



КРЫЛОВСКИЕ И РАЦИОНАЛЬНЫЕ КРЫЛОВСКИЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГЕОФИЗИКИ

Леонид Аронович Книжнерман

Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, 119333, Москва, ул. Губкина, 8, Россия,
lknizhnerman@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8622-1503>

Аннотация. Решения многих дискретизированных по пространству задач, связанных с вычислительной геофизикой, представляются в виде $u = f(A)\varphi$, где $A \in \mathbf{R}^{N \times N}$, $\varphi \in \mathbf{R}^N$, f – функция. Мы рассматриваем аппроксимации к u на основе подхода Галёркина для полиномиальных и рациональных подпространств Крылова. Мы описываем соответствующие вычислительные методы – метод Ланцоша и рациональный метод Арнольди, а также их приложение к решению некоторых задач вычислительной геофизики (из области электрокаротажа, термокаротажа, электроразведки). Цель этой обзорной статьи – научить читателя применять описанные здесь методы к его прикладным задачам.

Ключевые слова: вычислительная геофизика, численное решение уравнений в частных производных, крыловские методы, рациональные крыловские методы

Финансирование: работа поддержана Отделением Московского центра фундаментальной и прикладной математики в ИВМ РАН (соглашение 075-15-2022-286 с Министерством науки и высшего образования Российской Федерации).

Благодарности: автор благодарит В.Л. Друскина, М.Ю. Заславского и Ping Lee за написание совместных с автором статей, включенных в этот обзор.

Для цитирования: Книжнерман Л.А. Крыловские и рациональные крыловские методы численного решения некоторых задач вычислительной геофизики // Геофизические технологии. 2024. № 1. С. 29–46. doi:10.18303/2619-1563-2024-1-29.

KRYLOV AND RATIONAL KRYLOV METHODS OF NUMERICAL SOLUTION OF SOME PROBLEMS OF COMPUTATIONAL GEOPHYSICS

Leonid A. Knizhnerman

Marchuk Institute of Numerical Mathematics RAS, Gubkin Str., 8, Moscow, 119333, Russia,
lknizhnerman@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8622-1503>

Abstract. The solutions of many spatially discretized problems, related with computational geophysics, are presented as $u = f(A)\varphi$, where $A \in \mathbf{R}^{N \times N}$, $\varphi \in \mathbf{R}^N$, f is a function. We consider approximations to u on the basis of Galerkin approach for polynomial and rational Krylov subspaces. We describe the corresponding computational methods – the ones of Lanczos and rational Arnoldi, and also their application to solving some problems of computational geophysics (in the area of electrologging, thermal logging, electrical prospecting). The aim of this review paper is to instruct the reader to apply the methods described here to his applied problems.

Keywords: computational geophysics, numerical solution of partial differential equations, Krylov methods, rational Krylov methods

Funding: The study was supported by Moscow Center of Fundamental and Applied Mathematics at Marchuk Institute of Numerical Mathematics of Russian Academy of Sciences (Agreement No. 075-15-2022-286 with the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation).

Acknowledgments: The author is grateful to V.L. Druskin, M.Yu. Zaslavsky, and Ping Lee for writing joint articles.

For citation: Knizhnerman L.A. Krylov and rational Krylov methods of numerical solution of some problems of computational geophysics // Russian Journal of Geophysical Technologies. 2024. No. 1. P. 29–46. (In Russ.). doi:10.18303/2619-1563-2024-1-29.

ВВЕДЕНИЕ

Решения многих дискретизированных по пространству задач, связанных с уравнениями математической физики (в том числе с вычислительной геофизикой), представляются в виде $u = f(A)\varphi$, где A – вещественная симметричная матрица, φ – вектор и f – функция (может быть функцией с параметром), определенная на спектральном интервале A .

Вполне естественным является нежелание вычислять матрицу $f(A)$ и затем умножать ее на φ , что может быть запредельно дорого. Вместо этого можно ввести в игру вектор φ с самого начала и искать приближения к u в виде $u_m = f_m(A)\varphi$, где f_m – многочлен степени $\leq m - 1$ или рациональная функция с суммарным числом корней и полюсов до $m - 1$. При этом u_m будет принадлежать соответственно подпространству Крылова или рациональному подпространству Крылова.

Мы рассматриваем аппроксимации на основе подхода Галёркина для полиномиальных и рациональных подпространств Крылова. Соответствующие вычислительные методы называются методом Ланцоша (сокращенно м. Л.) и рациональным методом Арнольди (сокращенно р. м. А.).

В первой части этой обзорной статьи мы приводим базовую информацию о м. Л., включая общие оценки погрешности в точной арифметике и (схематично) их доказательства. Рассматриваются вопросы практической реализации метода. Обсуждается также (весьма существенное) влияние машинной арифметики. Во второй части статьи мы, следуя принципу «от простого к сложному», описываем несколько вариантов р. м. А., примененных к решению некоторых задач вычислительной геофизики. Эта часть сложнее первой. Методы, описанные в статье, развиваются с участием автора с конца 1980-х годов. Они применялись к задачам электрокаротажа, термокаротажа, электроразведки (в квазистационарном приближении).

