



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

Препринты ИПМ • Препринт № 75 за 2023 г.



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

М.А. Бочев

Грубо-сеточные поправки в
вычислении действия
матричной экспоненты
подпространством Крылова

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бочев М.А. Грубо-сеточные поправки в вычислении действия матричной экспоненты подпространством Крылова // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 75. 28 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2023-75>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-75>

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

М.А. Бочев

**Грубо-сеточные поправки в вычислении действия
матричной экспоненты подпространством
Крылова**

Москва — 2023

Бочев М.А.

Грубо-сеточные поправки в вычислении действия матричной экспоненты подпространством Крылова

Для повышения эффективности вычисления действий матричной экспоненты и матричной функции ϕ предлагается подход на основе грубо-сеточных поправок (ГСП). Подход предназначен для итерационных методов вычисления матрично-векторных произведений с этими матричными функциями. Он основан на расщеплении вектора, на который умножается матричная функция, на гладкую часть и остаток. При этом вычисления с гладкой частью выполняются на грубой сетке, а вычисления с оставшейся частью — на исходной сетке с менее строгим требованием по точности. Получены оценки ошибки для двухсеточного и многосеточного вариантов предложенного алгоритма ГСП. Представленные численные тесты показывают эффективность алгоритма при его применении в сочетании с методами на основе подпространства Крылова и полиномов Чебышёва.

Ключевые слова: матричная экспонента, матричная функция ϕ , многосеточный метод, методы подпространства Крылова, экспоненциальная невязка, экспоненциальное интегрирование по времени

Mikhail A. Botchev

Coarse grid corrections in Krylov subspace evaluations of the matrix exponential

A coarse grid correction (CGC) approach is proposed to enhance the efficiency of the matrix exponential and ϕ matrix function evaluations. The approach is intended for iterative methods computing the matrix-vector products with these functions. It is based on splitting the vector by which the matrix function is multiplied into a smooth part and a remaining part. The smooth part is then handled on a coarser grid, whereas the computations on the original grid are carried out with a relaxed stopping criterion tolerance. Estimates on the error are derived for the two-grid and multigrid variants of the proposed CGC algorithm. Numerical experiments demonstrate the efficiency of the algorithm, when employed in combination with Krylov subspace and Chebyshev polynomial expansion methods.

Key words: matrix exponential, ϕ matrix function, multigrid, Krylov subspace methods, exponential residual, exponential time integration

Оглавление

1	Введение	3
2	Постановка задачи и методы решения	7
3	Метод грубо-сеточных поправок	10
4	Численные тесты	18
5	Выводы	24

1. Введение

В препринте предлагается подход для использования многосеточного метода по пространству в вычислении матрично-векторных произведений с матричной экспонентой и матричной функцией φ . Подход предназначен для итерационных методов вычисления матрично-векторных произведений с этими матричными функциями, часто встречающимися, например, в экспоненциальных схемах интегрирования по времени уравнений в частных производных [19]. В основе предлагаемого подхода — расщепление вектора, перемножаемого с матричной функцией, на гладкую часть, хорошо описываемую на грубой сетке, и на оставшуюся негладкую часть. Выигрыш по вычислительным затратам достигается за счёт того, что вычисления с гладкой частью выполняются на грубой сетке, а на исходной мелкой сетке вычисления проводятся только с негладкой частью и, как правило, с существенно менее строгим требованием по точности. При этом чем меньше по норме негладкая часть, тем менее строгое требование по точности можно использовать.

Для оценки ошибки, возникающей из-за вычислений на грубой сетке, нами используется концепт экспоненциальной невязки [2; 5; 7]. Для двухсеточного варианта метода показано, что ошибка ограничена членами, норма которых определяется допустимой точностью вычислений на исходной и на грубой сетках, и добавочным членом, норма которого пропорциональна

$$\|(Q\tilde{A} - AQ)\tilde{y}_{\text{ex}}(t)\|.$$

Здесь Q — это оператор продолжения (пролонгации) с грубой на исходную мелкую сетку, A и \tilde{A} — операторы на исходной и грубой сетках, соответственно, а $\tilde{y}_{\text{ex}}(t)$ — точное решение на грубой сетке, т.е. вычисляемая матричная функция, умноженная на гладкую часть исходного вектора на грубой сетке. Таким образом, точность нашего метода ограничена и зависит от того, насколько отличаются решения на исходной и на грубой сетках. Тем не менее, численные эксперименты показывают, что при умеренных требованиях к точности, типичных для решения задач математической физики большой размерности, наш подход может быть очень эффективным. Кроме того, в данной работе предлагается практический метод оценки ошибки $\|(Q\tilde{A} - AQ)\tilde{y}_{\text{ex}}(t)\|$ предлагаемой грубо-сеточной поправки (ГСП).

Многосеточные подходы применяются к решению нестационарных задач с самого момента появления многосеточного метода. Работы Р.П. Федоренко [42; 44], первые статьи, описывающие многосеточный метод так, как он известен сейчас [17, гл. 10.9.2], посвящены решению уравнений Пуассона, возникающих при интегрировании по времени двумерных уравнений гидродинамики несжимаемой жидкости [43]. В настоящее время многосеточные методы являются

важным инструментом эффективной реализации неявных и полунеявных схем интегрирования по времени на параллельных суперкомпьютерах [1; 14; 39; 40].

Идеи многосеточного метода в численном интегрировании по времени применяются по крайней мере с середины восьмидесятых годов [18; 22; 23; 25]. Подход, предложенный в этих работах, по существу основан на методах релаксации формы волны [36; 38], также известных как динамические итерационные методы [26]. Метод, который мы предлагаем здесь, отличается в том смысле, что он разработан специально для итерационных методов вычисления матричных экспоненты и функции φ и не использует подходы релаксации формы волны. Таким образом, проблемы реализации, типичные для методов релаксации формы волны, такие как хранение приближенных решений во времени эффективно и точно, не требуют решения. Это позволяет сделать наш подход довольно простым. Тем не менее одно существенное сходство нашего подхода с подходом [18; 25] заключается в том, что в обоих подходах существенно используется концепт невязки. Обратим внимание также, что многосеточные методы играют ключевую роль в недавнем возрождении параллельных по времени методов, см., например, [13; 21; 29].

Препринт организован следующим образом. В оставшейся части данного раздела кратко излагаются основные идеи многосеточного метода. Следующий раздел посвящён постановке задачи и изложению необходимых сведений о вычислении действий матричной функции φ крыловскими подпространствами. Для конкретности и краткости изложения в препринте мы рассматриваем только вычисление матричной функции φ . Это включает в себя и случай матричной экспоненты, так как в частном случае (для нулевого вектора источника) основное вычисляемое соотношение сводится к вычислению произведения матричной функции на вектор (см. формулу (5) с $g = 0$). В разделе 3 представлен наш алгоритм грубо-сеточных поправок и даётся анализ его двухсеточного и многосеточного вариантов. Численные эксперименты и их результаты обсуждаются в разделе 4. В последнем разделе формулируются выводы и возможные направления дальнейших исследований.

1.1. Основные идеи многосеточного метода. Предлагаемый здесь подход существенно основан на аналогии с многосеточным методом для решения линейных систем. Поэтому начнём изложение нашего подхода с краткого обсуждения того, как простой вариант многосеточного метода, называемый «двухсеточный метод» [17, гл. 10.2], [28, гл. 2.2]), может быть применён для решения линейных систем. Рассмотрим линейную систему

$$Ax = b \tag{1}$$

с заданными невырожденной матрицей $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ и вектором $b \in \mathbb{R}^N$. Предполагается, что система получена дискретизацией некоторой краевой задачи для уравнения в частных производных на определённой сетке и что имеется также дискретизация этой же задачи на грубой сетке, приводящая к системе с невырожденной $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $n < N$. Пусть $Q \in \mathbb{R}^{N \times n}$ — матрица оператора продолжения, интерполирующего приближённое решение $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ на грубой сетке и дающего приближённое решение $Q\tilde{x} \in \mathbb{R}^N$ на исходной мелкой сетке. Тогда Q^T можно рассматривать как обратный оператор, оператор сужения (проектирования), который переводит решение на мелкой сетке на грубую сетку. Заметим, что, вообще говоря, операторы продолжения и сужения могут не быть линейными, в этом случае их действие, разумеется, нельзя представить умножением на матрицы. Для простоты изложения в этом разделе предположим линейность этих операторов.

Предположим, что схема простых итераций

$$x_{\text{next}} = M^{-1}(M - A)x_{\text{current}} + M^{-1}b, \quad (2)$$

где матрица $M \in \mathbb{R}^{N \times N}$ невырождена, сходится к решению системы (1). Обычно M — такая матрица, что линейные системы с ней могут быть решены относительно легко (например, выбор в качестве M диагональной части A даёт в (2) итерации Якоби). Многосеточный метод основан на важном наблюдении, что итерационные схемы вида (2) обычно обладают так называемыми сглаживающими свойствами: «высокочастотные» компоненты невязки $r = b - Au$, $u \approx x$, убывают в ходе итераций гораздо быстрее «низкочастотных» компонент. Для симметричных положительно определённых A (являющихся, как правило, дискретизацией эллиптического оператора в частных производных) низкочастотные компоненты часто определяют как вклады собственных векторов, соответствующих меньшей по величине половине собственных значений, а высокочастотные — как вклады, соответствующие другой половине. Подробно это изложено, например, в [41, гл. 14], [10, соотношение (9.5)], [28, гл. 2.1], или [17, гл. 10.1.1]. Сглаживающий эффект продемонстрирован на рис. 1. Как видно из нижнего правого графика рисунка, сглаживание также наблюдается при последовательном применении операторов сужения и продолжения. Это существенно используется в излагаемом в этой работе методе грубо-сеточных поправок.

