



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 116 за 2020 г.](#)



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

**[М.А. Бочев](#)**

Двухуровневый решатель  
дополнения Шура с  
сеточно-независимой  
сходимостью для расчёта  
эволюционных задач  
фотоники

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Бочев М.А. Двухуровневый решатель дополнения Шура с сеточно-независимой сходимостью для расчёта эволюционных задач фотоники // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 116. 21 с.  
<https://doi.org/10.20948/prepr-2020-116>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-116>

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

**М.А. Бочев**

**Двухуровневый решатель дополнения Шура  
с сеточно-независимой сходимостью для расчёта  
эволюционных задач фотоники**

**Москва — 2020**

## **Бочев М.А.**

Двухуровневый решатель дополнения Шура с сеточно-независимой сходимостью для расчёта эволюционных задач фотоники

Двухуровневый, вложенный решатель на основе дополнения Шура предложен для итерационного решения систем так называемой двойной седловой структуры. Такие системы возникают при решении по времени уравнений Максвелла с неотражающими краевыми условиями типа идеально подогнанных слоёв (perfectly matched layer, PML) экспоненциальными и неявными схемами. В работе предложен подход, где двойная седловая структура разрешается дополнениями Шура, применяемыми на двух уровнях рекурсивно. Экспериментально показана сеточно-независимая сходимость предложенного подхода на первом, внешнем уровне. При этом линейные системы, получающиеся на вложенном, внутреннем уровне, являются системами эллиптического типа и, таким образом, могут быть эффективно решены различными стандартными методами.

**Ключевые слова:** уравнения Максвелла; краевые условия идеально подогнанных слоёв (perfectly matched layers, PML); двойные седловые линейные системы; предобусловливатели дополнения Шура; экспоненциальные схемы интегрирования по времени; методы подпространства Крылова «сдвиг-обращение»

## **M.A. Botchev**

A two-level Schur complement solver with mesh-independent convergence for the time domain photonics modeling

A nested Schur complement solver is proposed for iterative solution of linear systems arising in exponential and implicit time integration of the Maxwell equations with perfectly matched layer (PML) nonreflecting boundary conditions. These linear systems are the so-called double saddle point systems whose structure is handled by the Schur complement solver in a nested, two-level fashion. The solver is demonstrated to have a mesh-independent convergence at the outer level, whereas the inner level system is of elliptic type and thus can be treated efficiently by a variety of solvers.

**Key words:** Maxwell equations; perfectly matched layer (PML) nonreflecting boundary conditions; double saddle point systems; Schur complement preconditioners; exponential time integration; shift-and-invert Krylov subspace methods

# 1. Введение

Численное решение уравнений Максвелла по времени — важная вычислительная задача, возникающая в различных областях науки и техники, таких как фотоника, добыча нефти и газа, биомедицина и астрофизика. Довольно часто постановка задачи требует многократного решения уравнений Максвелла, например, для различных функций источника или разных параметров среды [1]. Кроме того, область по пространству, где должны быть решены уравнения, зачастую может быть достаточно большой (по сравнению с типичной длиной волны решения). Всё это может приводить к весьма значительным вычислительным затратам при решении уравнений Максвелла по времени. Поэтому в этих задачах требуется применение высокоэффективных вычислительных алгоритмов, таких как современные методы конечных элементов для дискретизации по пространству [2, 3] и эффективные схемы интегрирования по времени.

Наряду с многоскоростными (multirate) и неявными схемами интегрирования по времени [4, 5], экспоненциальные схемы интегрирования по времени [6] недавно показали себя достаточно эффективными при решении уравнений Максвелла [7, 8, 1]. Экспоненциальные схемы интегрирования, существенно использующие понятие матричной экспоненты, привлекательны не только в силу своих превосходных свойств устойчивости и точности, но и также экономичности и параллелизма по времени [9, 10].

Обычно, особенно если дискретизированный по пространству оператор Максвелла  $\mathcal{A}$  (определённый ниже в (3)) не является кососимметричной матрицей, действие матричной экспоненты в экспоненциальных интеграторах по времени вычисляется методами подпространства Крылова. Чтобы работать эффективно, эти методы зачастую включают в себя технику рациональных аппроксимаций [11, 12, 13, 14] (так что подпространство Крылова строится не для  $\mathcal{A}$ , а для некоторой рациональной функции от  $\mathcal{A}$ ) и так называемые перезапуски [15, 16, 17, 14, 18] для ограничения размерности подпространства Крылова. Популярным вариантом рациональных методов подпространства Крылова является метод «сдвиг-обращение» (SO) [12, 13]. Рациональные методы подпространства Крылова, включая метод подпространства Крылова SO, так же как и неявные схемы интегрирования по времени, требуют решения линейных систем с матрицами вида  $I + \gamma\mathcal{A}$ , где  $\gamma > 0$  — заданный параметр, относящийся к шагу по времени.

Несмотря на достижения последних десятилетий в прямых методах решения линейных систем с разреженными матрицами, для трёхмерных задач итерационные решатели остаются главным инструментом решения разреженных систем. Решение линейных систем с матрицей  $I + \gamma\mathcal{A}$ , где  $\mathcal{A}$  — дискретизированный пространственный оператор Максвелла, является особенно трудоёмким. Это обусловлено не только тем, что матрица  $\mathcal{A}$  имеет «седловую» структуру

(см. (4)), но и специальными неотражающими краевыми условиями, характерными для уравнений Максвелла. В этой работе предложен предобусловливатель для итерационного решения линейных систем с матрицей  $A$  для случая, когда наложены краевые условия идеально подогнанных слоёв\* (ИПС). В этом случае матрица  $A$  имеет так называемую двойную седловую структуру [19].

Предложенный предобусловливатель идейно близок к так называемым приращённым лагранжевым (ПЛ, augmented Lagrangian) предобусловливателям для решения седловых линейных систем. Эти предобусловливатели успешно применяются для решения уравнений Максвелла [20, 21] и уравнений Навье-Стокса [22, 23, 24]. Подобно ПЛ методам, наш подход основан на предположении, что линейные системы с верхним левым блоком (блоком  $(1, 1)$ ) могут эффективно решаться. Однако, в то время как ПЛ подход нацелен на обход возможных трудностей, связанных с дополнением Шура, в нашем случае работа с дополнением Шура оказывается приемлемой по вычислительным затратам. Это позволяет как разрешить седловую структуру на верхнем уровне, так и применить дополнение Шура на нижнем уровне. Таким образом, мы получаем предобусловливатель Шура, имеющий двухуровневую, вложенную структуру. Действительно, в описываемой ниже седловой задаче (4),(5) внешнего, первого, уровня внедиагональные блоки, соответствующие краевым условиям ИПС, имеют низкий ранг. В то же время дополнение Шура на внутреннем, втором, уровне оказывается разреженной матрицей простой структуры при условии, что магнитная проницаемость постоянна (см. соотношение (7)). Кроме того, предобусловливатели [20, 21] для уравнений Максвелла разработаны для гармонического по времени случая, а, следовательно, предназначены для решения проблемы ядра большой размерности и других трудностей, отсутствующих в нашем случае.

Данный препринт имеют следующую структуру. Постановка задачи дана в разделе 2. Двухуровневый решатель на основе дополнения Шура представлен в разделе 3. Другие предобусловливатели, применимые к данным задачам, обсуждаются в разделе 4. Раздел 5 посвящён вычислительным экспериментам. Наконец, выводы формулируются в последнем разделе, а некоторый дополнительный материал дан в приложениях А и В.

## 2. Постановка задачи

Решается система трёхмерных уравнений Максвелла

$$\begin{cases} \mu \partial_t H = -\sigma_1 H - \nabla \times E + J_H, \\ \varepsilon \partial_t E = \nabla \times H - \sigma_2 E + J_E, \end{cases} \quad (1)$$

---

\*Perfectly matched layers, PML.