Цель статьи дидактическая: дать читателю средства самостоятельно применять описанные здесь методы к его прикладным задачам и априори оценивать скорость сходимости с помощью получаемых им оценок погрешности. Материал, в том числе некоторые доказательства, взят из статей, написанных совместно с Владимиром Друскиным, Михаилом Заславским и Пинг Ли.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ОТ САМОСОПРЯЖЕННОЙ МАТРИЦЫ, УМНОЖЕННОЙ НА ВЕКТОР, ПОЛИНОМИАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Мы рассматриваем задачу приближенного вычисления вектора

$$u = f(A)\varphi, \quad A \in \mathbf{R}^{N \times N}, \quad A^T = A, \quad \varphi \in \mathbf{R}^N, \quad (1)$$

где функция f определена (по меньшей мере) на спектральном интервале матрицы A . Можно считать без ограничения общности, что

$$\|\varphi\| = 1. \quad (2)$$

Введем в рассмотрение спектр матрицы A : λ_i , $i = 1, 2, \dots, N$, $\lambda_{i+1} \geq \lambda_i$, $\lambda_N > \lambda_1$, – собственные значения A , z_i – соответствующие ортонормированные собственные векторы. Разложение начального вектора и искомого результата¹ записываются в виде

$$\varphi = \sum_{i=1}^N \varphi_i z_i, \quad u = \sum_{i=1}^N \varphi_i f(\lambda_i) z_i.$$

Мы хотим брать аппроксиманты u_m к u из подпространств Крылова²

$$\mathcal{K}^m(A, \varphi) = \text{span} \{A^0 \varphi, A^1 \varphi, \dots, A^{m-1} \varphi\}, \quad m \geq 1. \quad (3)$$

Непосредственная работа со степенным базисом

$$(A^0 \varphi, A^1 \varphi, \dots, A^{m-1} \varphi) \quad (4)$$

вычислительно неустойчива, т. к. последовательное умножение на A «убивает» низкочастотную часть вектора. Борьба с вычислительной неустойчивостью при работе со степенным базисом (4) приводит к вычислению каких-либо ортонормальных многочленов от A , умноженных на φ . Имеются следующие варианты:

1. Вычисляются классические ортогональные многочлены. Ниже описано использование сдвинутых на спектральный интервал A многочленов Чебышёва.
2. Применяется ортогонализация по Граму—Шмидту базиса (4). Это приводит к многочленам, ортогональным по спектральной (дискретной) мере пары (A, φ) . Соответствующий метод называется методом Ланцоша.

МЕТОД ОПЕРАТОРНЫХ РЯДОВ ЧЕБЫШЁВА

Сделаем чисто техническое преобразование матрицы и функции

$$B = \frac{\lambda_N + \lambda_1}{\lambda_N - \lambda_1} I_N - \frac{2}{\lambda_N - \lambda_1} A, \quad g(x) = f \left[\frac{\lambda_N + \lambda_1 - (\lambda_N - \lambda_1)x}{2} \right], \quad (5)$$

вызванное тем, что многочлены Чебышёва ортогональны на интервале $[-1, 1]$. Введем в рассмотрение ряд Чебышёва функции g [Пашковский, 1983]

$$g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k T_k(x), \quad (6)$$

¹Матричные функции эквивалентным образом определяют и другими способами, например, матричными рядами.

²Во второй части статьи мы обобщим подпространства Крылова и перейдем от полиномиальных аппроксимаций к рациональным.

предполагая, что функция g достаточно регулярна (ряд к ней сходится). Поскольку $u = f(A)\varphi = g(B)\varphi$, то возьмем в качестве приближенного значения (1) вектор

$$v_m = \sum_{k=0}^{m-1} g_k T_k(B)\varphi. \quad (7)$$

Утверждение 1 [Друскин, Книжнерман, 1989; теорема 1]. Пусть ряд (6) абсолютно сходится на $[-1, 1]$. Тогда справедлива оценка погрешности

$$\|u - v_m\| \leq \sum_{k=m}^{\infty} |g_k| < +\infty. \quad (8)$$

Доказательство. Так как $T_k(1) = 1$ для всех $k \geq 0$ и ряд (6) при $x = 1$ абсолютно сходится, то

$$\sum_{k=m}^{\infty} |g_k| < +\infty.$$

Учитывая нормировку (2), определения (6) и (7) и неравенства $\|B\| \leq 1$, $|T_k(x)| \leq 1$ ($-1 \leq x \leq 1$), получаем

$$\|u - v_m\| \leq \sum_{k=m}^{\infty} |g_k| \cdot \|T_k(B)\| \cdot \|\varphi\| \leq \sum_{k=m}^{\infty} |g_k|.$$