Если $x_m \in \mathbb{R}^N$ — приближённое решение системы (1), итерационный пересчёт $x_m \rightarrow x_{m+1}$ в двухсеточном методе можно выполнить, как показано на рис. 2. Основная идея метода состоит в том, что, поскольку невязка \bar{r}_m решения \bar{x}_m сглажена на шаге 1, она хорошо может быть приближена на грубой сетке вектором \tilde{r}_m . Следовательно, можно полагать, что соответствующий вектор поправки $A^{-1}\bar{r}_m$ хорошо может быть приближен проинтерполированной на мелкую сетку грубо-сеточной поправкой $Q\tilde{z}_m = Q\tilde{A}^{-1}\tilde{r}_m$ (шаг 2). Замена

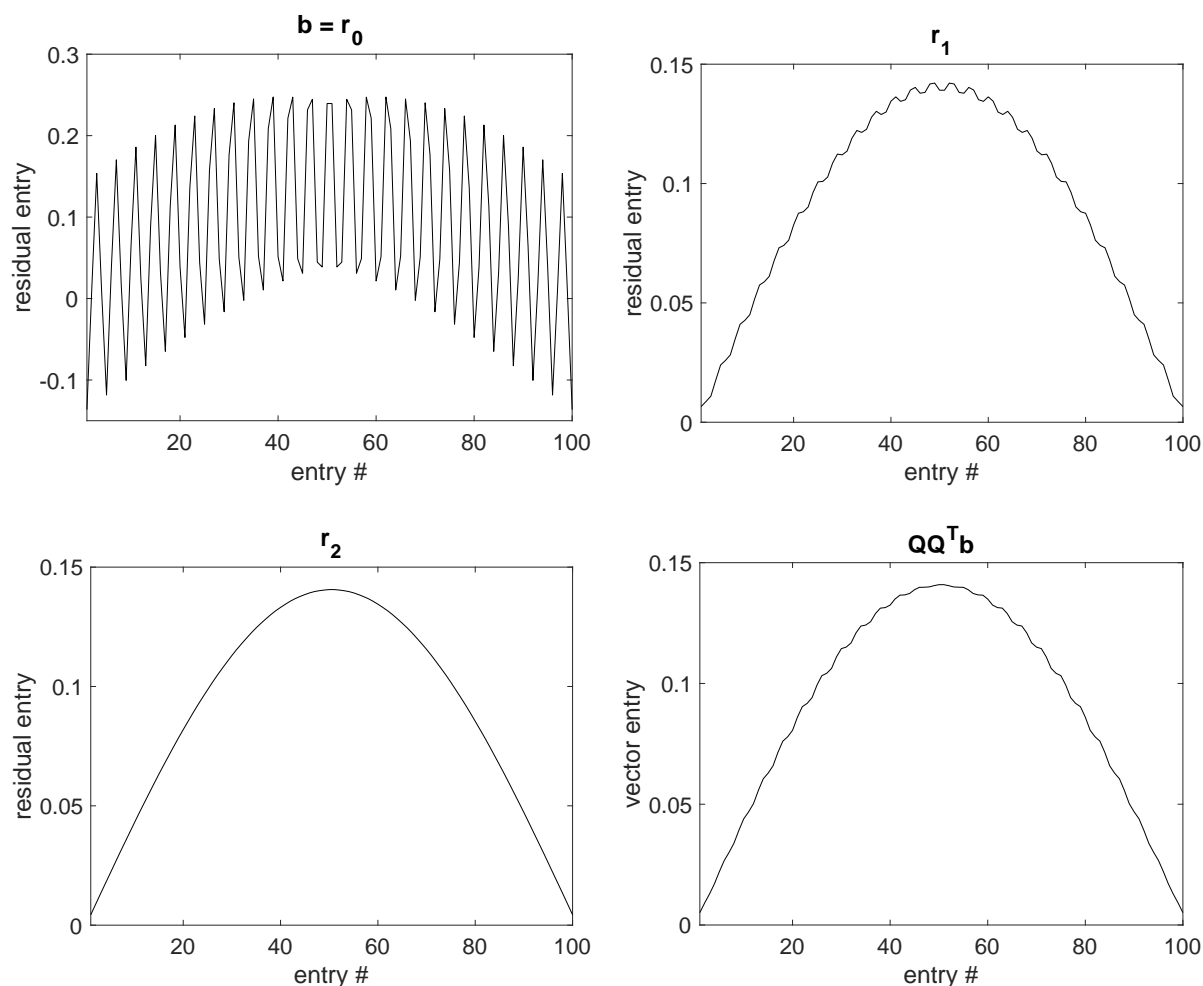


Рис. 1. Сглаживающие свойства классических итерационных схем решения линейных систем $Ax = b$. A — конечно-разностный аналог одномерного оператора Лапласа с однородными краевыми условиями Дирихле в области $(0, 1)$. Используется обычная трёхточечная разностная схема второго порядка на равномерной сетке из $N = 100$ узлов. Берётся вектор начального приближения $x_0 = 0$, так что начальная невязка $r_0 = b$. Вверху слева: элементы вектора правой части b , выбранного как сумма двух нормализованных собственных векторов A , соответствующих наименьшему собственному значению и 51-у по возрастанию собственному значению. Вверху справа и внизу слева: элементы векторов невязки на итерациях 1 и 2. Внизу справа: эффект сглаживания при последовательном применении сужения Q^T и продолжения Q к вектору b , с равномерной грубой сеткой из $n = 50$ узлов

$x_{m+1} := \text{iteration2G}(x_m, A, \tilde{A}, b)$.

По данным $x_m \in \mathbb{R}^N$, $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (аналог A на грубой сетке), $b \in \mathbb{R}^N$, процедура выполняет итерацию $x_m \rightarrow x_{m+1}$ двухсеточного метода.

0. Сформировать $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (грубо-сеточный аналог A) и $\bar{g} := g - Av$.
Расщепление \bar{g} : $\tilde{g} := Q^T \bar{g}$, $\hat{g} := \bar{g} - QQ^T \bar{g}$, $\beta := \|\bar{g}\|$, $\tilde{\beta} := \|\tilde{g}\|$, $\hat{\beta} := \|\hat{g}\|$.
1. Сглаживание: выполнить несколько итераций (2) с начальным приближением x_m . Сохранить результат в векторе \bar{x}_m .
2. Поправка на грубой сетке:
Применить оператор сужения к невязке $\bar{r}_m = b - A\bar{x}_m$, $\tilde{r}_m := Q^T \bar{r}_m \in \mathbb{R}^n$.
Вычислить грубо-сеточную поправку \tilde{z}_m , решив $\tilde{A}\tilde{z}_m = \tilde{r}_m$.
Применить оператор продолжения к поправке, $z_m := Q\tilde{z}_m$.
3. Сглаживание: выполнить несколько итераций (2) с начальным приближением $x_m + z_m$. Сохранить результат в векторе x_{m+1} .

Рис. 2. Итерация двухсеточного метода решения линейных систем $Ax = b$

$A^{-1}\bar{r}_m$ на $Q\tilde{A}^{-1}\tilde{r}_m$ не только уменьшает вычислительные затраты, но и, если решение на грубой сетке вычисляется итерационно, приводит к удалению низкочастотных для исходной сетки компонент. Действительно, эти компоненты являются высокочастотными для грубой сетки и таким образом попадают в зону действия эффекта сглаживания. Заметим, что в алгоритме на рис. 2 сглаживание на шагах 1 и 3 необходимо, потому что только поправки на грубой сетке не дадут сходимости в таком двухсеточном методе, см., например, [17, гл. 10.1.5] или [28, гл. 2.2.3].

2. Постановка задачи и методы решения

Обсудив основные идеи многосеточного метода для решения линейных систем, перейдём к задачам интегрирования по времени и вычислению соответствующих матричных функций. Для заданных $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $v, g \in \mathbb{R}^N$ и $T > 0$ мы решаем задачу Коши

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

где по крайней мере один из векторов v и g не равен нулю. При этом в работе предполагается, что симметричная часть $\frac{1}{2}(A + A^T)$ матрицы A является

неотрицательно определённой, т.е. существует такая константа $\omega \geq 0$, что

$$\frac{(\frac{1}{2}(A + A^T)x, x)}{(x, x)} \geq \omega \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^N, x \neq 0. \quad (4)$$

Здесь и повсюду в работе, если не оговорено иначе, (\cdot, \cdot) обозначает обычное векторное скалярное произведение, а $\|\cdot\|$ — соответствующую векторную или операторную норму. Предположим также, что соотношение (4), вообще говоря, с другой константой $\tilde{\omega} \geq 0$, выполнено и для матрицы \tilde{A} , аналога A на грубой сетке. Нетрудно проверить, что

$$y(t) = v + t\varphi(-tA)(g - Av), \quad t \geq 0, \quad (5)$$

где $\varphi(-tA)$ — матричная функция, определяемая функцией

$$\varphi(z) \equiv \frac{e^z - 1}{z}, \quad z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, \quad \varphi(0) \equiv 1. \quad (6)$$

Заметим, что для $g = 0$ соотношение (5) принимает вид

$$y(t) = \exp(-tA)v, \quad t \geq 0, \quad (5')$$

где $\exp(A)$ — матричная экспонента.