где  $H = H(x, y, z, t)$  и  $E = E(x, y, z, t)$  — соответственно магнитное и электрическое векторные поля, а  $\mu$  и  $\varepsilon = \varepsilon(x, y, z) > 0$  — соответственно магнитная и электрическая проницаемости. Как обычно в задачах фотоники и нефтегазодобычи, будем считать, что  $\mu \equiv 1$ . Тем не менее, зависимость  $\mu = \mu(x, y, z)$  не исключается. Далее,  $\sigma_{1,2} = \sigma_{1,2}(x, y, z) \geq 0$  — коэффициенты проводимости, где  $\sigma_2$  содержит как физически заданную проводимость, так и добавленную искусственную проводимость, вызванную неотражающими краевыми условиями (в данной работе мы используем реализацию ИПС, описанную в [25]), в то время как  $\sigma_1$  обычно содержит только искусственную проводимость неотражающих краевых условий ИПС. Далее,  $J_{H,E} = J_{H,E}(x, y, z, t)$  представляют собой заданные функции источников. В случае, если заданные в (1) краевые условия были бы однородными условиями Дирихле, обычная конечно-разностная дискретизация Йи (Yee) на декартовой разнесённой сетке дала бы следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{bmatrix} M_\mu & 0 \\ 0 & M_\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{h}' \\ \mathbf{e}' \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} M_{\sigma_1} & K \\ -K^T & M_{\sigma_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{j}_H \\ \mathbf{j}_E \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где неизвестные вектор-функции  $\mathbf{h}(t)$  и  $\mathbf{e}(t)$  содержат значения на сетке искомым полей,  $M_\mu$ ,  $M_\varepsilon$  и  $M_{\sigma_{1,2}}$  — диагональные матрицы, содержащие сеточные значения  $\mu$ ,  $\varepsilon$  и  $\sigma_{1,2}$ , соответственно,  $K$  и  $K^T$  — дискретные операторы ротора, а  $\mathbf{j}_{H,E}(t)$  — сеточные значения функций источника  $J_{H,E}$ .

Заметим, что дискретизированная по пространству система дифференциальных уравнений, схожая по виду с (2), также получается, если при дискретизации по пространству используются векторные конечные элементы Уитни-Неделека (см., например, [26, 27, 4]). В этом случае  $M_\mu$ ,  $M_\varepsilon$ , and  $M_{\sigma_{1,2}}$  — матрицы массы. Приведём систему (2) к виду

$$\begin{bmatrix} \mathbf{h}' \\ \mathbf{e}' \end{bmatrix} = -A \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} M_\mu^{-1} \mathbf{j}_H(t) \\ M_\varepsilon^{-1} \mathbf{j}_E(t) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$A = \begin{bmatrix} M_\mu^{-1} & 0 \\ 0 & M_\varepsilon^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_{\sigma_1} & K \\ -K^T & M_{\sigma_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_1 & K_1 \\ -K_2^T & M_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

где  $M_1 = M_\mu^{-1} M_{\sigma_1}$ ,  $K_1 = M_\mu^{-1} K$ ,  $M_2 = M_\varepsilon^{-1} M_{\sigma_2}$ ,  $K_2^T = M_\varepsilon^{-1} K^T$ , а обратные матрицы здесь вычисляются явно, только если они диагональные или блочно-диагональные. Матрицы массы имеют блочно-диагональную структуру в разрывном методе Галёркина, см., например, [3]. Пусть  $n$  — размер системы дифференциальных уравнений в соотношении (3), при этом пусть  $n = n_1 + n_2$ , где  $n_{1,2}$  — число степеней свободы магнитного и электрического полей, соответственно.

Применение неотражающих краевых условий типа ИПС [25, 28] означает включение в систему Максвелла (1) вспомогательных переменных, которые

после дискретизации по пространству участвуют также и в системе (3). Эти вспомогательные переменные имеют ненулевые значения только в области ИПС (эта область располагается вокруг границ области по пространству, где решается система Максвелла). Включение краевых условий ИПС в (1),(3) (подробное описание этого процесса можно найти в [29]) приводит к дискретизированной по пространству системе дифференциальных уравнений увеличенного размера

$$y'(t) = -\mathcal{A}y(t) + g(t), \quad \mathcal{A} = \begin{bmatrix} A & B_1^T \\ -B_2 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad (4)$$

где  $N = m + n$ ,  $m$  — число дискретизированных по пространству переменных ИПС ( $m$  пропорционально числу точек сетки в области ИПС), а матрицы  $B_{1,2} \in \mathbb{R}^{m \times n}$  связывают эти переменные с основными переменными  $h$  и  $e$ . Типичные значения  $m$  и  $n$ , использованные в численных экспериментах, представлены ниже в таблице 1. Матрицы  $B_{1,2}$  описаны ниже в разделе А.

### 3. Двухуровневый вложенный решатель дополнения Шура

Экспоненциальные схемы интегрирования по времени на основе метода подпространства Крылова СО [13, 8], так же как и неявные схемы интегрирования по времени [4] систем вида (4), подразумевают решение линейных систем

$$(I + \gamma\mathcal{A})x = b, \quad (5)$$

где  $\mathcal{A}$  определена в (4), а  $\gamma > 0$  — заданный параметр, связанный с шагом по времени (или равный ему). Матрицы, имеющие, так же как и  $\mathcal{A}$ , вложенную седловую структуру<sup>†</sup>, недавно стали называть матрицами двойной седловой структуры [19]. Построение предобусловливателя для матриц этого типа начнём с наблюдения, что эффективный предобусловливатель должен включать в себя дополнение Шура (см., например, [30, 31, 32]). В частности, для матриц

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix},$$

эффективные блочно-диагональные предобусловливатели, основанные на дополнении Шура, имеют вид

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}.$$

<sup>†</sup>Строго говоря,  $I + \gamma\mathcal{A}$  получит седловую структуру после изменения знака во втором блочном ряду линейной системы  $(I + \gamma\mathcal{A})x = b$ .

Для итерационных методов подпространства Крылова, таких как GMRES, эти предобусловливатели гарантируют сходимость за три итерации [30]. Применение их к нашей матрице  $I + \gamma A$  означает, что линейные системы с матрицей

$$\begin{aligned} \text{(вариант 1)} \quad D - CA^{-1}B &= I + \gamma^2 B_2 (I + \gamma A)^{-1} B_1^T \\ \text{или (вариант 2)} \quad A - BD^{-1}C &= I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2 \end{aligned}$$

должны эффективно решаться. Сравнив эти два варианта, мы выбираем вариант 2 из-за более простой структуры получаемой матрицы. Далее, предположив, что линейные системы с матрицей  $I + \gamma A$  могут решаться эффективно, и принимая во внимание, что матрица  $B_1^T B_2$  имеет малый ранг, разумно ожидать, что  $I + \gamma A$  может быть хорошим предобусловливателем при решении систем с матрицей  $I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2$ . Это ожидание подтверждается практикой: число предобусловленных матрицей  $I + \gamma A$  итераций для решения систем с матрицей  $I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2$  при сгущении пространственной сетки остаётся примерно постоянным, см. табл. 2. Более того, как видно из формулы (13), приведённой ниже, матрица  $\gamma^2 B_1^T B_2$  зависит от шага сетки примерно так же, как зависит от шага сетки и матрица  $I + \gamma A$ , а именно только блоки (1, 2) и (2, 1) в этих матрицах зависят от шага сетки  $h$  как  $\sim 1/h$  (в предположении, что  $h = h_x = h_y = h_z$ ).