МЕТОД СПЕКТРАЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЛАНЦОША

Процесс Ланцоша (см. [Парлетт, 1983]), первоначально предназначенный для решения спектральных задач, применяется и для вычисления матричных функций, умноженных на вектор. За m шагов процесс Ланцоша в подпространстве Крылова (3) строит базис

$$q_1, q_2, \dots, q_m, \quad Q_m^T Q_m = I_m \quad \text{с} \quad Q_m = (q_1 q_2 \dots q_m),$$

получаемый в результате ортогонализации по Граму—Шмидту степенной последовательности (4). Ортогонализация проводится с помощью трехчленной рекурсии³

$$Aq_i = \beta_{i-1}q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_i q_{i+1}, \quad \beta_0 q_0 = 0, \quad q_1 = \varphi, \quad \beta_i \geq 0. \quad (9)$$

Обозначим через H_m симметричную трехдиагональную матрицу

$$H_m = \text{tridiag}(\beta_{i-1} \alpha_i \beta_i).$$

В качестве аппроксиманты к u метод выдает вектор

$$u_m = Q_m f(H_m) e_1, \quad e_1 = (1 \ 0 \ \dots \ 0)^T \in \mathbf{R}^m. \quad (10)$$

Это аппроксимация Рэлея—Ритца на подпространстве Крылова (3).

³При программировании рекурсии надо строго следовать формулам из [Парлетт, 1983], иначе можно получить немодифицированную процедуру Грама—Шмидта и, как следствие, неработоспособность программы в условиях машинной арифметики.

Лемма 1 [Друскин, Книжнерман, 1989; теорема 2]. Если $f = p$ – многочлен степени не выше $m - 1$, то $u_m = u$.

Доказательство. Учитывая трехдиагональность H , равенство $q_1 = \varphi$ и соотношение (мы здесь и далее будем опускать индексы у Q и H)

$$AQ - QH = \beta_m q_{m+1} e_m^T, \quad 0 \leq j \leq m - 1, \quad (11)$$

являющееся матричным выражением рекурсии (9), показываем конечной индукцией по степени, что

$$A^j \varphi = QH^j e_1, \quad (12)$$

что достаточно, т. к. многочлены являются линейной комбинацией одночленов.

При $j = 0$ (12) верно. Если это равенство верно для j , $0 \leq j \leq m - 2$, то

$$\begin{aligned} A^{j+1} \varphi &= AA^j \varphi = AQH^j e_1 = (QH + \beta_m q_{m+1} e_m^T) H^j e_1 \\ &= QH^{j+1} e_1 + \beta_m q_{m+1} e_m^T H^j e_1 = QH^{j+1} e_1. \end{aligned}$$

Масштабируем симметричную трехдиагональную $m \times m$ -матрицу H в соответствии с (5):

$$V = \frac{\lambda_N + \lambda_1}{\lambda_N - \lambda_1} I_m - \frac{2}{\lambda_N - \lambda_1} H.$$

Поскольку, по построению, $\lambda_1 I_m \leq H \leq \lambda_N I_m$, то $-I_m \leq V \leq I_m$, так что $\|V\| \leq 1$.

Теорема 1 [Друскин, Книжнерман, 1989; теорема 1]. Пусть ряд (6) абсолютно сходится на $[-1, 1]$. Тогда справедлива оценка погрешности

$$\|u - u_m\| \leq 2 \sum_{k=m}^{\infty} |g_k| < +\infty. \quad (13)$$

Доказательство. С помощью леммы 1, формул (2), (11) и формул

$$\|B\| \leq 1, \quad \|V\| \leq 1, \quad \|Q\| = 1, \quad \max_{-1 \leq x \leq 1} |T_k(x)| = 1$$

получаем

$$\begin{aligned} \|u - u_m\| &= \left\| \sum_{k=0}^{\infty} g_k [T_k(B)\varphi - QT_k(V)e_1] \right\| = \left\| \sum_{k=m}^{\infty} g_k [T_k(B)\varphi - QT_k(V)e_1] \right\| \\ &\leq \sum_{k=m}^{\infty} g_k [\|T_k(B)\| \cdot \|\varphi\| + \|Q\| \cdot \|T_k(V)\| \cdot \|e_1\|] \leq 2 \sum_{k=m}^{\infty} |g_k|. \end{aligned}$$

Замечание 1. Сравнивая (13) и (8), видим, что оценка погрешности м. Л. в два раза превышает оценку погрешности метода операторных рядов Чебышёва. Возникает вопрос: зачем нужен м. Л.?