2.1. Методы подпространства Крылова. Один из возможных способов решения задачи Коши (3) — вычисление решения $y(t)$ по формуле (5) обычным (полиномиальным) методом подпространства Крылова (см., например, [15; 31; 37]). Тогда, после выполнения k шагов процесса Арнольди (или Ланцоша) вместе с приближённым решением $y_k(t)$ получим матрицы $V_{k+1} \in \mathbb{R}^{N \times (k+1)}$ и $H_{k+1,k} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$. Столбцы v_1, \dots, v_{k+1} матрицы V_{k+1} ортонормальны и являются базисом подпространства Крылова, при этом

$$v_1 = \frac{1}{\beta} \bar{g}, \quad \beta = \|\bar{g}\|, \quad \bar{g} = g - Av. \quad (7)$$

Матрица $H_{k+1,k}$ — верхняя хессенбергова, и выполняется соотношение

$$AV_k = V_{k+1}H_{k+1,k}, \quad (8)$$

правую часть которого можно переписать как $V_{k+1}H_{k+1,k} = V_k H_{k,k} + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T$, где $H_{k,k}$ — главная $k \times k$ подматрица матрицы $H_{k+1,k}$, $h_{k+1,k}$ — элемент $(k+1, k)$ этой же матрицы, а $e_k = (0, \dots, 0, 1)^T \in \mathbb{R}^k$. Соотношение (8) обычно

называют декомпозицией Арнольди. Получаемое методом подпространства Крылова приближённое решение задачи (3) имеет вид

$$y_k(t) = v + V_k u(t), \quad u(t) = t\varphi(-tH_{k,k})\beta e_1. \quad (9)$$

Качество решения $y_k(t)$ можно оценить по экспоненциальной невязке, определяемой как [2; 5; 7]

$$r_k(t) \equiv -Ay_k(t) - y'_k(t) + g.$$

Невязка $r_k(t)$ легко вычисляется в ходе крыловских итераций. Действительно, несложно проверить, что [3]

$$r_k(t) = -h_{k+1,k}v_{k+1}e_k^T u(t), \quad (10)$$

где $u(t)$ определяется соотношением (9).

Если в ходе итераций оказывается, что хранение $k + 1$ векторов базиса подпространства Крылова или работа с ними затруднительны, то после k итераций можно выполнить так называемый *перезапуск* процесса [8; 9; 16; 20; 34]. Сделать это можно, например, следующим образом. Пусть $y_{\text{ex}}(t)$ — точное решение задачи (3). Тогда ошибка $\epsilon_k(t) = y_{\text{ex}}(t) - y_k(t)$ удовлетворяет задаче Коши

$$\epsilon'_k(t) = -A\epsilon_k(t) + r_k(t), \quad \epsilon_k(0) = 0, \quad t \in [0, T]. \quad (11)$$

Решая (11) следующими k итерациями метода подпространства Крылова, получаем приближённое решение $\tilde{\epsilon}_k(t) \approx \epsilon_k(t)$ этой задачи и считаем поправку

$$y_{2k}(t) = y_k(t) + \tilde{\epsilon}_k(t). \quad (12)$$

Этот способ перезапуска, предложенный и использованный в [2; 5; 7], назовём *невязочным*. Нетрудно проверить, что невязка решения $y_{2k}(t)$ снова, как и в (10), представляет собой произведение скалярной функции от времени и не зависящего от времени вектора.

Другой способ перезапуска основан на наблюдении, что $\|r_k(t)\|$ — монотонно неубывающая функция времени t . Следовательно, поскольку $\|r_k(0)\| = 0$, для любой заданной точности tol можно найти такую $\delta > 0$, что $\|r_k(s)\| \leq \text{tol}$ для всех $s \in [0, \delta]$. После этого мы можем вычислить $y_k(\delta)$ и перезапустить процесс, положив в (3) $v := y_k(\delta)$ и уменьшив временной интервал $t := t - \delta$. Такой перезапуск называется невязочно-временным (НВ) [3; 4]. С другими способами перезапуска можно ознакомиться в [11; 12; 24].

Из соотношения (11) следует, что невязку $r_k(t)$ можно рассматривать как *обратную ошибку* в смысле обратного анализа ошибок для приближённого решения $y_k(t)$: невязка представляет собой такое возмущение задачи, что $y_k(t)$ — точное решение возмущённой задачи. Поэтому, используя задачу Коши (11), можно получить следующую оценку ошибки.

Лемма 1. [2] Пусть для $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ выполняется (4), и пусть $y_{\text{ex}}(t)$ — точное решение задачи (3). Если $r_k(t)$ — невязка приближённого решения $y_k(t) \approx y_{\text{ex}}(t)$, то ошибку $\epsilon_k(t) = y_{\text{ex}}(t) - y_k(t)$ можно оценить по норме для любого $t \geq 0$ как

$$\|\epsilon_k(t)\| \leq t\varphi(-t\omega) \max_{s \in [0, t]} \|r_k(s)\|. \quad (13)$$

Заметим, что для любого $\omega \geq 0$ и любого $t \geq 0$ выполняется

$$t\varphi(-t\omega) = \begin{cases} \frac{1-e^{-t\omega}}{\omega} \leq \min\{t, \frac{1}{\omega}\} \leq t, & \text{для } \omega > 0, \\ t, & \text{для } \omega = 0. \end{cases} \quad (14)$$

2.2. Разложение в ряд по многочленам Чебышёва. Другим важным классом итерационных методов вычисления действия матричной экспоненты и подобных ей функций являются методы, основанные на разложении в ряд по многочленам Чебышёва (см., например, [35], [30, гл. 3.2.3]). Такие методы обычно применяют для симметричных и кососимметричных матриц. Для матрицы tA , преобразованной так, что её собственные числа лежат на отрезке $[-1, 1]$, разложение в ряд по многочленам Чебышёва имеет вид

$$y(t) = \exp(-tA)v \approx y_k(t) = P_k(-tA)v = \left[\sum_{j=1}^k c_j T_j(-tA) + \frac{c_0}{2} I \right] v. \quad (15)$$

Это разложение можно вычислять рекурсивно с помощью алгоритма Кленшо (the Clenshaw algorithm) [6]. В работе [2] мы модифицировали этот алгоритм так, чтобы вычислялись также и рекурсии для невязки $r_k(t) = -Ay_k(t) - y'_k(t)$. Тогда итерационный процесс вычисления разложения (15) можно останавливать, как только норма невязки достаточно мала (подробности можно найти в [2, разд. 3]). Так же, как и методы подпространства Крылова, эти итерации с критерием остановки по малости нормы невязки можно применять в сочетании с методом грубо-сеточных поправок, представленным в следующем разделе. Заметим, что поскольку наш алгоритм, использующий многочлены Чебышёва, вычисляет действие матричной экспоненты, он может быть применён для решения задачи (3) в случае $g = 0$, см. (5').

3. Метод грубо-сеточных поправок

3.1. Грубо-сеточные поправки, двухсеточный вариант. Перейдём к изложению нашего метода грубо-сеточных поправок (ГСП). Мы предполагаем, что A получена дискретизацией оператора в частных производных на некоторой сетке и что имеется также и другая, грубая, сетка, для которой получена матрица

$y_{\text{mg}}(t) := \text{ГСП-2С}(A, v, g, t, \text{tol})$.

По данным $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $v, g \in \mathbb{R}^N$, $t > 0$ и заданной требуемой точности tol алгоритм вычисляет $y_{\text{mg}}(t) \approx v + t\varphi(-tA)(g - Av)$, для ошибки справедлива оценка утверждения 1.

0. Сформировать $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (грубо-сеточный аналог A) и $\bar{g} := g - Av$.

Расщепление \bar{g} : $\tilde{g} := Q^T \bar{g}$, $\hat{g} := \bar{g} - QQ^T \bar{g}$, $\beta := \|\bar{g}\|$, $\tilde{\beta} := \|\tilde{g}\|$, $\hat{\beta} := \|\hat{g}\|$.

1. Вычислить $\tilde{y}(t) \approx t\varphi(-t\tilde{A})\tilde{g}$ с точностью $\widetilde{\text{tol}} := (\beta/\tilde{\beta}) \text{tol}$ (грубая сетка).

2. Вычислить $\hat{y}(t) \approx t\varphi(-tA)\hat{g}$ с точностью $\widehat{\text{tol}} := (\beta/\hat{\beta}) \text{tol}$ (мелкая сетка).

3. Сформировать искомое решение $y_{\text{mg}}(t) := v + \hat{y}(t) + Q\tilde{y}(t)$.

Рис. 3. Алгоритм ГСП-2С (грубо-сеточные поправки, двухсеточный вариант)

\tilde{A} , аналог матрицы A . Напомним, что для этих двух сеток Q и Q^T — матрицы операторов продолжения и сужения, соответственно (для простоты изложения предполагается, что эти операторы линейные). Искомое решение $y(t)$ может быть вычислено как действие (т.е. произведение на вектор) матричной функции φ по формуле (5):

$$y(t) := v + t\varphi(-tA)\bar{g},$$

где $\bar{g} = g - Av$. Наш подход основан на расщеплении вектора \bar{g} на часть, которая хорошо может быть представлена на грубой сетке, т.е. $QQ^T \bar{g}$, и оставшуюся часть $\hat{g} = \bar{g} - QQ^T \bar{g}$. При этом действия функции φ на векторах $QQ^T \bar{g}$ и \hat{g} вычисляются отдельно. Поскольку $QQ^T \bar{g}$ — гладкий вектор, мы предполагаем, что действие матричной функции $t\varphi(-tA)QQ^T \bar{g}$ можно заменить его грубо-сеточным аналогом $tQ\varphi(-t\tilde{A})Q^T \bar{g}$, проинтерполированным с грубой сетки. Оставшаяся негладкая компонента \hat{g} вычисляется на исходной мелкой сетке. Если величина $\|\hat{g}\|/\|\bar{g}\|$ мала, то действие $t\varphi(-tA)\hat{g}$ может быть вычислено с ослабленным требованием по точности.

Алгоритм метода ГСП приведён на рис. 3. Предполагается, что алгоритмы вычисления действий матричной функции φ на шаге 1 и шаге 2 дают такие приближённые решения $\tilde{y}(t)$ и $\hat{y}(t)$, соответственно, что их невязки

$$\tilde{r}(t) \equiv -\tilde{A}\tilde{y}(t) - \tilde{y}'(t) + \tilde{g}, \quad \hat{r}(t) \equiv -A\hat{y}(t) - \hat{y}'(t) + \hat{g} \quad (16)$$

удовлетворяют, соответственно, соотношениям

$$\max_{s \in [0, t]} \|\tilde{r}(s)\| \leq \tilde{\beta} \widetilde{\text{tol}}, \quad \max_{s \in [0, t]} \|\hat{r}(s)\| \leq \hat{\beta} \widehat{\text{tol}}. \quad (17)$$

Утверждение, приводимое ниже, показывает структуру ошибки метода ГСП. Как мы увидим, ошибка содержит член, который не может быть сделан

произвольно малым за счёт выбора допустимой точности. Таким образом, точность метода ограничена и зависит от того, насколько хорошо гладкая часть решения может быть аппроксимирована продолжением решения с грубой сетки.