Возникает вопрос: могут ли и как системы с матрицей

$$I + \gamma A = \begin{bmatrix} I + \gamma M_1 & \gamma K_1 \\ -\gamma K_2^T & I + \gamma M_2 \end{bmatrix} \quad (6)$$

решаться эффективно. Последуем такому же подходу, как и с матрицей  $I + \gamma A$ , и рассмотрим два возможных варианта предобусловливателей, основанных на дополнении Шура:

$$\begin{aligned} \text{вариант 1:} \quad I + \gamma M_2 + \gamma^2 K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1, & \quad (7) \\ \text{вариант 2:} \quad I + \gamma M_1 + \gamma^2 K_1 (I + \gamma M_2)^{-1} K_2^T. & \end{aligned}$$

Во многих приложениях, где рассматриваются уравнения Максвелла, например, в фотонике и газонефтегазразведке, магнитная проницаемость  $\mu$  обычно постоянна ( $\mu \equiv 1$ ), в то время как электрическая проницаемость  $\varepsilon$  непостоянна и может являться сильно меняющейся функцией пространства. Поэтому, поскольку наш интерес к данной тематике вызван фотоникой, выберем вариант 1, где матрица  $\gamma^2 K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1$  имеет более простую структуру, чем матрица  $\gamma^2 K_1 (I + \gamma M_2)^{-1} K_2^T$  варианта 2. Перепишем дополнение Шура (7) выбранного варианта в более удобной форме

$$I + \gamma M_2 + \gamma^2 K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1 = M_\varepsilon^{-1} [M_\varepsilon + \gamma M_{\sigma_2} + \gamma^2 K^T (M_\mu + \gamma M_{\sigma_1})^{-1} K], \quad (8)$$

где матрица в квадратных скобках — симметричная и положительно определённая. Нетрудно заметить, что эта матрица близка по структуре к сдвинутому лапласиану, где сдвиг представлен матрицей масс  $M_\varepsilon + \gamma M_{\sigma_2}$ . Это означает, что существует множество эффективных методов решения систем с этой матрицей. Эти методы включают в себя (i) разреженные прямые методы факторизации (на грубых сетках); (ii) многосеточные методы (реализация которых в данном случае не должна представлять особых трудностей, поскольку речь идёт только об одном поле, электрическом); (iii) алгебраические многосеточные методы; (iv) предобусловленные методы сопряжённых градиентов.

Разработка надёжных (алгебраических) многосеточных методов решения для этой задачи выходит за рамки данной работы. Тем не менее, считается общепринятым (см., например, [20, стр. 283]), что имеются (алгебраические) многосеточные методы для этого класса задач с линейной вычислительной сложностью. Следовательно, мы можем полагаться на эту методику в нашем двухуровневом предобусловливании. В экспериментах, представленных в данной работе, мы используем метод сопряжённых градиентов (conjugate gradient, CG) предобусловленный неполным разложением Холецкого IC(0) [33]. Этот метод ICCG(0) оказывается весьма эффективным и, как правило, обеспечивает сокращение нормы невязки в  $10^{10}$  раз не более чем за 8 итераций даже на мелких сетках.

Описанная конструкция с вложенными дополнениями Шура может быть использована как предобусловливатель, а также как «прямой» метод, вычисляющий действие  $(I + \gamma \mathcal{A})^{-1}$  внутренними двухуровневыми итерациями с дополнениями Шура — так, как описано на рис. 1.

#### 4. Другие возможные предобусловливатели

Для решения систем седловой структуры вида (5) разработано множество различных предобусловливателей, см., например, [31, 32] и недавнюю работу [19]. Тем не менее, главной проблемой с применением линейных решателей в неявных и экспоненциальных схемах является то, что вычислительная работа, требуемая для решения линейных систем, должна окупаться увеличением шага по времени. Предположим, например, что на каждом шаге по времени требуется примерно десять итераций с простым предобусловливателем, таким что затраты на матрично-векторное умножение с предобусловленной матрицей примерно равным затратам на матрично-векторное умножение с непредобусловленной матрицей (этого можно добиться, например, трюком Эйзенштата [34]). Тогда шаг по времени сравнению с простой явной схемой должен быть увеличен по крайней мере в десять раз — так, чтобы скомпенсировать дополнительные расходы на предобусловленные итерации. Такое увеличение шага по времени, однако, не всегда возможно из-за ограничения на шаг по времени по точности, особенно

(а) внешний уровень:

По данным  $I + \gamma\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  и  $b \in \mathbb{R}^N$  (см. (3),(4)), решить  $(I + \gamma\mathcal{A})x = b$

1. Разбить  $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$  на  $b_1 \in \mathbb{R}^n$  и  $b_2 \in \mathbb{R}^m$ .
2. Вычислить  $b_1 := b_1 - \gamma B_1^T b_2$ .
3. Внешние итерации: решить  $(I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2)x_1 = b_1$  итерационно, с предобусловливателем  $I + \gamma A$ .
4. Вычислить  $x_2 := b_2 + \gamma B_2 x_1$  и  $x := \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ .

(б) внутренний уровень:

По данным  $I + \gamma A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  и  $v \in \mathbb{R}^n$  (см. (6)), решить  $(I + \gamma A)y = v$

1. Разбить  $v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$  на  $v_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$  и  $v_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$ .
2. Вычислить  $v_1 := (I + \gamma M_1)^{-1} v_1$  и  $v_2 := v_2 + \gamma K_2^T v_1$ .
3. Внутренние итерации: решить итерационно  $(I + \gamma M_2 + \gamma^2 K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1) y_2 = v_2$ , см. (8).
4. Вычислить  $y_1 := v_1 - \gamma (I + \gamma M_1)^{-1} K_1 y_2$  и  $y := \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$ .

*Рис. 1.* Алгоритмическое описание внешнего (а) и внутреннего (б) уровней двухуровневого решателя дополнения Шура

если решаемая эволюционная задача является умеренно жёсткой. Заметим, что уравнения Максвелла с неотражающими краевыми условиями типа идеально подогнанных слоёв как раз и являются умеренно жёсткой эволюционной задачей. Это делает выбор предобусловливателей в эволюционных задачах трудным и существенно ограничивает набор их возможных вариантов [4].

Недавно для решения конечно-разностных дискретизаций уравнений Максвелла по времени был предложен эффективный предобусловливатель переменных направлений (alternating direction implicit, ADI) [35]. В работе [29] Де Клут, Мариссен и Вестендорп сравнили этот предобусловливатель с предобусловливателем расщеплённых полей (основанным на расщеплении дискретизированных уравнений по магнитному и электрическому полям). Результаты сравнения показывают, что предобусловливатель расщеплённых полей превосходит предобусловливатель переменных направлений по процессорному времени. Кроме того, в отличие от предобусловливателя переменных направлений, предобусловливатель расщеплённых полей может применяться не только к конечно-разностным дискретизациям уравнений Максвелла на декартовых сетках. Линейную систему (5) с предобусловливателем расщеплённых полей или переменных