На практике, однако, м. Л. часто выигрывает благодаря адаптации к спектру – зависимости результатов от спектра (A, φ) , позволяющей получать лучшие результаты, чем обещают оценки, основанные только на спектральном интервале. Метод Ланцоша как спектральный метод предписывает искать приближения к некоторым (обычно крайним или хорошо отделенным) собственным значениям A среди собственных значений H . После того как какое-то собственное значение A хорошо сошлось, м. Л.

начинает сходиться так, как будто сошедшегося собственного значения не существует, т. е. задача становится проще.

Кроме того, м. Л. не требует знания границ спектра. И если верхнюю границу спектра нередко можно вывести из теоремы Гершгорина, то с нижней границей бывают трудности.

Замечание 2. Обычные способы вычисления аппроксиманты (10):

1. Решение спектральной задачи для трехдиагональной симметричной матрицы H .
2. Использование рациональных аппроксимаций трехдиагональной симметричной матрицы H .
3. Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ), индуцированной исходной задачей, если последняя связана с решением СОДУ.

Надо иметь в виду, что в геофизических приложениях нужно хранить лишь те компоненты векторов q_j , которые соответствуют местам расположения приемников поля, а не хранить полную матрицу Q . Это сильно уменьшает вероятность переполнения оперативной памяти и необходимости применения рестартов.

Замечание 3. Обычные критерии остановки процесса Ланцоша:

1. По стабилизации приближенного решения в приемниках поля (возможно, с подбором параметров в формуле с оценкой погрешности – тогда можно оценить реальную текущую ошибку и спрогнозировать дальнейшее поведение процесса).
2. По невязке, если задача связана с решением СОДУ.

Замечание 4. Простой (без дополнительной ортогонализации) метод Ланцоша представляет собой яркий пример метода, неустойчивого по промежуточным результатам, но финально выдающего правильные ответы!

Оценка погрешности м. Л. в машинной арифметике была дана в [Друскин, Книжнерман, 1991] и, при более жестких ограничениях, в [Greenbaum, 1989].

Для анализа влияния ошибок округления на процесс Ланцоша было построено чебышёвское рекуррентное соотношение с правой частью порядка элементарной машинной ошибки округления ϵ , которая (правая часть) отвечает за неточность процесса. Получение оценки ошибки м. Л., в правой части которой (оценки) слагаемое, отвечающее за ошибки округления, линейно по ϵ (что выведено из результатов К. Пэйджа, см. [Парлетт, 1983]), свелось к доказательству устойчивости чебышёвской рекурсии.

Наличие такой оценки ошибки не означает устойчивости процесса: выход статей с теоремами не изменил чудесным образом реальных свойств метода. Промежуточные результаты счета на разных компьютерах как могли отличаться друг от друга, так и могут отличаться. Однако пользователь не должен этого пугаться, т. к. ошибка на всех компьютерах удовлетворяет доказанным оценкам и в итоге пользователь получит правильный результат.

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ ЧАСТОТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕОТРИЦАТЕЛЬНО ОПРЕДЕЛЕННОГО ОПЕРАТОРА

Мы рассматриваем задачу вычисления вектора

$$(A - i\omega I)^{-1}\varphi, \quad A \geq 0, \quad \omega > 0. \quad (14)$$

Без ограничения общности (одновременно нормируя матрицу A и частоту ω на $\|A\|$) можно считать, что $0 \leq A \leq I$, и воспользоваться формулой из [Пашковский, 1983]

$$\frac{1}{(1+p)^2 - 4px} = \frac{2}{1-p^2} \sum_{k=0}^{\infty} p^k T_k^*(x),$$

где T_k^* – смещенные (на $[0,1]$) многочлены Чебышёва, $p \in \mathbb{C}$, $|p| < 1$, и штрих при знаке суммы означает, что слагаемое при $k = 0$ делится на два.⁴

Чтобы полюс попал в точку $i\omega$, $\omega > 0$, в качестве p нужно выбрать меньший единицы по модулю корень уравнения

$$p^2 + (2 - 4i\omega)p + 1 = 0.$$

Для получения оценки останется просуммировать геометрическую прогрессию.

Замечание 5. Если нужны несколько частот ω , то это соответствует вычислению нескольких матричных функций, а процесс Ланцоша остается один.

Замечание 6. Сведение трехмерной частотной задачи электроразведки в квазистационарном приближении к вычислению вектора вида (14) описано в [Друскин, Книжнерман, 1988], где надо обратить внимание на замечание 3 в пункте 4.

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Решение задачи Коши для однородного эволюционного уравнения

$$Au + \frac{du}{dt} = 0 \quad (t > 0), \quad u|_{t=0} = \varphi, \quad A \geq 0, \quad (15)$$

эквивалентно вычислению операторной экспоненты

$$u(t) = e^{-tA} \varphi. \quad (16)$$

Введем обозначение $a = \frac{t\lambda_n}{2}$.

