В пакете EXROKIT используется перезапуск шагами по времени.

метод	длина, метод перезапуска	время расчёта, с	число шагов	точность
сетка $40 \times 40 \times 40$				
EXROKIT	30	10.6	256	$1.02e-06$
Arnoldi	30, НВ	11.3	231	$5.19e-07$
Арнольди	30, АНВ	11.2	229	$5.80e-07$
EXROKIT	70	23.3	288	$2.16e-09$
Арнольди	70, НВ	14.4	168	$1.17e-07$
Арнольди	70, АНВ	14.4	167	$1.57e-07$
сетка $80 \times 80 \times 80$				
EXROKIT	30	155.2	512	$4.37e-07$
Арнольди	30, НВ	162.0	502	$3.15e-07$
Арнольди	30, АНВ	160.8	488	$4.06e-07$
EXROKIT	40	170.3	420	$2.25e-06$
Арнольди	40, НВ	160.8	427	$2.77e-07$
Арнольди	40, АНВ	168.9	417	$9.69e-07$
EXROKIT	50	178.9	416	$2.33e-07$
Арнольди	50, НВ	169.1	383	$1.52e-07$
Арнольди	50, АНВ	169.1	379	$2.31e-07$
EXROKIT	60	208.1	434	$2.43e-08$
Арнольди	60, НВ	181.3	354	$1.06e-07$
Арнольди	60, АНВ	169.0	378	$1.49e-07$
EXROKIT	70	250.5	432	$2.74e-08$
Арнольди	70, НВ	190.1	338	$8.16e-08$
Арнольди	70, АНВ	162.2	389	$1.06e-07$

пуска протестирована в численных экспериментах. Предложенный перезапуск алгоритмически прост, для его реализации требуется только вычисление невязки (8), доступной в ходе вычислений, а задача, возникающая в ходе перезапуска, имеет тот же вид (2), что и исходная задача.

Кроме того, НВ-перезапуск хорошо показывает себя в сравнительных тестах с тремя другими методами перезапуска: перезапуском шагами по времени пакета EXROKIT [40], перезапуском Нихоффа-Хохбрук [36] и невязочным перезапуском [11, 8]. В рациональных методах подпространства Крылова типа «сдвиг-обращение» предложенный перезапуск хорошо работает для небольших размерностей подпространства при не слишком строгих требовани-

ях по точности. Предложен также адаптивный вариант НВ-перезапуска, АНВ. НВ-перезапуск реализован и доступен в пакете `expmARPACK` на сайте <http://team.kiam.ru/botchev/expm/>.

В дальнейшем в наши планы входит обобщение нового перезапуска на неоднородные и нелинейные системы дифференциальных уравнений возможно в комбинации с блочными методами подпространства Крылова [6]. Также было бы интересно посмотреть, как такой перезапуск будет работать для систем дифференциальных уравнений второго порядка, где решение выражается матричными синусом и косинусом. Вычислимое выражение для невязки, подобное (7),(8), может быть получено и в этом случае [6]. Однако поведение невязки и ошибки в методах подпространства Крылова в этом случае существенно отличается от их поведения для систем уравнений первого порядка, так как вместо спроецированных систем вида (13) мы имеем дело с их аналогами второго порядка (подробности см., например, в [24, 9, 20]). Таким образом, непонятно, будет ли предложенный подход работать для систем дифференциальных уравнений второго порядка.

Авторы выражают благодарность Владимиру Друскину за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] M. Afanasjew, M. Eiermann, O. G. Ernst, and S. Güttel. Implementation of a restarted Krylov subspace method for the evaluation of matrix functions. *Linear Algebra Appl.*, 429:2293–2314, 2008.
- [2] A. H. Al-Mohy and N. J. Higham. Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators. *SIAM J. Sci. Comput.*, 33(2):488–511, 2011. <http://dx.doi.org/10.1137/100788860>.
- [3] B. Beckermann. Image numérique, GMRES et polynômes de Faber. *C. R. Acad. Sci. Paris: Ser. I*, 340(11):855–860, 2005.
- [4] B. Beckermann and L. Reichel. Error estimation and evaluation of matrix functions via the Faber transform. *SIAM J. Num. Anal.*, 47:3849–3883, 2009.
- [5] J. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.*, 114:185–200, 1994.
- [6] M. A. Botchev. A block Krylov subspace time-exact solution method for linear ordinary differential equation systems. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 20(4):557–574, 2013.

- [7] M. A. Botchev. Krylov subspace exponential time domain solution of Maxwell's equations in photonic crystal modeling. *J. Comput. Appl. Math.*, 293:24–30, 2016. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2015.04.022>.
- [8] M. A. Botchev, V. Grimm, and M. Hochbruck. Residual, restarting and Richardson iteration for the matrix exponential. *SIAM J. Sci. Comput.*, 35(3):A1376–A1397, 2013. <http://dx.doi.org/10.1137/110820191>.
- [9] M. A. Botchev, D. Harutyunyan, and J. J. W. van der Vegt. The Gautschi time stepping scheme for edge finite element discretizations of the Maxwell equations. *J. Comput. Phys.*, 216:654–686, 2006. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.01.014>.
- [10] M. A. Botchev, G. L. G. Sleijpen, and H. A. van der Vorst. Stability control for approximate implicit time stepping schemes with minimum residual iterations. *Appl. Numer. Math.*, 31(3):239–253, 1999.
- [11] E. Celledoni and I. Moret. A Krylov projection method for systems of ODEs. *Appl. Numer. Math.*, 24(2-3):365–378, 1997.
- [12] H. De Raedt, K. Michielsen, J. S. Kole, and M. T. Figge. One-step finite-difference time-domain algorithm to solve the Maxwell equations. *Phys. Rev. E*, 67:056706, 2003.
- [13] K. Dekker and J. G. Verwer. *Stability of Runge–Kutta methods for stiff non-linear differential equations*. North-Holland Elsevier Science Publishers, 1984.
- [14] V. L. Druskin, A. Greenbaum, and L. A. Knizhnerman. Using nonorthogonal Lanczos vectors in the computation of matrix functions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(1):38–54, 1998.
- [15] V. L. Druskin and L. A. Knizhnerman. Two polynomial methods of calculating functions of symmetric matrices. *U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys.*, 29(6):112–121, 1989.
- [16] M. Eiermann and O. G. Ernst. A restarted Krylov subspace method for the evaluation of matrix functions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 44:2481–2504, 2006.
- [17] M. Eiermann, O. G. Ernst, and S. Güttel. Deflated restarting for matrix functions. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 32(2):621–641, 2011.
- [18] T. Göckler and V. Grimm. Uniform approximation of φ -functions in exponential integrators by a rational Krylov subspace method with simple poles. *SIAM*