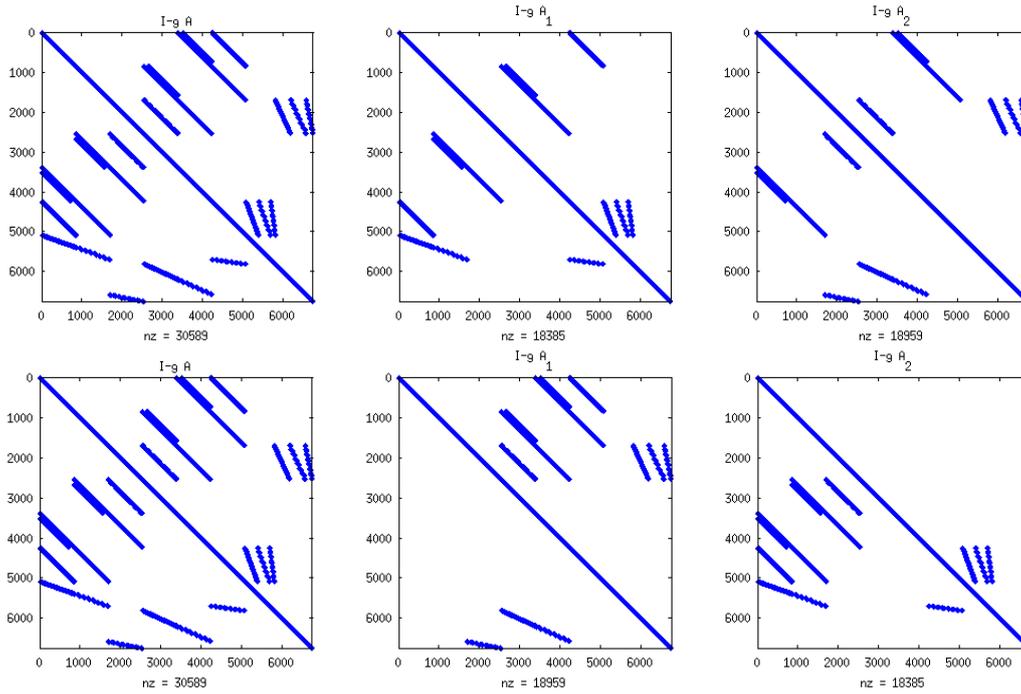


Рис. 2. График разреженности матрицы  $I + \gamma A$  (левый столбец) и её факторы  $I + \gamma A_{1,2}$  в предобусловливателях переменных направлений (верхний ряд) и расщеплённых полей (нижний ряд) для грубой сетки  $10 \times 10 \times 6$ . Матрицы  $I + \gamma A$  and  $I + \gamma A_{1,2}$  занимают первые 5082 строк и столбцов матриц матриц  $I + \gamma A$  и  $I + \gamma A_{1,2}$ , соответственно.

направлений, применёнными справа, можно записать в виде

$$\tilde{A}\tilde{x} = b, \quad \tilde{A} = (I + \gamma A)\mathcal{M}^{-1}, \quad \tilde{x} = \mathcal{M}x, \quad (9)$$

где

$$\mathcal{M} = (I + \gamma A_1)(I + \gamma A_2), \quad A_1 + A_2 = A. \quad (10)$$

В предобусловливателе расщеплённых полей матрицы  $A_{1,2}$  имеют вид

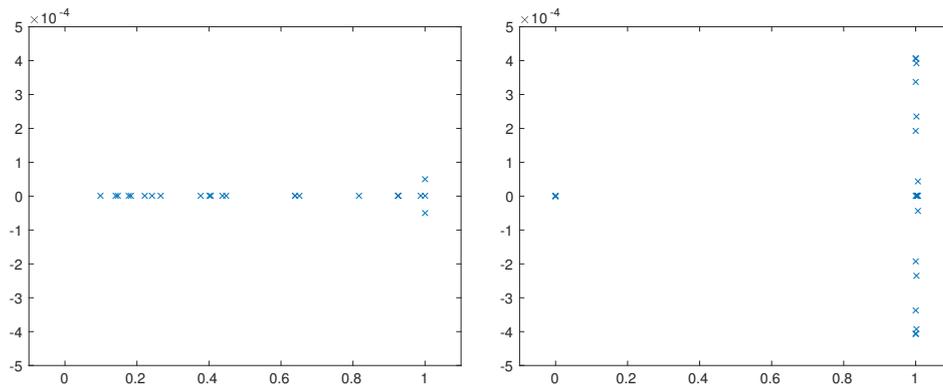
$$A_1 = \begin{bmatrix} A_1 & B_{1,H}^T \\ -B_{2,H} & 0 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} A_2 & B_{1,E}^T \\ -B_{2,E} & 0 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

$$A = A_1 + A_2, \quad A_1 = \begin{bmatrix} M_1 & K_1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -K_2^T & M_2 \end{bmatrix},$$

где матрицы  $B_{j,H}$ ,  $B_{j,E}$ ,  $j = 1, 2$ , формируют расщепления блоков  $B_{1,2}$ ,

$$B_1 = B_{1,H} + B_{1,E}, \quad B_2 = B_{2,H} + B_{2,E},$$

определённые в разделе В. Подробное определение предобусловливателя переменных направлений приводится в [29, раздел 5.1] и [35]. Как в предобусловливателе переменных направлений, так и в предобусловливателе расщеплённых



*Рис. 3.* Числа Ритца на комплексной плоскости, полученные 24 итерациями метода FOM с предобусловливателями переменных направлений (левый график) и расщеплённых полей (правый график). Эти предобусловливатели не обладают сеточно-независимой сходимостью.

полей матрицы  $I + \gamma \mathcal{A}_{1,2}$  не являются треугольными (см. рис. 2), так что для реализации обоих предобусловливателей применяется разреженное LU разложение этих матриц.

Численные тесты, представленные в [29], показывают, что предобусловливатели переменных направлений и расщеплённых полей требуют примерно одинаковое число итераций. Тем не менее, как отмечалось выше, предобусловливатель расщеплённых полей требует меньше процессорного времени. Причиной тому является другое привлекательное свойство этого предобусловливателя, отмеченное в [29]: разреженное LU разложение множителей  $I + \gamma \mathcal{A}_{1,2}$  предобусловливателя расщеплённых полей не приводит к заполнению, то есть, к появлению новых ненулевых элементов во множителях LU разложения. Для предобусловливателя переменных направлений это не так: здесь заполнение варьируется от 25% на грубых сетках до 65% на сетке  $80 \times 80 \times 48$  [29, раздел 6.2]. Числа Ритца, полученные 24 итерациями итерационного метода FOM (fully orthogonal method) [36], для обоих предобусловливателей показаны на рис. 3. Как видим, оба предобусловливателя приводят к предобусловленной матрице с вещественным спектром.

## 5. Численные эксперименты

В этом тесте рассматривается модель трёхмерного фотонного кристалла. По границам  $x$  и  $y$  пространственной области  $[1, 4] \times [1, 4] \times [0, 3]$  налагаются краевые условия идеально подогнанных слоёв (ИПС или PML), а по границе  $z$  — однородные краевые условия Дирихле, соответствующие идеальному проводнику. За счёт области ИПС, которая окаймляет пространственную область по границам  $x$  и  $y$ , вычислительная область имеет размеры  $[0, 5] \times [0, 5] \times [0, 3]$ . Кристалл состоит из  $3 \times 3 \times 3$  сфер радиуса 0.4 с центрами в точках  $(x_i, y_j, z_k) =$

Таблица 1. Размер системы для некоторых из сеток, использованных в тестах

сетка	размер системы
$n_x \times n_y \times n_z$	$N = n + m$
$20 \times 20 \times 12$	$45\,565 = 34\,398 + 11\,167$
$40 \times 40 \times 24$	$333\,425 = 252\,150 + 81\,275$
$80 \times 80 \times 48$	$2\,548\,441 = 1\,928\,934 + 619\,507$
$160 \times 160 \times 96$	$19\,922\,345 = 15\,086\,022 + 4\,836\,323$

Таблица 2. Число итераций метода BiCGstab(2) и норма невязки при решении линейных систем с матрицей  $I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2$ , предобусловленной матрицей  $I + \gamma A$ , а также нормы симметричных и кососимметричных частей матрицы  $\gamma^2 B_1^T B_2$ ,  $\mathbf{H} = \frac{\gamma^2}{2}(B_1^T B_2 + (B_1^T B_2)^T)$  и  $\mathbf{S} = \frac{\gamma^2}{2}(B_1^T B_2 - (B_1^T B_2)^T)$ .