Утверждение 2 [Друскин, Книжнерман, 1991; теорема 4]. При $m \leq a$ для вычисления (16) справедлива оценка погрешности

$$\|u - u_m\| \leq 2 \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} + O\left(\frac{m}{a}\right) \right] \frac{\sqrt{a}}{m} \exp \left[-\frac{m^2}{2a} + O\left(\frac{m^4}{a^3}\right) \right]. \quad (17)$$

Оценка (17) содержательна при больших значениях a , удовлетворяющих условию $\sqrt{a} \ll m \ll a$. Из оценки видно, что при больших значениях a число шагов процесса, нужное для достижения приемлемой точности, примерно пропорционально $\sqrt{t}$, а не t , как у явной временной разностной схемы с постоянным шагом.

⁴Отличие смещенных многочленов Чебышёва T_k^* от обычных T_k носит чисто технический характер и несущественно для изложения.

В доказательстве используются разложение из [Пашковский, 1983]

$$e^{ax} = \sum_{k=0}^{\infty} 'I_k(a)T_k(x),$$

где I_k – функции Бесселя, и оценка функций Бесселя из [Бейтмен, Эрдейи, 1984].

Замечание 7. Если нужны несколько значений времени t , то это соответствует вычислению нескольких матричных функций, а процесс Ланцоша остается один.

Замечание 8. Сведение трехмерной временной задачи электроразведки в квазистационарном приближении к вычислению вектора вида (16) описано в [Друскин, Книжнерман, 1988].

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПРИ РАЗНЫХ РЕЖИМАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПОЛЯ

Предполагаем в этом параграфе, что $A > 0$.

Из решения задачи (15), соответствующей мгновенному импульсу при $t = 0$:

$$U_{\text{pulse}}(t) = \exp(-tA)\varphi,$$

можно получить решение задачи с другим режимом возбуждения поля как временную свертку решения задачи с мгновенным импульсом и временной функции возбуждения (при том же пространственном распределении источника, соответствуем вектору φ). Приведем два простейших примера, с которыми можно встретиться, например, в электромагнитных и тепловых задачах.

Режим включения возбуждения в момент $t = 0$ приводит к решению

$$U_{\text{switch on}}(t) = \int_0^t \exp(-(t-\tau)A) d\tau \cdot \varphi = A^{-1}[I - \exp(-tA)]\varphi,$$

что соответствует свертке с функцией Хэвисайда $\chi(t)$ – характеристической функцией интервала $[0, +\infty)$.

Режим выключения возбуждения в момент $t = 0$ приводит к решению

$$U_{\text{switch off}}(t) = \int_0^{+\infty} \exp(-(t+\tau)A) d\tau \cdot \varphi = A^{-1} \exp(-tA)\varphi,$$

что соответствует свертке с функцией $1 - \chi(t)$ – характеристической функцией интервала $[-\infty, 0)$.

Замечание 9. Перемножать ряды Чебышёва с целью получения оценок сходимости можно с помощью тождества

$$T_k T_l = \frac{T_{k+l} + T_{|k-l|}}{2}, \quad k, l \in \mathbb{N}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим задачу

$$Au + \frac{d^2u}{dt^2} = 0, \quad u(0) = \varphi, \quad \frac{du}{dt}(0) = 0, \quad (18)$$

$$u(t) = \cos(t\sqrt{A})\varphi, \quad A \geq 0.$$

Введем определения

$$\tau = \frac{2}{\sqrt{\lambda_n}}, \quad x = \frac{2t}{\tau}, \quad \xi = \frac{2m}{x} - 1.$$

Утверждение 3 [Друскин, Книжнерман, 1989; теорема 6]. Если $0 < \xi \leq 1$, то для решения задачи (18) имеет место оценка погрешности

$$\|u - u_m\| \leq \frac{1 + O\left(\frac{1}{x} + \sqrt{\xi}\right) \exp\left\{-x\left[\frac{(2\xi)^{1.5}}{3} + O(\xi^2)\right]\right\}}{\sqrt{\pi} \sqrt[4]{4m^2 - x^2} \sqrt{\xi}}. \quad (19)$$

Оценка (19) практична при больших x и $\sqrt{x} \ll 2m - x \ll x$. Оценка не гарантирует более быстрой сходимости м. Л. по сравнению с временной разностной схемой с предельным по устойчивости шагом. Выигрыш возможен для гладких решений благодаря адаптации, но в геофизических задачах обычно есть фронты.

В доказательстве используются разложение

$$u(t) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} J_{2k}(x) T_k(B) \varphi$$

и оценка функций Бесселя J_l .

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С КОЭФФИЦИЕНТАМИ, НЕ ЗАВИСЯЩИМИ ОТ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Пусть $A > 0$, т. е. $\lambda_1 > 0$. Рассмотрим краевую задачу

$$Au - \frac{d^2u}{dz^2} = 0, \quad z > 0, \quad u|_{z=0} = \varphi, \quad u|_{z=+\infty} = 0. \quad (20)$$

Решение задачи (20) выражается формулой $u(z) = \exp(-z\sqrt{A})\varphi$. Можно рассматривать матрицу A как (слегка преобразованную) дискретизацию эллиптического оператора по пространственным переменным x и y , а задачу в целом – как квазитрехмерную со средой, не зависящей от аппликаты z .