Утверждение 1. Пусть $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ и её грубо-сеточный аналог $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ удовлетворяют соотношению (4), а $y_{\text{ex}}(t)$ — точное решение задачи Коши (3). Тогда для решения $y_{\text{mg}}(t)$ двухсеточного метода ГСП (см. рис. 3) выполняется, для любого $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} & \|y_{\text{ex}}(t) - y_{\text{mg}}(t)\| \\ & \leq t \left\| (\varphi(-tA)Q - Q\varphi(-t\tilde{A}))\tilde{g} \right\| + t\varphi(-t\bar{\omega})(\|Q\|+1)\beta \text{tol} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\leq (t\varphi(-t\bar{\omega}))^2 \|Q\tilde{A} - AQ\| \|\tilde{g}\| + t\varphi(-t\bar{\omega})(\|Q\|+1)\beta \text{tol}, \quad (19)$$

где $\bar{\omega} = \min\{\omega, \tilde{\omega}\}$, а tol — заданная требуемая точность.

Доказательство. Не нарушая общности, для простоты изложения предположим, что в (3) $v = 0$, а $g \neq 0$. Введём зависящие от параметра t матрицы $S_t \equiv t\varphi(-tA)$ и $\tilde{S}_t \equiv t\varphi(-t\tilde{A})$. Поскольку $g = QQ^T g + (I - QQ^T)g = Q\tilde{g} + \hat{g}$, для точного решения $y_{\text{ex}}(t)$ задачи (3) выполняется расщепление

$$y_{\text{ex}}(t) = S_t g = S_t Q\tilde{g} + S_t \hat{g}.$$

Учитывая, что приближённое решение является точным решением возмущённой задачи, мы можем записать

$$y_{\text{mg}}(t) = Q\tilde{y}(t) + \hat{y}(t) = Q\tilde{S}_t(\tilde{g} - \tilde{r}(t)) + S_t(\hat{g} - \hat{r}(t)),$$

где $\tilde{r}(t)$ и $\hat{r}(t)$ — невязки приближённых решений $\tilde{y}(t)$ and $\hat{y}(t)$, соответственно, см. (16). Теперь оценим

$$\begin{aligned} \|y_{\text{ex}}(t) - y_{\text{mg}}(t)\| &= \|S_t Q\tilde{g} + S_t \hat{g} - Q\tilde{S}_t(\tilde{g} - \tilde{r}(t)) - S_t(\hat{g} - \hat{r}(t))\| \\ &= \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t\tilde{g} + Q\tilde{S}_t\tilde{r}(t) + S_t\hat{r}(t)\| \\ &\leq \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t\tilde{g}\| + \|Q\tilde{S}_t\tilde{r}(t)\| + \|S_t\hat{r}(t)\| \\ &\leq \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t\tilde{g}\| + t\varphi(-t\bar{\omega}) \|Q\| \max_{s \in [0, t]} \|\tilde{r}(s)\| \\ & \quad + t\varphi(-t\bar{\omega}) \max_{s \in [0, t]} \|\hat{r}(s)\| \\ &\leq \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t\tilde{g}\| + t\varphi(-t\bar{\omega}) (\|Q\| \tilde{\beta} \widehat{\text{tol}} + \hat{\beta} \widehat{\text{tol}}) \\ &= \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t\tilde{g}\| + t\varphi(-t\bar{\omega}) (\|Q\|+1)\beta \text{tol}, \end{aligned} \quad (20)$$

где мы учитываем невязочную оценку ошибки (13), остановочные критерии (17) и выбор допустимых точностей $\widehat{\text{tol}}$ и $\tilde{\beta} \widehat{\text{tol}}$ в двухсеточном алгоритме ГСП (см. рис. 3). Как видим, последнее полученное неравенство — это оценка ошибки (18).

Заметим, что член $\tilde{S}_t \tilde{g}$ из оценки ошибки является точным решением задачи Коши на грубой сетке $\tilde{y}'(t) = -\tilde{A}\tilde{y}(t) + \tilde{g}$, $\tilde{y}(0) = 0$, и обозначим $\tilde{y}_{\text{ex}}(t) \equiv \tilde{S}_t \tilde{g}$. Тогда продолжение этого грубо-сеточного решения $Q\tilde{S}_t \tilde{g} = Q\tilde{y}_{\text{ex}}(t)$ можно рассматривать как точное решение $S_t(Q\tilde{g} - r_{\text{cg}}(t))$ возмущённой задачи Коши $y'(t) = -Ay(t) + Q\tilde{g} - r_{\text{cg}}(t)$, $y(0) = 0$, где $r_{\text{cg}}(t)$ — невязка решения $Q\tilde{y}_{\text{ex}}(t)$ по отношению к задаче Коши

$$y'(t) = -Ay(t) + Q\tilde{g}, \quad y(0) = 0.$$

Поскольку $\tilde{y}_{\text{ex}}(t)$, по определению, удовлетворяет уравнению $\tilde{y}'_{\text{ex}}(t) = -\tilde{A}\tilde{y}_{\text{ex}}(t) + \tilde{g}$, мы получаем, для $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} r_{\text{cg}}(t) &\equiv -AQ\tilde{y}_{\text{ex}}(t) - Q\tilde{y}'_{\text{ex}}(t) + Q\tilde{g} = -AQ\tilde{y}_{\text{ex}}(t) - Q(-\tilde{A}\tilde{y}_{\text{ex}}(t) + \tilde{g}) + Q\tilde{g} = \\ &= -AQ\tilde{y}_{\text{ex}}(t) + Q\tilde{A}\tilde{y}_{\text{ex}}(t) = (Q\tilde{A} - AQ)\tilde{y}_{\text{ex}}(t) = (Q\tilde{A} - AQ)\tilde{S}_t \tilde{g}, \end{aligned}$$

так что

$$\begin{aligned} \|S_t Q\tilde{g} - Q\tilde{S}_t \tilde{g}\| &= \|S_t Q\tilde{g} - S_t(Q\tilde{g} - r_{\text{cg}}(t))\| = \|S_t r_{\text{cg}}(t)\| \\ &\leq t\varphi(-t\omega) \max_{s \in [0, t]} \|r_{\text{cg}}(s)\| \leq t\varphi(-t\omega) \|Q\tilde{A} - AQ\| \max_{s \in [0, t]} \|\tilde{S}_s \tilde{g}\| \\ &\leq t\varphi(-t\omega) \|Q\tilde{A} - AQ\| t\varphi(-t\bar{\omega}) \|\tilde{g}\| \\ &\leq (t\varphi(-t\bar{\omega}))^2 \|Q\tilde{A} - AQ\| \|\tilde{g}\|, \end{aligned} \tag{21}$$

где для оценки $\|S_t r_{\text{cg}}(t)\|$ и $\|\tilde{S}_s \tilde{g}\|$ использовано соотношение (13). Подставляя последнее неравенство в (20), получаем (19). \square

Замечание 1. В экспоненциальных схемах интегрирования по времени [19] действия матричных экспоненты и функции φ обычно вычисляются для $t := \Delta t$, где Δt — шаг по времени. В этом случае, как показывает оценка (19), грубо-сеточный член ошибки имеет второй порядок точности, т.е.

$$(\Delta t\varphi(-\Delta t\bar{\omega}))^2 \|Q\tilde{A} - AQ\| \|\tilde{g}\| = O(\Delta t)^2. \tag{22}$$

Это означает, что ГСП метод может быть полезным в экспоненциальных схемах интегрирования.

Поскольку точность метода ГСП ограничена, на практике важно уметь оценивать достижимую точность. С помощью утверждения 1 и оценки (21) получим следующую легко вычисляемую приближённую оценку грубо-сеточного члена ошибки:

$$\begin{aligned} t\|\varphi(-tA)Q\tilde{g} - Q\varphi(-t\tilde{A})\tilde{g}\| &\leq t\varphi(-t\omega) \max_{s \in [0, t]} \|r_{\text{cg}}(s)\| \\ &\approx t\varphi(-t\omega) \|r_{\text{cg}}(t)\| = t\varphi(-t\omega) \|(Q\tilde{A} - AQ)\tilde{y}_{\text{ex}}(t)\| \\ &\approx t\varphi(-t\omega) \|(Q\tilde{A} - AQ)\tilde{y}(t)\|. \end{aligned} \tag{23}$$

$y_{\text{mg}}(t) := \text{ГСП-МС}(A, v, g, t, \text{tol})$.

По данным $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $v, g \in \mathbb{R}^N$, $t > 0$ и заданной требуемой точности tol алгоритм вычисляет $y_{\text{mg}}(t) \approx v + t\varphi(-tA)(g - Av)$, для ошибки справедлива оценка утверждения 2.

0. Сформировать $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (грубо-сеточный аналог A) и $\bar{g} := g - Av$.

Расщепление \bar{g} : $\tilde{g} := Q^T \bar{g}$, $\hat{g} := \bar{g} - QQ^T \bar{g}$, $\beta := \|\bar{g}\|$, $\tilde{\beta} := \|\tilde{g}\|$, $\hat{\beta} := \|\hat{g}\|$.

1. Если сетка достаточно грубая, то

вычислить $\tilde{y}(t) \approx t\varphi(-t\tilde{A})\tilde{g}$ с точностью $\widetilde{\text{tol}} := (\beta/\tilde{\beta}) \text{tol}$

иначе

рекурсия: $\tilde{y}(t) := \text{ГСП-МС}(\tilde{A}, v = 0, \tilde{g}, t, \widetilde{\text{tol}} = (\beta/\tilde{\beta}) \text{tol})$.

2. Вычислить $\hat{y}(t) \approx t\varphi(-tA)\hat{g}$ с точностью $\widehat{\text{tol}} := (\beta/\hat{\beta}) \text{tol}$ (мелкая сетка).

3. Сформировать искомое решение $y_{\text{mg}}(t) := v + \hat{y}(t) + Q\tilde{y}(t)$.