сетка	# итераций, норма невязки	$\ \mathbf{H}\ _1$	$\ \mathbf{S}\ _1$
$20 \times 20 \times 12$	21, $2.80\text{e-}07$	1968	9.8
$40 \times 40 \times 24$	21, $4.73\text{e-}07$	1572	19.6
$60 \times 60 \times 36$	21, $5.71\text{e-}07$	1458	29.4

$(2.5 + i, 2.5 + j, 1.5 + k)$ ,  $i, j, k = -1, 0, 1$ . Магнитная проницаемость  $\mu \equiv 1$  во всей области, а электрическая проницаемость  $\varepsilon$  равна 8.9 внутри сфер и 1 в остальной области.

В тестах рассматриваются матрицы  $\mathcal{A}$ , полученные стандартной конечно-разностной схемой Йи (Yee) на разнесённых сетках, размеры которых указаны в табл. 1. Параметр  $\gamma$  выбирается, как указано в [8], и получает значение  $\gamma = 0.012$  во всех тестах. Тесты выполнены в Матлабе на линукс-компьютере с 8 процессорами Intel Xeon E5504 с частотой 2.00 ГГц.

Как видно из табл. 2, линейные системы с матрицей  $I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2$  эффективно решаются итерационно с матрицей  $I + \gamma A$  в качестве предобусловливателя. Действие предобусловливателя здесь вычислялось с помощью разреженного LU разложения (пакета UMFPACK в Матлабе), из-за чего в этом случае мы не могли использовать более мелкие сетки. В этих экспериментах компоненты векторов точного решения задавались случайными величинами со стандартным нормальным распределением. Это делалось для того, чтобы сделать тестовую задачу сложной, исключив возможность быстрой сходимости за счёт гладкого решения.

Число итераций, показанное в табл. 2, получено для метода BiCGstab(2) (стандартной, встроенной версии Матлаба), запускаемого со значением параметра заданной точности  $10^{-6}$ . В той же таблице мы также приводим нормы симметричных и кососимметричных частей матрицы  $\gamma^2 B_1^T B_2$ . Эти величины

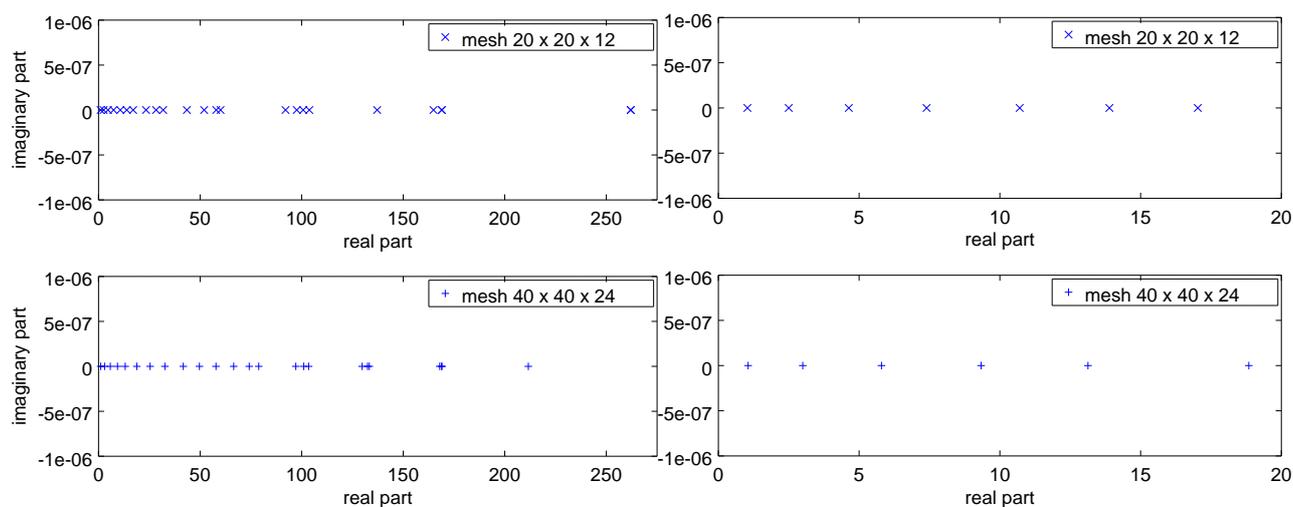


Рис. 4. Числа Ритца предобусловленной матрицы внешнего уровня  $I + (I + \gamma A)^{-1} \gamma^2 B_1^T B_2$  на комплексной плоскости. Использованы сетки  $20 \times 20 \times 12$  (верхний ряд) и  $40 \times 40 \times 24$  (нижний ряд). Числа Ритца вычислены 24 итерациями метода FOM. Правые графики — увеличения левых графиков.

показывают, что поле значений этой матрицы ограничено, и подтверждают то, что видно из соотношения (13): только внедиагональные блоки  $B_1^T B_2$  (входящие в кососимметричную часть) зависят от шага сетки, и эта зависимость линейная.

На рис. 4 показаны 24 числа Ритца предобусловленной матрицы  $I + (I + \gamma A)^{-1} \gamma^2 B_1^T B_2$ . Как видим, числа Ритца вещественны, хорошо кластеризованы и со сгущением сетки остаются изолированными от нуля. Это означает, что предобусловливатель эффективен и успешно уменьшает кососимметричную часть матрицы.

Для тестирования нашего вложенного двухуровневого решателя на основе дополнения Шура брались линейные системы, где компоненты векторов точного решения снова задавались случайными величинами со стандартным нормальным распределением. Это делалось, чтобы исключить быструю сходимость за счёт гладкости решения. Решатель был реализован как прямой метод, в точности так, как показано на рис. 1, с методом GMRES(10) на внешнем уровне и методом ICCG(0) — на внутреннем. В качестве остановочного критерия для обоих методов задавалось условие уменьшения нормы невязки в  $10^{10}$  раз.

Прежде всего на грубой сетке  $20 \times 20 \times 12$  мы тестируем сходимость нашего двухуровневого решателя в случае, когда внутренний итерационный решатель ICCG(0) заменён на прямой разреженный решатель, матлабовский UMFPACK. Это делается для того, чтобы убедиться в том, что внутренние итерации не портят сходимости внешних итераций. Графики сходимости внешних итераций с итерационным и с прямым внутренним решателем представлены на левом верхнем графике рис. 5. Как видим, за счёт высокой требуемой точности внутренние итерации обеспечивают такую же сходимость внешних итераций, как и внутрен-