Положим $c = (\lambda_n + \lambda_1)/(\lambda_n - \lambda_1) > 1$ и определим обратную функцию Жуковского $\Phi(w) = w + \sqrt{w^2 - 1}$.

Утверждение 4 [Друскин, Книжнерман, 1989; теорема 8]. Для решения задачи (6.1) справедлива оценка погрешности

$$\|u - u_m\| \leq 4\Phi(c)^{-m} [1 - \Phi(c)^{-1}]^{-1}.$$

В доказательстве получается и используется оценка аналитического продолжения вычисляемой функции со спектрального интервала A .

ПРИЛОЖЕНИЕ М. Л. К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ МЕТОДАМИ РАСЩЕПЛЕНИЯ

В методах расщепления прямолинейное вычисление матричной экспоненты (16) при решении задачи (15) приближенно заменяется вычислением умноженных на вектор одночленов $C^s \varphi$, где $C = C^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\|C\| \leq 1$, и $s \in \mathbb{N}$ равно отношению времени $t \geq 0$ к шагу метода расщепления $\tau > 0$. Для приближенного же решения последней задачи можно применить м. Л. к функции $f(\lambda) = \lambda^s$ (одночлену).

В двухциклических схемах расщепления оператор перехода C удовлетворяет неравенству $0 \leq C \leq I$.

Утверждение 5 [Druskin, Knizhnerman, 1992; теорема 2.1]. В случае $0 \leq C \leq I$ справедлива оценка погрешности

$$\|u - u_m\| \leq \frac{2}{m} \sqrt{\frac{2s}{\pi}} \left[1 + O\left(\frac{m}{s}\right) + O\left(\frac{1}{s-m}\right) \right] \exp \left[-\frac{m^2}{s} + O\left(\frac{m^3}{s^2}\right) \right]. \quad (21)$$

В доказательстве используется разложение по смещенным многочленам Чебышёва

$$x^s = 2^{-2s+1} \sum_{i=0}^s \binom{2s}{i} T_{s-i}^T(x); \quad (\cdot) - \text{биномиальные коэффициенты.}$$

Из оценки (21) следует, что для достижения разумного уровня погрешности достаточно делать число шагов m порядка $m \asymp \sqrt{t}$.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАЦИОНАЛЬНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ КРЫЛОВА – Р. М. А.)

Рациональный метод Арнольди предложен в [Ruhe, 1994]. В этом методе используются рациональные подпространства Крылова

$$\text{span} \left\{ \prod_{j=1}^0 (A - s_j I)^{-1} \cdot \varphi, \prod_{j=1}^1 (A - s_j I)^{-1} \cdot \varphi, \dots, \prod_{j=1}^{m-1} (A - s_j I)^{-1} \cdot \varphi \right\}, \quad s_j \in \bar{\mathcal{C}} \quad (22)$$

($\bar{\mathcal{C}} = \mathcal{C} \cup \{\infty\}$ – расширенная комплексная плоскость). В случае $s_j = \infty$ множитель $(A - s_j I)^{-1}$ в (22) заменяется на A .

Пусть Q – результат ортогонализации по модифицированному Граму—Шмидту выписанного в (22) базиса, $Q^T Q = I$. Тогда m -ая аппроксиманта метода определяется как $Qf(Q^T A Q)Q^T \varphi$.

В общем случае вычисления в р. м. А. гораздо сложнее, чем в м. Л. (или даже в методе Арнольди). Системы линейных уравнений с матрицами $A - S_j I$ решаются с помощью факторизации или итерационно. Применение р. м. А. имеет смысл, если эта сложность окупается лучшими аппроксимационными свойствами применяемых рациональных функций.

ПРИЛОЖЕНИЕ Р. М. А. К ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ЗАДАЧЕ С НИЗКИМИ ЧАСТОТАМИ. М. Л. С ОБРАТНОЙ МАТРИЦЕЙ

Мы здесь рассматриваем систему уравнений Максвелла с нулевой диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 0$ и постоянной магнитной проницаемостью $\mu = 1$. После исключения напряженности магнитного поля $\mathbf{H}$ получаем уравнение относительно напряженности электрического поля $\mathbf{E}$:

$$\sigma^{-1} \operatorname{rot} (\operatorname{rot} \mathbf{E}) + i\omega \mathbf{E} = i\omega \sigma^{-1} \mathbf{J}, \quad x \in \Omega \subset \mathbf{R}^3, \quad (23)$$

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0,$$

где σ – электропроводность, $\mathbf{n}$ – вектор внешней нормали к границе $\partial\Omega$ области Ω и источник внешних токов $\mathbf{J}$ мы считаем магнитным: $\operatorname{grad} \mathbf{J} = 0$.