Рис. 4. Алгоритм ГСП-МС (грубо-сеточные поправки, многосеточный вариант)

В алгоритме метода (рис. 3) эту оценку удобно вычислять после выполнения шага 1, как только известна $\tilde{y}(t)$. Если используется метод подпространства Крылова, то для оценки величины ω можно воспользоваться числами Ритца (т.е. собственными числами матрицы $H_{k,k}$, являющимися приближением собственных чисел A и \tilde{A}).

3.2. Грубо-сеточные поправки, многосеточный вариант. При больших размерах сетках задачу на грубой сетке (т.е. $\tilde{y}(t) \approx t\varphi(-t\tilde{A})\tilde{g}$ на шаге 1 алгоритма на рис. 3) разумно решать, снова применяя грубо-сеточную поправку. При этом получаем рекурсивный многосеточный алгоритм, представленный на рис. 4. Этот алгоритм отличается от двухсеточного алгоритма (рис. 3) только шагом 1. Предположим, что алгоритм использует последовательность из m сеток, пронумерованных так, что сетка 1 — исходная, наиболее мелкая, а сетка m — самая грубая. Если Q_j — линейный оператор продолжения с сетки $j + 1$ на сетку j , а Q_j^T — соответствующий оператор сужения, то исходный вектор $\tilde{g}_1 := \bar{g}$ последо-

вательно расщепляется так:

$$\begin{aligned}
 \text{сетка 1:} \quad & \tilde{g}_1 = Q_1 \tilde{g}_2 + \hat{g}_1, & \text{где} \quad & \tilde{g}_2 := Q_1^T \bar{g}, \quad \hat{g}_1 := \bar{g} - Q_1 \tilde{g}_2, \\
 \text{сетка 2:} \quad & \tilde{g}_2 = Q_2 \tilde{g}_3 + \hat{g}_2, & \text{где} \quad & \tilde{g}_3 := Q_2^T \tilde{g}_2, \quad \hat{g}_2 := \tilde{g}_2 - Q_2 \tilde{g}_3, \\
 \dots & & & \\
 \text{сетка } m-1: \quad & \tilde{g}_{m-1} = Q_{m-1} \tilde{g}_m + \hat{g}_{m-1}, & \text{где} \quad & \tilde{g}_m := Q_{m-1}^T \tilde{g}_{m-1}, \\
 & & & \hat{g}_{m-1} := \tilde{g}_{m-1} - Q_{m-1} \tilde{g}_m.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Заметим, что в таком рекурсивном алгоритме действие матричной функции φ вычисляется один раз на самой грубой сетке m (шаг 1 алгоритма на рис. 4) и по разу на сетках $1, \dots, m-1$ (шаг 2 алгоритма).

Утверждение 2. Пусть многосеточный рекурсивный метод ГСП (см. рис. 4) применяется на последовательности сеток $j = 1, \dots, m$, упорядоченных от исходной самой мелкой ($j = 1$) до самой грубой ($j = m$). Пусть каждая из матриц $A_j \in \mathbb{R}^{n_j \times n_j}$, $j = 1, \dots, m$, полученная дискретизацией на сетке j исходного оператора в частных производных, удовлетворяет соотношению (4) с $\omega = \omega_j$, и пусть $\bar{\omega} = \min_{j=1, \dots, m} \omega_j$. Кроме того, пусть Q_j , $j = 1, \dots, m-1$, — матрицы линейного оператора продолжения с сетки $j+1$ на сетку j , а $y_{\text{ex}}(t)$ — точное решение задачи Коши (3). Если допустимые требуемые точности для вычисления матрично-векторных произведений с матричной функцией φ (шаги 1 и 2 алгоритма) выбраны так, что

$$\max_{s \in [0, t]} \|\tilde{r}_m(s)\| \leq \beta \text{tol}, \quad \max_{s \in [0, t]} \|\hat{r}_j(s)\| \leq \beta \text{tol}, \quad j = 1, \dots, m-1, \tag{25}$$

где $\beta = \|\bar{g}\|$, а $\tilde{r}_j(s)$, $\hat{r}_j(t)$ — невязки на сетке j вычислений φ на шагах 1 и 2 алгоритма, соответственно, то для решения $y_{\text{mg}}(t)$ многосеточного метода ГСП выполняется, для любого $t \geq 0$,

$$\begin{aligned}
 \|y_{\text{ex}}(t) - y_{\text{mg}}(t)\| &\leq \sum_{j=1}^{m-1} \prod_{i=1}^{j-1} \|Q_i\| t \|(\varphi(-tA_j)Q_j - Q_j\varphi(-tA_{j+1})) \tilde{g}_{j+1}\| \\
 &+ t\varphi(-t\bar{\omega})\beta \text{tol} \sum_{j=1}^m \prod_{i=1}^{j-1} \|Q_i\|.
 \end{aligned} \tag{26}$$

Доказательство. Пусть $S_t^{(j)}$ — оператор решения на сетке j , т.е. $S_t^{(j)} \equiv t\varphi(-tA_j)$, и пусть $G_t^{(j)} \equiv S_t^{(j)}Q_j - Q_jS_t^{(j+1)}$, $j = 1, \dots, m-1$. Далее, пусть $e_j(t) \equiv y_{\text{ex}}^{(j)}(t) - y_{\text{mg}}^{(j)}(t)$ — ошибка многосеточного метода ГСП на сетке $j = 1, \dots, m-1$, где

$$y_{\text{ex}}^{(j)}(t) \equiv S_t^{(j)} \tilde{g}_j,$$

$y_{\text{mg}}^{(j)}(t)$ — решение метода на сетке j , а вектор \tilde{g}_j определён в (24). Тогда решения $y_{\text{mg}}^{(j)}(t)$ на сетке j , $j = 1, \dots, m - 1$, удовлетворяют рекурсии

$$y_{\text{mg}}^{(j)}(t) = Q_j y_{\text{mg}}^{(j+1)}(t) + S_t^{(j)}(\hat{g}_j - \hat{r}_j(t)), \quad (27)$$

где $\hat{r}_j(t)$ — невязка вычисления φ на шаге 2 алгоритма (рис. 4). Заметим, что ошибку $e_{m-1}(t)$ можно оценить так же, как и в двухсеточном методе ГСП (см. доказательство утв. 1). Действительно,

$$\begin{aligned} y_{\text{ex}}^{(m-1)}(t) &= S_t^{(m-1)} Q_{m-1} \tilde{g}_m + S_t^{(m-1)} \hat{g}_{m-1}, \\ y_{\text{mg}}^{(m-1)}(t) &= Q_{m-1} S_t^{(m)}(\tilde{g}_m - \tilde{r}_m(t)) + S_t^{(m-1)}(\hat{g}_{m-1} - \hat{r}_{m-1}(t)), \end{aligned}$$

где $\tilde{r}_m(t)$ и $\hat{r}_{m-1}(t)$ — невязки вычислений на шаге 1 (ветка «то» условного оператора) и шаге 2 алгоритма, соответственно. Следовательно,

$$\begin{aligned} \|e_{m-1}(t)\| &\leq \|S_t^{(m-1)} Q_{m-1} \tilde{g}_m - Q_{m-1} S_t^{(m)} \tilde{g}_m\| \\ &\quad + \|Q_{m-1} S_t^{(m)} \tilde{r}_m(t)\| + \|S_t^{(m-1)} \hat{r}_{m-1}(t)\| \\ &\leq \|(S_t^{(m-1)} Q_{m-1} - Q_{m-1} S_t^{(m)}) \tilde{g}_m\| \\ &\quad + t\varphi(-t\bar{\omega})(\|Q_{m-1}\| + 1)\beta \text{tol}. \end{aligned} \quad (28)$$

Подставляя $y_{\text{mg}}^{(j+1)}(t) = y_{\text{ex}}^{(j+1)}(t) - e_{j+1}(t)$ в (27), получим для ошибок $e_j(t)$, $j = 1, \dots, m - 2$, соотношение

$$e_j(t) = S_t^{(j)} Q_j \tilde{g}_{j+1} + S_t^{(j)} \hat{g}_j - Q_j (S_t^{(j+1)} \tilde{g}_{j+1} - e_{j+1}(t)) - S_t^{(j)}(\hat{g}_j - \hat{r}_j(t)).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \|e_j(t)\| &= \|(S_t^{(j)} Q_j - Q_j S_t^{(j+1)}) \tilde{g}_{j+1} + Q_j e_{j+1}(t) + S_t^{(j)}(\hat{g}_j - \hat{r}_j(t))\| \\ &\leq \|G_t^{(j)} \tilde{g}_{j+1}\| + \|Q_j\| \|e_{j+1}(t)\| + \|S_t^{(j)} \hat{r}_j(t)\| \\ &\leq \|G_t^{(j)} \tilde{g}_{j+1}\| + \|Q_j\| \|e_{j+1}(t)\| + t\varphi(-t\bar{\omega})\beta \text{tol}. \end{aligned} \quad (29)$$

Применяя эту оценку рекурсивно к $\|e_1(t)\|, \dots, \|e_{m-1}(t)\|$ и учитывая (28), получаем (26). \square

Утверждение 2 означает, что при условии ограниченности норм операторов продолжения $\|Q_j\|$ ошибка многосеточного метода ГСП определяется прежде всего суммой ошибок грубо-сеточных поправок

$$t \|(\varphi(-tA_j)Q_j - Q_j\varphi(-tA_{j+1})) \tilde{g}_{j+1}\|, \quad j = 1, \dots, m - 1.$$

Поэтому, чтобы оценить точность многосеточного метода ГСП на практике, можно использовать двухсеточную оценку (23) последовательно, каждый раз, когда выполняется грубо-сеточная поправка. Тогда сумма этих оценок будет оценкой ошибки многосеточного метода ГСП.