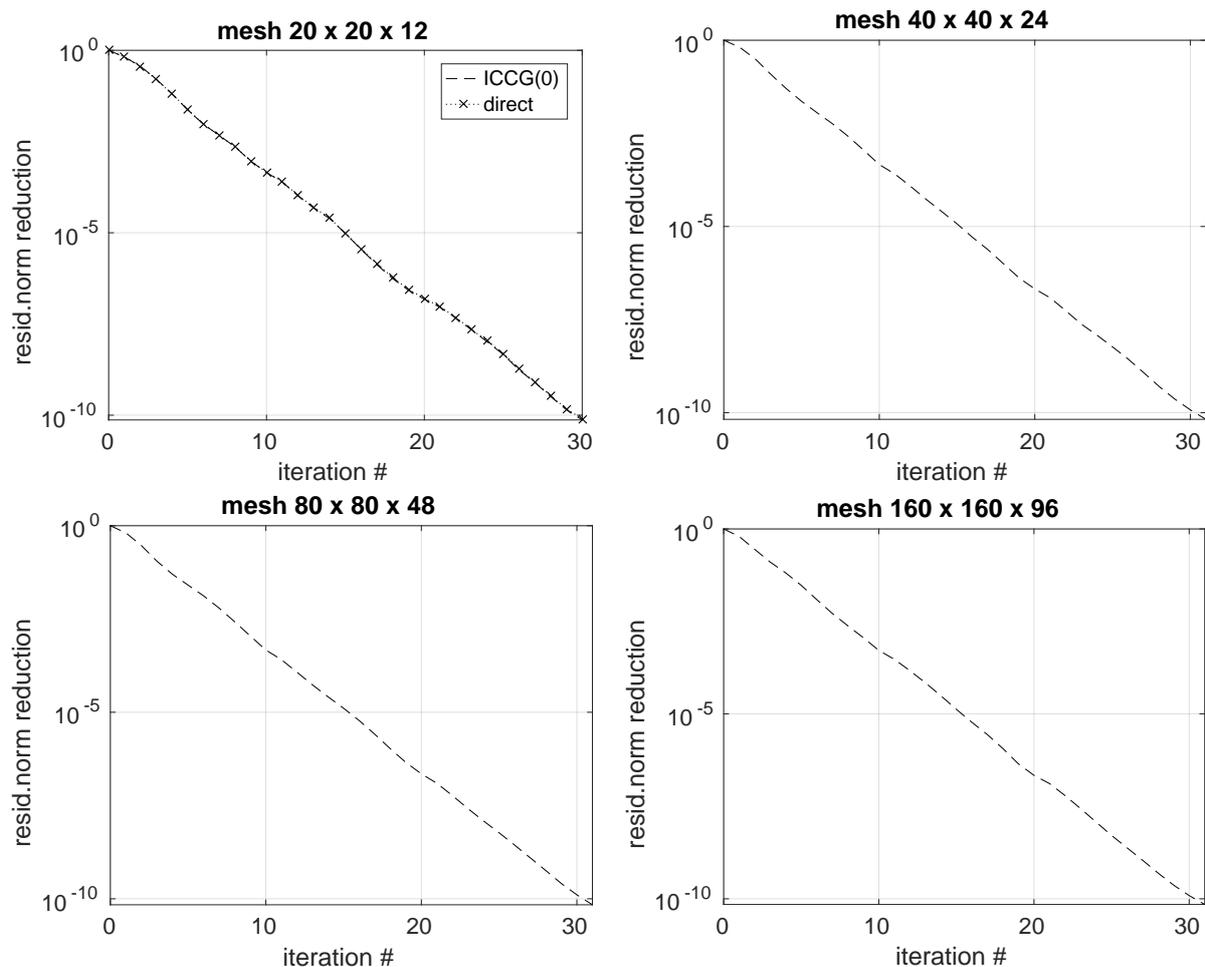


Рис. 5. Графики сходимости внешних итераций двухуровневого решателя дополнения Шура для вектора точного решения со случайными компонентами. На внешнем уровне используется метод GMRES(10). Левый верхний график также показывает сходимость внешних итераций, когда линейная система внутреннего уровня решается прямым методом (разреженным LU разложением), а не итерациями ICCG(0). На остальных трёх графиках на внутреннем уровне используется ICCG(0).

ний прямой решатель. Это говорит о том, что в данной постановке не требуется рассматривать наш двухуровневый метод как гибкий предобусловливатель (и работать со специальным итерационным решателем типа FGMRES).

Число внешних и внутренних итераций для всех сеток представлены в табл. 3. Указанное число внутренних итераций — это суммарное число внутренних итераций, требуемое на всех внешних итерациях вместе. Как видим, число внешних итераций остаётся постоянным и, как и ожидалось, не зависит от шага сетки. Далее, следует отметить монотонную сходимость (рис. 5) внешних итераций, которая не затрагивается перезапусками GMRES(10). Хотя число внутренних итераций и растёт (напомним, что метод сопряжённых градиентов

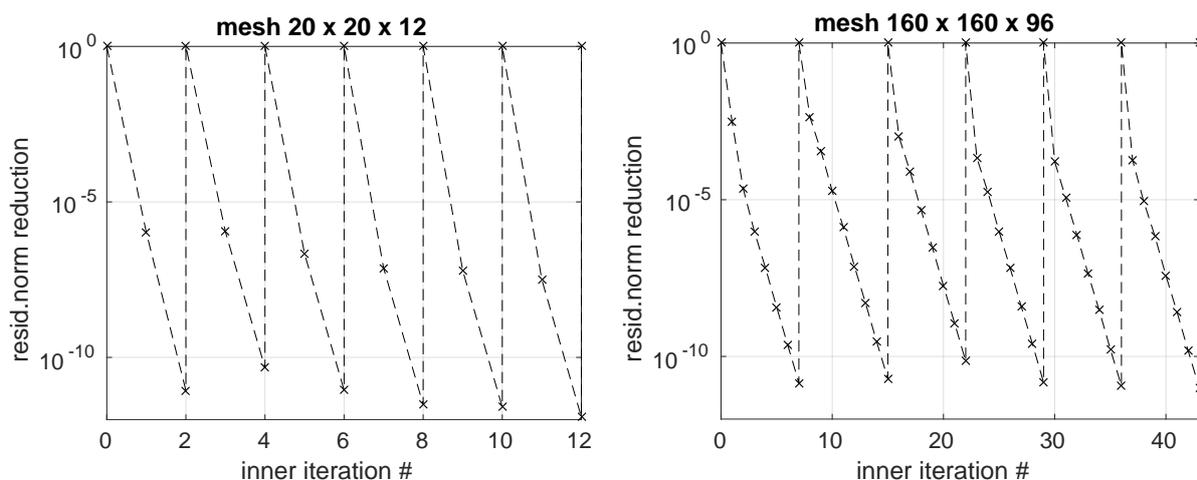


Рис. 6. Сходимость внутренних итераций на первых 6 внешних итерациях двухуровневого решателя дополнения Шура для теста со случайным вектором точного решения. Каждый зигзаг соответствует итерации внешнего решателя GMRES(10). Левый график: самая грубая сетка  $20 \times 20 \times 12$ , правый график: наиболее мелкая сетка  $160 \times 160 \times 96$ .

Таблица 3. Результаты работы двухуровневого решателя дополнения Шура для теста со случайным вектором точного решения. Используются методы GMRES(10) (внешние итерации) и ICCG(0) (внутренние итерации). Указано суммарное число внутренних итераций по всем внешним итерациям.

сетка	норма невязки	# итераций внешних (внутр.)	процессорное время
$20 \times 20 \times 12$	$7.50e-11$	30 (68)	3.59 с
$40 \times 40 \times 24$	$6.67e-11$	31 (108)	17.3 с
$80 \times 80 \times 48$	$6.84e-11$	31 (145)	135.6 с
$160 \times 160 \times 96$	$7.01e-11$	30 (234)	1258 с

используется с простым предобусловливателем неполного разложения Холецкого IC(0)), сходимость внутренних итераций можно считать отличной: требуемое сокращение нормы невязки в  $10^{10}$  раз наблюдается не более чем за 7–8 итераций (рис. 6).

В табл. 4 представлены результаты сравнения двухуровневого решателя дополнения Шура и предобусловливателя расщеплённых полей. Сравнение сделано для линейных систем, возникающих при интегрировании по времени экспоненциальным методом рационального подпространства Крылова типа «сдвиг-обращение». По этой причине требуемая заданная точность, приведённая в таблице, меняется. Мы видим, что на мелких сетках двухуровневый решатель дополнения Шура превосходит предобусловливателя расщеплённых полей. Это ожидаемо, поскольку предобусловливателя расщеплённых полей не обладает

Таблица 4. Результаты сравнения двухуровневого решателя дополнения Шура (с внешними итерациями GMRES(10) и внутренними итерациями ICCG(0)) и предобусловливателя расщеплённых полей (с методом GMRES без перезапуска). Для двухуровневого решателя дополнения Шура указано суммарное число внутренних итераций по всем внешним итерациям.