Оператор $A = \sigma^{-1} \operatorname{rot} (\operatorname{rot} \cdot)$ самосопряжен и неотрицательно определен с пространственным весом σ .

Мы дискретизируем задачу по пространству и с помощью специальной техники переходим к подпространству (ортогональному дополнению к ядру). Та же техника позволяет нам на этом подпространстве экономично применять A^{-1} к векторам.

Задачу (23) можно компактно записать в виде

$$(A + i\omega I)\mathbf{E} = i\omega \sigma^{-1} \mathbf{J},$$

а ее решение выражается формулой

$$\mathbf{E} = -i\omega^{-1}(A^{-1} - i\omega^{-1}I)A^{-1}(\sigma^{-1}\mathbf{J}).$$

Мы применяем процесс Ланцоша с оператором A^{-1} и начальным вектором $A^{-1}(\sigma^{-1}\mathbf{J})$. Этот процесс можно рассматривать как рациональный крыловский процесс с единственным (многократным) полюсом 0.

Как показано в статье [Druskin et al., 1999], где и предложен обсуждаемый в этом параграфе алгоритм, стоимость одного применения A^{-1} к вектору – решение одного скалярного дивергентного уравнения с дивергентным коэффициентом σ (делается с помощью предобуславливателя – неполного LU -разложения) и решение трех скалярных уравнений с лапласианом. В той же статье эффективность алгоритма подтверждена результатами численных экспериментов.

МЕТОД РАСШИРЕННЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ КРЫЛОВА

Описание метода

В методе расширенных подпространств Крылова (сокращенно м. р. п. К.) используется частный вид рационального подпространства Крылова:

$$\text{span} \{ \varphi, A\varphi, A^{-1}\varphi, A^2\varphi, A^{-2}\varphi, \dots, A^m\varphi, A^{-m}\varphi \}.$$

Соответствующий класс функций, аппроксимируемых линейными комбинациями функций

$$1, z, z^{-1}, z^2, z^{-2}, \dots, z^m, z^{-m},$$

включает марковские (стильтесовские) функции и, грубо говоря, содержит функции, аналитические в плоскости с разрезом $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ и имеющие на берегах разреза умеренный рост при $z \rightarrow -\infty \pm 0i$.

Примеры аппроксимируемых функций, встречающихся в уравнениях математической физики:

- Решение эллиптического уравнения с параметром среды, не зависящим от одной переменной

$$f(A; z)\varphi = e^{-z\sqrt{A}}\varphi \quad (z - \text{параметр}).$$

- Отображение Дирихле—Нейман

$$f(A)\varphi = A^{-1/2}\varphi.$$

- Уравнение постоянного тока в цилиндрической системе координат (θ — угловой параметр)

$$f(A; \theta)\varphi = \frac{1}{2\pi}A^{-1} + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \cos k\theta (A + k^2I)^{-1}.$$

Замечание 10. Метод расширенных подпространств Крылова был в первоначальной форме предложен и первоначально исследован в [Druskin, Knizhnerman, 1998].

Замечание 11. Удобная короткая рекурсия для процесса ортогонализации Гильберта—Шмидта в м. р. п. К. была предложена в [Simoncini, 2007].

Замечание 12. Окончательная оценка погрешности м. р. п. К. была доказана в [Beckermann et al., 2009] с помощью связи с произведениями Бляшке из теории логарифмического потенциала (наша первоначальная оценка занижала скорость сходимости примерно вдвое).

ОПТИМИЗАЦИЯ ПОЛЮСОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЭВОЛЮЦИОННЫХ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ ГАЛЁРКИНСКОГО ПОДХОДА НА РАЦИОНАЛЬНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

В этом параграфе мы снова рассматриваем вычисление произведений матричной экспоненты и вектора вида (16), но при дополнительном ограничении $0 < \lambda_{\min}I \leq A \leq \lambda_{\max}I$. Эта задача связана с вычислением векторов $(A + i\omega I)^{-1}\varphi$, $\omega \in \mathbb{R}$, через преобразование Фурье $\mathcal{F}_\omega$ по переменной ω . Обе задачи содержат параметр (соответственно t и ω), поэтому рациональная аппроксимации фиксированной функции здесь не работает.

Мы применяем галёркинскую аппроксимацию на рациональном подпространстве Крылова

$$U = \text{span} \{ (A + s_1I)^{-1}\varphi, \dots, (A + s_nI)^{-1}\varphi \}, \quad s_j \notin [\lambda_1, \lambda_N],$$

при хорошем выборе s_j .

Следующее утверждение показывает, что и в случае рациональных подпространств Крылова хорошая аппроксимация с полюсами $-s_j$ дает хорошую оценку ошибки приближения u_n функции, гладкой на $[\lambda_1, \lambda_N]$.