3.3. О возможности построения полного многосеточного цикла. Естественно поставить вопрос о том, можно ли развить предложенный метод ГСП до полноценного многосеточного V- или W-цикла (см. двухсеточный метод на рис. 2). К сожалению, это оказывается более сложным, чем может показаться на первый взгляд. Например, предположим, что после k итераций метода подпространства Крылова (9) получено приближённое решение $y_k(t)$ с невязкой $r_k(t)$, см. (10). Тогда поправку к решению $y_k(t)$ можно получить решением задачи Коши (11) на более грубой сетке

$$\begin{aligned} \text{сужение и ГСП: } \quad \tilde{\epsilon}'_k(t) &= -\tilde{A}\tilde{\epsilon}_k(t) + Q^T r_k(t), \quad \tilde{\epsilon}_k(0) = 0, \\ \text{продолжение и пересчёт: } \quad y_{2k}(t) &= y_k(t) + Q\tilde{\epsilon}_k(t). \end{aligned} \quad (30)$$

Такая конструкция оказывается не очень хорошей по двум причинам. Во-первых, базисные вектора подпространства Крылова v_k обычно становятся всё менее гладкими с ростом k . Поэтому, учитывая, что $r_k(t) \parallel v_{k+1}$, мы видим, что крыловские итерации являются плохим сглаживателем. Во-вторых, невязка $r_{2k}(t)$ решения $y_{2k}(t)$ теряет компактный вид (10). Это является решающим фактором, делающим всю конструкцию малопривлекательной на практике. Действительно, чтобы получить представление невязки $r_{2k}(t)$, которое могло бы быть практически использовано, вероятно, потребовались бы специальные процедуры семплирования и/или параметризации $y_{2k}(t)$ и $r_{2k}(t)$.

В качестве инструмента расширения нашего подхода ГСП до полного многосеточного цикла можно было бы рассматривать итерации релаксации формы волны (также известные как динамические итерации или итерации Пикара–Линделефа), см., например, [2, разд. 5.1]. К сожалению, та же проблема компактного, удобного для применения представления невязки возникает и здесь.

3.4. Вычисление действий матричных функций φ_k . Матричные функции φ_k , определяемые [19, формула (2.10)] как

$$\varphi_0(z) = \exp(z), \quad \varphi_j(z) = \int_0^1 e^{(1-\theta)z} \frac{\theta^{j-1}}{(j-1)!} d\theta, \quad j \geq 1,$$

являются важным инструментом в экспоненциальных схемах интегрирования по времени [19]. Эти функции удовлетворяют рекурсии $\varphi_{j+1}(z) = (\varphi_j(z) - \varphi_j(0))/z$, $j \geq 0$, и нетрудно убедиться, что заданная таким образом функция φ_1 совпадает с функцией φ , определённой выше в (6). Наш метод ГСП можно применить к вычислению матрично-векторных произведений с $\varphi_j(-tA)$ с помощью подхода, представленный в [32, теор. 1] и [27, теор. 2.1]. Действительно, пусть для определённого j , $1 \leq j \leq p$, и данного вектора $g \in \mathbb{R}^N$ требуется вычислить $\varphi_j(-tA)g$. Предлагаемый в [27; 32] подход позволяет заменить вычисление

действия $\varphi_j(-tA)$ на вектор вычислением действия матричной экспоненты расширенной $(N + p) \times (N + p)$ матрицы

$$\widehat{A} = \begin{bmatrix} A & -W \\ 0 & -J \end{bmatrix}, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I_{p-1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times p},$$

где I_{p-1} — единичная $(p-1) \times (p-1)$ матрица, а матрица $W \in \mathbb{R}^{N \times p}$ имеет своим первым столбцом вектор g и остальные элементы нулевые. Тогда справедливо соотношение [27, с. 491]

$$\varphi_j(-tA)g = \frac{1}{t^j} \left[\exp(-t\widehat{A})e_{N+j} \right]_{1:N}, \quad 1 \leq j \leq p, \quad t > 0, \quad (31)$$

где вектор $[x]_{1:N}$ составлен из первых N элементов x , а $e_{N+j} \in \mathbb{R}^{N+p}$ — это $(N + j)$ -й вектор канонического базиса. Как видно из (31), мы можем применить наш метод ГСП для вычисления действий $\varphi_j(-tA)g$, используя его для вычисления $\exp(-t\widehat{A})e_{N+j}$. Заметим, что такой приём имеет тот недостаток, что возможная (косо)симметрия матрицы A теряется в расширенной матрице \widehat{A} , так что процесс Ланцоша должен быть заменён более затратным процессом Арнольди. Поэтому, если требуются действия только матричной функции $\varphi = \varphi_1$, рекомендуется вычислять φ напрямую, как описано в разделе 2.1 данного препринта, не прибегая к (31).

4. Численные тесты

В качестве итерационных схем вычисления φ , на которых тестируется наш подход ГСП, возьмём метод `phiRT` и чебышёвскую полиномиальную схему, описанные, соответственно, в [3] и [2]. Первая из них — это описанный в разделе 2.1 метод подпространства Крылова на основе полиномиального процесса Ланцоша с невязочным остановочным критерием (см. (16),(17)) и невязочно-временным перезапуском [3; 4]. Вторая схема, на которой тестируется подход ГСП, — это представленная в разделе 2.2 модификация рекурсивного алгоритма Кленшо [6] с встроенным контролем невязки [2]. Вообще говоря, для нашего подхода ГСП не столь важно, в сочетании с какой итерационной схемой он применяется. Тем не менее, удобно использовать схему с невязочным остановочным критерием, так чтобы выполнялись условия на невязку утверждений 1 и 2.

Во всех тестах максимальная размерность подпространства Крылова задавалась равной 30, что означает выполнение перезапуска каждые 30 крыловских итераций. Приводимые ниже значения ошибки вычислялись как

$$\frac{\|y_{\text{mg}}(T) - \tilde{y}_{\text{ref}}(T)\|}{\|\tilde{y}_{\text{ref}}(T)\|},$$

где $\tilde{y}_{\text{ref}}(T)$ — референтное решение, вычисленное процедурой `phiV` пакета EX-ROKIT [32]. Заметим, что референтное решение получено на такой же сетке по пространству, так что ошибка, вычисленная таким образом, отражает прежде всего ошибки интегрирования по времени.

Все представленные здесь эксперименты выполнены в матлабе на компьютере, оснащённом ОС Линукс, шестью процессорами с частотой 2.80 ГГц и 16 Гб оперативной памяти. Для реализации операторов сужения и продолжения во всех тестах использовалась интерполяция на сплайнах, доступная в матлабе в виде функций `interp1` и `interpN`. В случае, если используется линейная интерполяция, получаются схожие, но менее точные результаты.

4.1. Одномерное уравнение теплопроводности. Представим результаты для одномерного уравнения теплопроводности

$$u_t = u_{xx} + g(x), \quad u(x, 0) = 1, \quad g(x) = e^{-500(x-0.5)^2}, \quad x \in (0, 1), \quad (32)$$

с периодическими краевыми условиями. Обычная трёхточечная разностная схема второго порядка по пространству на равномерной сетке $x_i = i/(N + 1)$, $i = 1, \dots, N$, приводит к задаче (3), где A — дискретизация лапласиана $\partial^2/\partial x^2$ с периодическими краевыми условиями.

Задавалась допустимая точность $\text{tol} = 10^{-8}$ и бралась длина интервала по времени $T = 0.01$, для которой $T\|A\|_1 > 42\,000$ на сетке $N = 1024$ и $T\|A\|_1 > 165\,000$ на сетке $N = 2048$.

Результаты тестов представлены в таблице 1. Работу методов оценим по числу требуемых матрично-векторных умножений (матвеков), процессорного времени и полученной точности. Метод, обозначенный «1 сетка» — это обычный метод подпространства Крылова `phiRT`, запущенный на одной заданной сетке без ГСП. Оценки ошибки, данные в скобках для двухсеточного метода «2 сетки», получены по формуле (23), а оценки ошибки для трёх- и четырёхсеточных методов («3 сетки» и «4 сетки») — это суммы оценок (23), полученных на каждом огрублении сетки. Во-первых, заметим, что приближённые оценки ошибки (23), приведённые в скобках, как и можно ожидать, не являются точными. Кроме того, как видим, метод ГСП явно выигрывает за счёт расщепления вектора \bar{g} на гладкую, $Q\tilde{g}$, и негладкую, \hat{g} , составляющие. Выигрыш достигается из-за ослабленных требований по точности (допустимые требования точности приведены в таблице в скобках под значениями матвеков).

Также интересно сравнить результаты двухсеточного метода на сетке $N = 1024$ и трёхсеточного метода на сетке $N = 2048$. Число матвеков, требуемых на первой сетке, (т.е. 25 и 1219) сравним с числом матвеков, требуемых на второй сетке (6 и 1207). Как видим, переход на более мелкую сетка практически не

Таблица 1. Результаты для одномерного уравнения теплопроводности. В скобках во втором столбце приведены значения оценки ошибки ГСП (23), в скобках под числом матвеков — значения требуемой точности $\widetilde{\text{tol}}$ (на исходной h -сетке) и $\widetilde{\text{tol}}$ (на грубых сетках)

метод	ошибка (оценка)	процесс. время, с	число матвеков (требуемая точность)			
			h	$2h$	$4h$	$8h$
размер сетки $N = 1024$						
1 сетка	5.23e-14	1.90	4215			
2 сетки	4.47e-08 (9.9e-03)	0.52	25 (1.63e-01)	1219 (1.41e-08)		
3 сетки	2.01e-07 (9.6e-03)	0.37	25 (1.65e-01)	444 (1.45e-02)	409 (2.00e-08)	
размер сетки $N = 2048$						
1 сетка	7.42e-14	6.01	14508			
2 сетки	1.82e-08 (3.9e-02)	1.54	2 (2.64)	4028 (1.41e-08)		
3 сетки	5.97e-08 (3.7e-02)	0.45	2 (2.64)	6 (2.33e-01)	1207 (2.00e-08)	
4 сетки	2.12e-07 (2.6e-02)	0.29	2 (2.64)	6 (2.33e-01)	389 (2.04e-02)	395 (2.82e-08)

приводит к увеличению числа матвеков. Это можно объяснить тем, что, возможно, избыточное разрешение дискретизации по пространству компенсируется ослаблением точности, требуемой на самой мелкой сетке (поскольку негладкая часть \hat{g} мала по норме по сравнению с \bar{g}). Более того, ошибка двухсеточного метода на сетке $N = 1024$ близка к ошибке трёхсеточного метода на сетке $N = 2048$. Напомним, что, как отмечалось выше, приводимые значения ошибки отражают ошибку по времени, а не по пространству, которая, разумеется, должна была бы быть значительно меньше на сетке $N = 2048$. Подобные выводы можно сделать, сравнивая результаты трёхсеточного метода на сетке $N = 1024$ и четырёхсеточного на сетке $N = 2048$.