сетка, требуемая точность	расщеплённые поля проц.время, норма невязки, # итераций	дополнение Шура проц.время, норма невязки, # итераций
$40 \times 40 \times 24$ $9.64e-11$	0.49 с, $7.58e-12$ 7 итераций	0.54 с, $1.23e-13$ итераций: 2 внешн, 8 внутр
$80 \times 80 \times 48$ $8.09e-09$	3.84 с, $5.95e-10$ 8 итераций	3.51 с, $2.09e-09$ итераций: 2 внешн, 8 внутр
$160 \times 160 \times 96$ $4.23e-09$	59.7 с, $3.97e-09$ 14 итераций	45.8 с, $3.77e-09$ итераций: 2 внешн, 19 внутр

сеточно-независимой сходимостью.

Поскольку измерение процессорного времени в Матлабе не всегда является надёжным показателем эффективности, в табл. 5 приведены оценки затрат для обоих методов решения. Напомним, что в нашей постановке задачи матрица  $I + \gamma M_1$  — диагональная, так что формирование разреженной матрицы дополнения Шура  $I + \gamma M_2 + K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1$  и вычисление её неполного разложения Холецкого являются выполнимыми задачами. Кроме того, как отмечалось выше, разреженное LU разложение матриц расщеплённых полей  $I + \gamma A_{1,2}$  не приводит к заполнению. Следовательно, затраты на решение систем с этими матрицами примерно равны затратам на классические треугольные предобусловливатели типа SSOR. Таким образом, мы видим, что затраты на одну итерацию в обоих методах являются величинами одного порядка, а измеренное процессорное время, в принципе, верно согласуется с оценками затрат.

## 6. Выводы

Предложен вложенный двухуровневый решатель на основе дополнения Шура, предназначенный для линейных систем, возникающих при интегрировании по времени уравнений Максвелла экспоненциальными или неявными схемами. Решатель показывает сеточно-независимую сходимость и превосходит по скорости вычислений другие предобусловливатели, такие как предобусловливатель переменных направлений и предобусловливатель расщеплённых полей.

Различные аспекты предложенного подхода требуют дальнейшего исследования и возможного улучшения. В частности, мы планируем тестирование предложенного двухуровневого решателя дополнения Шура в комбинации с более надёжным и сеточно-независимым внутренним решателем. Другой ин-

Таблица 5. Оценки вычислительных затрат двух методов, использованных в тестах: двухуровневого решателя дополнения Шура и предобусловливателя расщеплённых полей. Обозначения:  $S = I + \gamma M_2 + \gamma^2 K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1$  — дополнение Шура на внутреннем уровне, «матвек» — матрично-векторное умножение.

затраты	дополнение Шура внешний уровень	дополнение Шура внутр. уровень	расщепление полей
инициализация	формирование $B_1^T B_2$	(1) формирование $K_2^T (I + \gamma M_1)^{-1} K_1$ (2) IC(0) м-цы $S$	(1) расщепление (11) (2) разреженное LU м-ц $I + \gamma \mathcal{A}_{1,2}$
на итерацию	(1) матвек $I + \gamma \mathcal{A}$ (2) внутр. решатель	(1) матвек $I + \gamma \mathcal{A}$ (2) затраты на IC(0)	(1) матвек $I + \gamma \mathcal{A}$ (2) LU подстановки для $(I + \gamma \mathcal{A}_{1,2})^{-1}$

интересный вопрос возникает о том, какой из вариантов предложенного подхода более эффективен: вариант в виде прямого двухуровневого решателя (т.е., вариант, протестированный в этой работе) или вариант в виде предобусловливателя в рамках трёхуровневого итерационного метода.

## Список литературы

- [1] Botchev M. A., Hanse A. M., Uppu R. Exponential Krylov time integration for modeling multi-frequency optical response with monochromatic sources // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2018. — Vol. 340. — P. 474–485. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2017.12.014>.
- [2] Recent advances on a DGTD method for time-domain electromagnetics / S. Descombes, C. Durochat, S. Lantéri et al. // Photonics and Nanostructures. — 2013. — Vol. 11, no. 4. — P. 291–302.
- [3] Sármany D., Botchev M. A., van der Vegt J. J. W. Time-integration methods for finite element discretisations of the second-order Maxwell equation // Computers & Mathematics with Applications. — 2013. — Vol. 65, no. 3. — P. 528–543.
- [4] Verwer J. G., Botchev M. A. Unconditionally stable integration of Maxwell's equations // Linear Algebra and its Applications. — 2009. — Vol. 431, no. 3–4. — P. 300–317.
- [5] Descombes S., Lantéri S., Moya L. Locally implicit discontinuous Galerkin time domain method for electromagnetic wave propagation in dispersive media applied to numerical dosimetry in biological tissues // SIAM Journal of Scientific Computing. — 2016. — Vol. 38, no. 5. — P. A2611–A2633.

- [6] Hochbruck M., Ostermann A. Exponential integrators // *Acta Numer.* — 2010. — Vol. 19. — P. 209–286.
- [7] 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. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1002/zamm.201300306>.
- [8] Botchev M. A. Krylov subspace exponential time domain solution of Maxwell's equations in photonic crystal modeling // *J. Comput. Appl. Math.* — 2016. — Vol. 293. — P. 24–30. — <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2015.04.022>.
- [9] Gander M. J., Güttel S. PARAEXP: A parallel integrator for linear initial-value problems // *SIAM Journal on Scientific Computing.* — 2013. — Vol. 35, no. 2. — P. C123–C142.
- [10] Kooij G. L., Botchev M. A., Geurts B. J. A block Krylov subspace implementation of the time-parallel Paraexp method and its extension for nonlinear partial differential equations // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* — 2017. — Vol. 316, no. Supplement C. — P. 229–246. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.09.036>.
- [11] Druskin V. L., Knizhnerman L. A. Extended Krylov subspaces: approximation of the matrix square root and related functions // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* — 1998. — Vol. 19, no. 3. — P. 755–771.
- [12] Moret I., Novati P. RD rational approximations of the matrix exponential // *BIT.* — 2004. — Vol. 44. — P. 595–615.
- [13] 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.
- [14] Güttel S. Rational Krylov Methods for Operator Functions : Ph. D. thesis / Stefan Güttel ; Technischen Universität Bergakademie Freiberg. — 2010. — March. — [www.guettel.com](http://www.guettel.com).
- [15] Niehoff J. Projektionsverfahren zur Approximation von Matrixfunktionen mit Anwendungen auf die Implementierung exponentieller Integratoren : Ph. D. thesis / Jörg Niehoff ; Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf. — 2006. — December.