Journal on Matrix Analysis and Applications, 35(4):1467–1489, 2014. <http://dx.doi.org/10.1137/140964655>.

- [19] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, third edition, 1996.
- [20] V. Grimm and M. Hochbruck. Rational approximation to trigonometric operators. *BIT*, 48(2):215–229, 2008.
- [21] S. Güttel. *Rational Krylov Methods for Operator Functions*. PhD thesis, Technischen Universität Bergakademie Freiberg, March 2010. www.guettel.com.
- [22] S. Güttel, A. Frommer, and M. Schweitzer. Efficient and stable Arnoldi restarts for matrix functions based on quadrature. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 35(2):661–683, 2014.
- [23] M. Hochbruck and C. Lubich. On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(5):1911–1925, Oct. 1997.
- [24] M. Hochbruck and C. Lubich. A gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations. *Numer. Math.*, 83:403–426, 1999.
- [25] M. Hochbruck, C. Lubich, and H. Selhofer. Exponential integrators for large systems of differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5):1552–1574, 1998.
- [26] M. Hochbruck and A. Ostermann. Exponential integrators. *Acta Numer.*, 19:209–286, 2010.
- [27] W. Hundsdorfer and J. G. Verwer. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer Verlag, 2003.
- [28] T. Jawecki, W. Auzinger, and O. Koch. Computable strict upper bounds for Krylov approximations to a class of matrix exponentials and ϕ -functions. *arXiv preprint arXiv:1809.03369*, 2018. <https://arxiv.org/pdf/1809.03369>.
- [29] S. G. Johnson. Notes on perfectly matched layers (PMLs). math.mit.edu/~stevenj/18.369/pml.pdf, March 2010.
- [30] L. A. Knizhnerman. Calculation of functions of unsymmetric matrices using Arnoldi’s method. *U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys.*, 31(1):1–9, 1991.
- [31] J. S. Kole, M. T. Figge, and H. De Raedt. Unconditionally stable algorithms to solve the time-dependent Maxwell equations. *Phys. Rev. E*, 64:066705, 2001.

- [32] L. A. Krukier. Implicit difference schemes and an iterative method for solving them for a certain class of systems of quasi-linear equations. *Sov. Math.*, 23(7):43–55, 1979. Translation from *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Mat.* 1979, No. 7(206), 41–52 (1979).
- [33] V. I. Lebedev. Explicit difference schemes for solving stiff systems of ODEs and PDEs with complex spectrum. *Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 13(2):107–116, 1998.
- [34] I. Moret and P. Novati. An interpolatory approximation of the matrix exponential based on Faber polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 131(1-2):361–380, 2001.
- [35] I. Moret and P. Novati. RD rational approximations of the matrix exponential. *BIT*, 44:595–615, 2004.
- [36] J. Niehoff. *Projektionsverfahren zur Approximation von Matrixfunktionen mit Anwendungen auf die Implementierung exponentieller Integriertoren*. PhD thesis, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, December 2006.
- [37] B. N. Parlett. *The Symmetric Eigenvalue Problem*. SIAM, 1998.
- [38] Y. Saad. Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(1):209–228, 1992.
- [39] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2d edition, 2003. Available from <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>.
- [40] R. B. Sidje. Expokit. A software package for computing matrix exponentials. *ACM Trans. Math. Softw.*, 24(1):130–156, 1998. www.maths.uq.edu.au/expokit/.
- [41] B. P. Sommeijer, L. F. Shampine, and J. G. Verwer. RKC: An explicit solver for parabolic PDEs. *J. Comput. Appl. Math.*, 88:315–326, 1998.
- [42] A. Taflove and S. C. Hagness. *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech House Inc., Boston, MA, third edition, 2005.
- [43] H. Tal-Ezer. Polynomial approximation of functions of matrices and applications. *Journal of Scientific Computing*, 4(1):25–60, 1989.

- [44] H. Tal-Ezer. On restart and error estimation for Krylov approximation of $w = f(A)v$. *SIAM J. Sci. Comput.*, 29(6):2426–2441, 2007.
- [45] П. К. Суетин. *Ряды по многочленам Фабера*. Наука, 1984.
- [46] J. van den Eshof and M. Hochbruck. Preconditioning Lanczos approximations to the matrix exponential. *SIAM J. Sci. Comput.*, 27(4):1438–1457, 2006.
- [47] H. A. van der Vorst. 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.*, 18:249–263, 1987.
- [48] H. A. van der Vorst. *Iterative Krylov methods for large linear systems*. Cambridge University Press, 2003.
- [49] J. G. Verwer and M. A. Botchev. Unconditionally stable integration of Maxwell’s equations. *Linear Algebra and its Applications*, 431(3–4):300–317, 2009.