Теперь протестируем наш метод ГСП в сочетании с итерациями на многочленах Чебышёва (15). Поскольку чебышёвские итерации вычисляют матрично-векторные произведения с матричной экспонентой, а не с матричной функцией φ , мы меняем постановку тестовой задачи и берём в (32) $g(x) \equiv 0$, $u(x, 0) = e^{-500(x-0.5)^2}$. Кроме того, мы берём меньший интервал по времени $[0, T]$ с $T = 0.001$ (при этом $T\|A\|_1 > 16\,500$ на сетке $N = 2048$). Чебышёвские

Таблица 2. Результаты для одномерного уравнения теплопроводности с чебышёвскими итерациями. В скобках во втором столбце приведены значения оценки ошибки ГСП (23), в скобках под числом матвектов — значения требуемой точности $\widehat{\text{tol}}$ (на исходной h -сетке) и $\widetilde{\text{tol}}$ (на грубых сетках). Заметьте, что таблица получена для постановки теста, отличной от постановки теста таблицы 1.

метод	ошибка (оценка)	процесс. время, с	число матвектов (требуемая точность)			
			h	$2h$	$4h$	$8h$
размер сетки $N = 2048$						
1 сетка	1.74e-08	70.9	184 734			
2 сетка	7.73e-05 (1.4e-04)	37.5	49 526 (0.1)	46 233 (1.41e-08)		
3 сетка	2.31e-04 (5.3e-04)	32.0	49 526 (0.1)	12 340 (0.1)	11 583 (2.00e-08)	
4 сетка	5.24e-04 (1.6e-03)	29.0	49 526 (0.1)	12 340 (0.1)	3068 (2.04e-02)	2915 (2.82e-08)

итерации выполняются последовательно с шагами по времени $\Delta t > 0$, выбранными так, чтобы $\Delta t \|A\| \leq 1$, и подход ГСП для них применяется точно так же, как и для метода подпространства Крылова, т.е. для чебышёвских итераций используется остановочный критерий из алгоритмов, представленных на рис. 3 и 4. Единственное небольшое отличие, сделанное нами в реализации ГСП для чебышёвских итераций, состоит в том, что задаваемая на грубых сетках допустимая точность не может быть ослаблена слишком сильно: мы не позволяем алгоритму увеличивать точность $\widehat{\text{tol}}$ больше 0.1. Если ослабление допустимой точности не ограничивать, то наблюдается умеренный рост ошибки во всём алгоритме.

Результаты для чебышёвских итераций в сочетании с методом ГСП представлены в таблице 2. Как видим, хотя наш подход ГСП работает успешно, его применение для итераций Чебышёва даёт меньший выигрыш по эффективности, чем для итераций на подпространства Крылова. Это не должно удивлять нас, поскольку, в отличие от итераций Чебышёва, крыловские итерации адаптивно подстраиваются как к дискретной структуре спектра A , так и к вектору, на который умножается матричная функция (см., например, [33]). Напротив, в чебышёвских итерациях переход на грубую сетку даёт выигрыш только за счёт меньшего размера задачи и уменьшения нормы матрицы (ведь для многих дискретизаций разумно ожидать, что $\|\tilde{A}\| < \|A\|$).

4.2. Трёхмерное уравнение теплопроводности. В этом тесте решается задача (3), полученная обычной разностной схемой второго порядка на семиточечном шаблоне для начально-краевой задачи

$$u_t = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} + g(x, y, z), \quad (x, y, z) \in [0, 1]^3,$$

$$u(x, y, z, 0) = 0, \quad g(x, y, z) = e^{-50(x-\frac{1}{2})^2 - 100(y-\frac{1}{2})^2 - 50(z-\frac{1}{2})^2},$$

где $u = u(x, y, z, t)$ — неизвестная функция и наложены однородные краевые условия Дирихле. Используется равномерная сетка по пространству $n_x \times n_y \times n_z$ с узлами (x_i, y_j, z_k) ,

$$x_i = i/(n_x + 1), \quad i = 1, \dots, n_x,$$

и аналогично определёнными y_j, z_k . Задавались размеры сетки $80 \times 88 \times 96$ и $160 \times 176 \times 192$, длина интервала по времени $T = 0.1$ и требуемая точность $\text{tol} = 10^{-5}$. При этом на выбранных двух сетках получаем $T\|A\|_1 > 9\,500$ и $T\|A\|_1 > 37\,500$ соответственно.

Результаты тестов представлены в таблице 3. Как видим, достигаемая нашим подходом точность значительно ниже в этой задаче. Это ожидаемо, поскольку используются гораздо более грубые сетки. Тем не менее, при умеренных требованиях по точности полученные значения ошибки можно считать удовлетворительными. Оценки ошибки оказываются в этой задаче более точными, возможно, из-за положительного значения ω . Как видим, как и для первой тестовой задачи, алгоритм ГСП существенно выигрывает из-за расщепления исходного вектора \bar{g} на гладкую и негладкую составляющие и, как следствие, ослабленных требований точности. Поэтому переход на более мелкую сетку приводит лишь к небольшому увеличению вычислительных затрат. Это можно ясно увидеть, сравнивая результаты двухсеточного метода на сетке $80 \times 88 \times 96$ и трёхсеточного метода на сетке $160 \times 176 \times 192$: оба метода требуют примерно одинаковое число матвеков (соответственно, 14 и 5, 150 и 146) и достигают схожей точности. Учитывая, что измеренная точность отражает прежде всего ошибки интегрирования по времени, приходим к выводу, что подход ГСП позволяет получить более высокую точность при небольшом увеличении затрат.

Чтобы проверить, насколько чувствителен наш подход к увеличению интервала по времени, в таблице 4 мы приводим результаты для сетки $80 \times 88 \times 96$ и T , увеличенного в 10 раз, $T = 1$. Поскольку начальный вектор \bar{g} не изменился, все значения требуемой точности остались теми же, слегка изменились только оценки ошибки ГСП. Отметим следующее интересное свойство метода ГСП. Поскольку число матвеков, требуемых исходным методом (отмеченным «1 сетка» в таблице), возросло при увеличении T примерно на 45%, с 539 (см. табл. 3, строка 4) до 779, можно ожидать подобное увеличение и для метода

Таблица 3. Результаты для трёхмерного уравнения теплопроводности. В скобках во втором столбце приведены значения оценки ошибки ГСП (23), в скобках под числом матвектов — значения требуемой точности $\widehat{\tau_{01}}$ (на исходной h -сетке) и $\widetilde{\tau_{01}}$ (на грубых сетках)

метод	ошибка (оценка)	процесс. время, с	число матвектов (требуемая точность)			
			h	$2h$	$4h$	$8h$
размер сетки $80 \times 88 \times 96$						
1 сетка	2.75e-08	6.63	539			
2 сетка	1.20e-03 (9.3e-03)	0.55	14 (1.92e-01)	150 (2.78e-05)		
3 сетка	5.84e-03 (2.4e-02)	0.37	14 (1.92e-01)	20 (2.60e-02)	43 (7.61e-05)	
размер сетки $160 \times 176 \times 192$						
1 сетка	1.19e-09	176	1796			
2 сетки	3.08e-04 (6.7e-03)	6.7	2 (3.19)	480 (2.80e-05)		
3 сетки	1.51e-03 (1.6e-02)	1.48	2 (3.19)	5 (5.38e-01)	146 (7.80e-05)	
4 сетки	6.15e-03 (3.2e-02)	1.25	2 (3.19)	5 (5.38e-01)	11 (7.30e-02)	27 (2.13e-04)

Таблица 4. Результаты для трёхмерного уравнения теплопроводности и увеличенного интервала по времени ($T = 1$). В скобках во втором столбце приведены значения оценки ошибки ГСП (23), в скобках под числом матвектов — значения требуемой точности $\widehat{\tau_{01}}$ (на исходной h -сетке) и $\widetilde{\tau_{01}}$ (на грубых сетках)

метод	ошибка (оценка)	процесс. время, с	число матвектов (требуемая точность)			
			h	$2h$	$4h$	$8h$
размер сетки $80 \times 88 \times 96$						
1 сетка	1.27e-07	8.51	779			
2 сетки	1.16e-03 (9.8e-03)	0.55	14 (1.92e-01)	150 (2.78e-05)		
3 сетки	5.64e-03 (2.5e-02)	0.37	14 (1.92e-01)	20 (2.60e-02)	53 (7.61e-05)	

ГСП. Однако, как видим, это не так: число требуемых матвеков едва ли выросло. Это можно объяснить комбинацией следующих двух эффектов:

- (i) метод ГСП работает на гладких начальных данных, что даёт преимущество методу подпространства Крылова;
- (ii) работа на более грубой сетке и увеличенном интервале по времени означает, что паразитические высокочастотные моды, соответствующие большим собственным числам A , гасятся более эффективно, что позволяет сохранять размерность подпространства Крылова малой.