- [16] Tal-Ezer H. On restart and error estimation for Krylov approximation of  $w = f(A)v$  // SIAM J. Sci. Comput. — 2007. — Vol. 29, no. 6. — P. 2426–2441. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1137/040617868>.
- [17] Implementation of a restarted Krylov subspace method for the evaluation of matrix functions / M. Afanasjew, M. Eiermann, O. G. Ernst, S. Güttel // Linear Algebra Appl. — 2008. — Vol. 429. — P. 2293–2314.
- [18] Eiermann M., Ernst O. G., Güttel S. Deflated restarting for matrix functions // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2011. — Vol. 32, no. 2. — P. 621–641.
- [19] Beik F. P. A., Benzi M. Iterative methods for double saddle point systems // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2018. — Vol. 39. — P. 902–921.
- [20] Greif C., Schötzau D. Preconditioners for the discretized time-harmonic Maxwell equations in mixed form // Numerical Linear Algebra with Applications. — 2007. — Vol. 14, no. 4. — P. 281–297.
- [21] Greif C., Schötzau D. Preconditioners for saddle point linear systems with highly singular (1, 1) blocks // ETNA, Special Volume on Saddle Point Problems. — 2006. — Vol. 22. — P. 114–121.
- [22] Benzi M., Olshanskii M. A. An augmented Lagrangian-based approach to the Oseen problem // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2006. — Vol. 28, no. 6. — P. 2095–2113.
- [23] Benzi M., Olshanskii M. A. Field-of-values convergence analysis of augmented Lagrangian preconditioners for the linearized Navier–Stokes problem // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 2011. — Vol. 49, no. 2. — P. 770–788.
- [24] Benzi M., Olshanskii M. A., Wang Z. Modified augmented Lagrangian preconditioners for the incompressible Navier–Stokes equations // International Journal for Numerical Methods in Fluids. — 2011. — Vol. 66, no. 4. — P. 486–508.
- [25] Johnson S. G. Notes on perfectly matched layers (PMLs). — [math.mit.edu/~stevenj/18.369/pml.pdf](http://math.mit.edu/~stevenj/18.369/pml.pdf). — 2010. — March.
- [26] Rodrigue G., White D. A vector finite element time-domain method for solving Maxwell’s equations on unstructured hexahedral grids // SIAM J. Sci. Comput. — 2001. — Vol. 23, no. 3. — P. 683–706.
- [27] Botchev M. A., Verwer J. G. Numerical integration of damped Maxwell equations // SIAM J. Sci. Comput. — 2009. — Vol. 31, no. 2. — P. 1322–1346. — <http://dx.doi.org/10.1137/08072108X>.

- [28] Berenger J. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // J. Comput. Phys. — 1994. — Vol. 114. — P. 185–200.
- [29] de Cloet J., Marissen J., Westendorp T. Preconditioners based on splitting for time domain photonic crystal modeling. — BSc Thesis, Applied Mathematics Department, University of Twente. — 2015. — June. — <http://essay.utwente.nl/67746/>.
- [30] Murphy M., Golub G., Wathen A. A note on preconditioning for indefinite linear systems // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2000. — Vol. 21, no. 6. — P. 1969–1972. — <https://doi.org/10.1137/S1064827599355153>.
- [31] Benzi M., Golub G. H., Liesen J. Numerical solution of saddle point problems // Acta Numerica. — 2005. — Vol. 14. — P. 1–137.
- [32] Elman H. C., Silvester D. J., Wathen A. J. Finite Elements and Fast Iterative Solvers with Applications in Incompressible Fluid Dynamics. — Oxford University Press, 2005.
- [33] Meijerink J. A., van der Vorst H. A. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric  $M$ -matrix // Math. Comput. — 1977. — Jan. — Vol. 31, no. 137. — P. 148–162.
- [34] Eisenstat S. C. Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods. // SIAM J. Sci. Stat. Comp. — 1981. — Vol. 2, no. 1. — P. 1–4.
- [35] Hochbruck M., Jahnke T., Schnaubelt R. Convergence of an ADI splitting for Maxwell’s equations // Numerische Mathematik. — 2015. — Vol. 129, no. 3. — P. 535–561.
- [36] Saad Y., Schultz M. H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. — 1986. — Vol. 7, no. 3. — P. 856–869.

## **А. Матрицы идеально подогнанных слоёв $B_{1,2}$**

В этом разделе описываются матрицы ИПС (идеально подогнанных слоёв)  $B_{1,2}$ . Для простоты изложения положим, что конечно-разностная дискретизация  $\mathbb{Y}$ и ( $Y_{ee}$ ) уравнений Максвелла применяется на сетке из  $n_x \times n_y \times n_z$  ячеек. Заметим, что имеется 6 функций, а именно  $x$ ,  $y$  и  $z$  компоненты обоих полей, каждая из которых дискретизируется и имеет определённое число степеней свободы. Однако дискретизацию по схеме  $\mathbb{Y}$ и можно провести так, чтобы все 6 компонент

имели одинаковое число степеней свободы  $(n_x + 1)(n_y + 1)(n_z + 1)$ . Это достигается добавлением к «коротким» составным компонентам вспомогательных «пустых» степеней свободы. Тогда имеем  $n_1 = n_2 = n/2$  и определим матрицы  $B_{1,2}$  с помощью вспомогательных матриц  $\widehat{B}_{1,2} \in \mathbb{R}^{2n \times n}$ ,

$$\widehat{B}_1^T = \begin{bmatrix} K_1 & 0 & -I & 0 \\ 0 & -K_2^T & 0 & -I \end{bmatrix}, \quad \widehat{B}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma & 0 \\ -\Sigma_* & 0 \\ 0 & -\Sigma_* \end{bmatrix}, \quad (12)$$

где диагональные матрицы  $\Sigma, \Sigma_* \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_1}$  имеют вид

$$\Sigma = \text{diag} [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z], \quad \Sigma_* = \text{diag} [\sigma_y \cdot \sigma_z, \sigma_x \cdot \sigma_z, \sigma_x \cdot \sigma_y].$$

Здесь  $\sigma_{x,y,z}$  — искусственные значения проводимости ИПС для соответствующего направления  $x, y$  или  $z$ , а символ  $\cdot$  обозначает поэлементное умножение. Поскольку  $\sigma_{x,y,z}$  не равны нулю только внутри области ИПС,  $\widehat{B}_{1,2}$  имеют большое число ненужных нулевых строк. Опуская эти строки, получаем матрицы  $B_{1,2}$ .

Заметим также, что

$$\widehat{B}_1^T \widehat{B}_2 = B_1^T B_2 = \begin{bmatrix} \Sigma_* & K_1 \Sigma \\ -K_2^T \Sigma & \Sigma_* \end{bmatrix}, \quad (13)$$

где  $K_{1,2}$  — дискретизированные операторы ротора. Отсюда видим, что только блоки  $(1, 2)$  и  $(2, 1)$  в  $B_1^T B_2$  зависят от шага сетки как  $\sim 1/h$  (в предположении, что  $h = h_x = h_y = h_z$ ). Это наблюдение важно при построении предобусловливателей для решения систем с матрицей  $I + \gamma A + \gamma^2 B_1^T B_2$ .

## В. Расщепление полей для матриц $B_{1,2}$

При построении предобусловливателя расщеплённых полей мы расщепляем матрицы  $\widehat{B}_{1,2}$  по компонентам, соответствующим полям  $H$  and  $E$ , так:

$$\widehat{B}_1 = \widehat{B}_{1,H} + \widehat{B}_{1,E} \quad \widehat{B}_2 = \widehat{B}_{2,H} + \widehat{B}_{2,E},$$

где

$$\widehat{B}_{1,H}^T := \begin{bmatrix} K_1 & 0 & -I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \widehat{B}_{2,H} := \begin{bmatrix} 0 & \Sigma \\ 0 & 0 \\ -\Sigma_* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (14)$$

и  $\widehat{B}_{1,E} := \widehat{B}_1 - \widehat{B}_{1,H}$ ,  $\widehat{B}_{2,E} := \widehat{B}_2 - \widehat{B}_{2,H}$ . После этого матрицы  $B_{1,H}, B_{2,H}, B_{1,E}, B_{2,E}$  получаются из матриц  $\widehat{B}_{1,H}, \widehat{B}_{2,H}, \widehat{B}_{1,E}, \widehat{B}_{2,E}$  соответственно удалением в них нулевых строк.