5. Выводы

При умеренных требованиях по точности и для гладких векторов начальных данных представленный метод грубо-сеточных поправок (ГСП) позволяет эффективно вычислять действия экспоненциальной матрицы и матричной функции φ . Поскольку точность метода ограничена, получены верхние границы погрешности для двухсеточного и многосеточного вариантов метода. Для оценки точности метода ГСП на практике предлагается вычисляемая оценка ошибки. Оценка может быть вычислена после выполнения части алгоритма на грубой сетке. Численные эксперименты демонстрируют эффективность подхода и его надёжную работу при сгущении пространственной сетки и увеличении длины интервала по времени. Как показывают тесты, наш подход ГСП работает в сочетании с методами подпространства Крылова более эффективно, чем с итерациями на многочленах Чебышёва. Это ожидаемо, поскольку в методах подпространства Крылова выигрыш по вычислительным затратам достигается не только за счёт меньшей нормы оператора, но и за счёт дискретной структуры спектра и исходного вектора.

Укажем возможные направления дальнейших исследований. Во-первых, полезно изучить возможности подхода для несимметричных матриц A и для негладких входных данных. Далее, было бы интересно понять, можно ли уменьшить ошибку ГСП, переключаясь на менее грубую сетку. Если это возможно, вероятно, то, вероятно, можно разработать адаптивный алгоритм ГСП с контролируемой точностью. Наконец, поскольку предлагаемый подход ГСП обладает внутренним параллелизмом, разумно изучить его свойства параллельности во времени. Мы надеемся, что сможем исследовать эти вопросы в будущем.

Благодарности При выполнении работы использовались ресурсы гибридного суперкомпьютера К-100, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Автор благодарит Л.А. Книжнермана за полезные обсуждения.

Список литературы

1. *Amaladas J. R., Kamath H.* Implicit and multigrid procedures for steady-state computations with upwind algorithms // *Computers & Fluids*. — 1999. — Т. 28, № 2. — С. 187—212. — ISSN 0045-7930.
2. *Botchev M. A., Grimm V., Hochbruck M.* Residual, Restarting and Richardson Iteration for the Matrix Exponential // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2013. — Т. 35, № 3. — A1376—A1397. — <http://doi.org/10.1137/110820191>.
3. *Botchev M. A., Knizhnerman L., Tyrtysnikov E. E.* Residual and Restarting in Krylov Subspace Evaluation of the φ Function // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2021. — Т. 43, № 6. — A3733—A3759. — <https://doi.org/10.1137/20M1375383>.
4. *Botchev M. A., Knizhnerman L. A.* ART: Adaptive residual-time restarting for Krylov subspace matrix exponential evaluations // *J. Comput. Appl. Math.* — 2020. — Т. 364. — С. 112311. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.027>.
5. *Celledoni E., Moret I.* A Krylov projection method for systems of ODEs // *Appl. Numer. Math.* — 1997. — Т. 24, № 2/3. — С. 365—378. — [https://doi.org/10.1016/S0168-9274\(97\)00033-0](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(97)00033-0).
6. *Clenshaw C. W.* Chebyshev Series for Mathematical Functions. Т. 5. — London : Her Majesty's Stationary Office, 1962. — (Mathematical Tables).
7. *Druskin V. L., Greenbaum A., Knizhnerman L. A.* Using nonorthogonal Lanczos vectors in the computation of matrix functions // *SIAM J. Sci. Comput.* — 1998. — Т. 19, № 1. — С. 38—54. — ISSN 1064-8275.
8. *Eiermann M., Ernst O. G.* A Restarted Krylov Subspace Method for the Evaluation of Matrix Functions // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 2006. — Т. 44. — С. 2481—2504.
9. *Eiermann M., Ernst O. G., Güttel S.* Deflated restarting for matrix functions // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* — 2011. — Т. 32, № 2. — С. 621—641.
10. *Fedorenko R. P.* Iterative methods for elliptic difference equations // *Russian Mathematical Surveys*. — 1973. — App. — Т. 28, № 2. — С. 129—195. — <https://doi.org/10.1070/rm1973v028n02abeh001542>.
11. *Frommer A., Güttel S., Schweitzer M.* Convergence of Restarted Krylov Subspace Methods for Stieltjes Functions of Matrices // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* — 2014. — Т. 35, № 4. — С. 1602—1624.
12. *Frommer A., Güttel S., Schweitzer M.* Efficient and stable Arnoldi restarts for matrix functions based on quadrature // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* — 2014. — Т. 35, № 2. — С. 661—683.

13. *Gander M. J.* 50 years of time parallel time integration // Multiple shooting and time domain decomposition methods. — Springer, 2015. — С. 69—113. — https://doi.org/10.1007/978-3-319-23321-5_3.
14. *Gerlinger P., Möbus H., Brüggemann D.* An Implicit Multigrid Method for Turbulent Combustion // Journal of Computational Physics. — 2001. — Т. 167, № 2. — С. 247—276.
15. *Golub G. H., Van Loan C. F.* Matrix Computations. — 3-е изд. — Baltimore, London : The Johns Hopkins University Press, 1996. — С. 694.
16. *Güttel S.* Rational Krylov Methods for Operator Functions : дис. ... канд. / Güttel Stefan. — Technischen Universität Bergakademie Freiberg, 03.2010. — www.guettel.com.
17. *Hackbusch W.* Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations. — Springer-Verlag, 1994.
18. *Hackbusch W.* Parabolic multigrid methods // Computing methods in applied sciences and engineering, VI (Versailles, 1983). — Amsterdam : North-Holland, 1984. — С. 189—197.
19. *Hochbruck M., Ostermann A.* Exponential integrators // Acta Numer. — 2010. — Т. 19. — С. 209—286. — ISSN 0962-4929.
20. Implementation of a Restarted Krylov Subspace Method for the Evaluation of Matrix Functions / M. Afanasjew [и др.] // Linear Algebra Appl. — 2008. — Т. 429. — С. 2293—2314.
21. Interweaving PFASST and Parallel Multigrid / M. L. Minion [и др.] // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2015. — Т. 37, № 5. — S244—S263.
22. *Janssen J., Vandewalle S.* Multigrid Waveform Relaxation of Spatial Finite Element Meshes: The Continuous-Time Case // SIAM J. Numer. Anal. — 1996. — Т. 33, № 2. — С. 456—474.
23. *Janssen J., Vandewalle S.* On SOR waveform relaxation methods // SIAM J. Numer. Anal. — 1997. — Т. 34, № 6. — С. 2456—2481. — ISSN 0036-1429.
24. *Jawecki T., Auzinger W., Koch O.* 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>.
25. *Lubich C., Ostermann A.* Multi-grid dynamic iteration for parabolic equations // BIT Numerical Mathematics. — 1987. — Т. 27, вып. 2. — С. 216—234. — ISSN 0006-3835. — URL: <http://doi.org/10.1007/BF01934186>; [10.1007/BF01934186](https://doi.org/10.1007/BF01934186).

26. *Miekkala U., Nevanlinna O.* Convergence of Dynamic Iteration Methods for Initial Value Problems // SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing. — 1987. — T. 8, № 4. — С. 459—482. — <https://doi.org/10.1137/0908046>.
27. *Al-Mohy A. H., Higham N. J.* Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators // SIAM J. Sci. Comput. — 2011. — T. 33, № 2. — С. 488—511. — <http://doi.org/10.1137/100788860>.
28. *Oosterlee C. W., Schuller A., Trottenberg U.* Multigrid. — Academic Press, 2001.
29. Parallel time integration with multigrid / R. D. Falgout [и др.] // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2014. — T. 36, № 6. — С. C635—C661. — <https://doi.org/10.1137/130944230>.
30. *Ryaben'kii V. S., Tsynkov S. V.* A Theoretical Introduction to Numerical Analysis. — Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2007. — С. xiv+537. — ISBN 978-1-58488-607-5; 1-58488-607-2.
31. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — 2d-е изд. — SIAM, 2003. — Available from <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>.
32. *Sidje R. B.* Expokit. A Software Package for Computing Matrix Exponentials // ACM Trans. Math. Softw. — 1998. — T. 24, № 1. — С. 130—156. — www.maths.uq.edu.au/expokit/.
33. *Sluis A. van der, Vorst H. A. van der.* The Rate of Convergence of Conjugate Gradients // Numer. Math. — 1986. — T. 48. — С. 543—560.
34. *Tal-Ezer H.* On restart and error estimation for Krylov approximation of $w = f(A)v$ // SIAM J. Sci. Comput. — 2007. — T. 29, № 6. — С. 2426—2441. — ISSN 1064-8275. — URL: <http://doi.org/10.1137/040617868>.
35. *Tal-Ezer H.* Spectral Methods in Time for Parabolic Problems // SIAM J. Numer. Anal. — 1989. — T. 26, № 1. — С. 1—11.
36. *Vandewalle S.* Waveform Relaxation Methods // Parallel Multigrid Waveform Relaxation for Parabolic Problems. — Springer, 1993. — С. 23—48.
37. *Vorst H. A. van der.* Iterative Krylov methods for large linear systems. — Cambridge University Press, 2003.
38. Waveform Relaxation: Theory and Practice : тех. отч. / J. White [и др.] ; EECS Department, University of California, Berkeley. — 1985. — UCB/ERL M85/65. — www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/1985/543.html.

39. *Zhukov V. T., Feodoritova O. B.* On Development of Parallel Algorithms for Solving Parabolic and Elliptic Equations // J. Math. Sci. — 2021. — Т. 254, № 5. — С. 606—624. — <https://doi.org/10.1007/s10958-021-05329-y>.
40. *Zhukov V. T., Novikova N. D., Feodoritova O. B.* On the solution of evolution equations based on multigrid and explicit iterative methods // Comput. Math. Math. Phys. — 2015. — Т. 55, № 8. — С. 1276—1289. — <https://doi.org/10.1134/S0965542515080151>.
41. *Федоренко Р. П.* Введение в вычислительную физику. — Издательский Дом «Интеллект», 2008. — ISBN 978-5-91559-011-2.
42. *Федоренко Р. П.* О скорости сходимости одного итерационного процесса // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1964. — Т. 4, № 3. — С. 559—564.
43. *Федоренко Р. П.* Об истории создания многосеточного метода. — 2001. — https://www.keldysh.ru/departments/dpt_2/multigrid.html.
44. *Федоренко Р. П.* Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1961. — Т. 1, № 5. — С. 922—927.