Утверждение 6 [Druskin et al., 2009; proposition 3.2]. Пусть p – многочлен степени не выше $n - 1$. Тогда справедлива оценка

$$\|u - u_n\| \leq 2 \max_{\lambda \in \text{Co Sp } A} \left| f(\lambda) - \frac{p(\lambda)}{q(\lambda)} \right|,$$

где

$$q(\lambda) = \prod_{j=1}^n (\lambda + s_j).$$

Замечание 13. Похожий результат был независимо представлен в [Beckermann et al., 2009].

Скелетонная аппроксимация (СА) была введена в [Tyrtshnikov, 1996], а для функции с параметром $f(\lambda, s) = 1/(\lambda + s)$ она была исследована в [Оселедец, 2007]. СА определяется формулами

$$f_{\text{skel}}(\lambda, s) = \left(\frac{1}{\lambda + s_1}, \dots, \frac{1}{\lambda + s_n} \right) M^{-1} \left(\frac{1}{s + \lambda_1}, \dots, \frac{1}{s + \lambda_n} \right)^T,$$

где

$$M = (M_{kl}), \quad M_{kl} = 1/(\lambda_k + s_l), \quad 1 \leq k, l \leq n,$$

а λ_k и s_l – комплексные параметры (которые надо будет выбрать).

Теорема 3 из [Оселедец, 2007] дает выражение для относительной ошибки, ведущее к задаче Золотарёва:

$$\begin{aligned} \eta(\lambda, s) &= \left[\frac{1}{\lambda + s} - f_{\text{skel}}(\lambda, s) \right] / \frac{1}{\lambda + s} = \prod_{j=1}^n \frac{\lambda - \lambda_j}{\lambda + s_j} \cdot \prod_{j=1}^n \frac{s - s_j}{s + \lambda_j} \\ &= \frac{r(\lambda)}{r(-s)}, \quad r(z) = \prod_{j=1}^n \frac{z - \lambda_j}{z + s_j}. \end{aligned}$$

Держим в уме подстановки

$$\lambda \hookrightarrow A, \quad s \hookrightarrow i\omega I.$$

Ошибка аппроксимации во временной области связана с ошибкой в частотной области через теорему Планшереля.

Оптимизация параметров СА совпадает с третьей задачей Золотарёва с плоским конденсатором (E, D) , чьи компактные (в $\overline{\mathbb{C}}$) платы –

$$E = [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \quad \text{и} \quad D = \{z \in \mathbb{C} | \Re z \leq 0\}.$$

Рассмотрим величины

$$\sigma_n(E, D) = \min_{\lambda_1, \dots, \lambda_n, s_1, \dots, s_n} \frac{\max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} |r(\lambda)|}{\min_{s \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}} |r(s)|},$$

$$\delta = \lambda_{\min} / \lambda_{\max}, \quad \mu = \left(\frac{1 - \sqrt{\delta}}{1 + \sqrt{\delta}} \right)^2,$$

$$\rho = \exp \left(-\frac{\pi}{4} \cdot \frac{K'(\mu)}{K(\mu)} \right) \stackrel{\text{large } \lambda_{\max} / \lambda_{\min}}{\approx} \exp \left(-\frac{\pi^2}{2} / \log \frac{4\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right).$$

Следующая теорема даёт оценку погрешности и утверждает, что оценка неулучшаема с точностью до постоянного множителя.

Теорема 2 [Druskin et al., 2009]. *Справедливо двойное неравенство*

$$\rho^n \leq \sigma_n(E, D) \leq 2\rho^n.$$

Нижняя оценка получается вычислением риманова модуля конденсатора (E, D) и применением теоремы из [Гончар, 1969]. Верхняя граница предоставляется набором параметров, полученных минимизацией при дополнительном условии $s_j = \lambda_j$:

$$s_j = \lambda_j = \lambda_{\max} \operatorname{dn} \left(\frac{2(n-j)+1}{2n} K'(\delta), \sqrt{1-\delta^2} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (24)$$

Здесь K' – дуальный полный эллиптический интеграл (не производная), а dn – эллиптическая функция. Было показано в [Le Bailly, Thiran, 2000], что (24) удовлетворяют некоторому локальному условию оптимальности.

Замечание 14. Все параметры в (24) вещественные, что позволяет использовать вещественную арифметику в производственных программах.

Замечание 15. Если мы возьмём (опять вещественную) бесконечную последовательность параметров $s_j = \lambda_j$, имеющую то же предельное (когда $n \rightarrow \infty$) распределение (в смысле слабой сходимости мер), что и в (24), мы получим тот же асимптотический (в смысле Коши—Адамара) множитель сходимости ρ . Это позволяет расширять множество параметров, переходя от n к $n+1$ (в стиле [Leja, 1957; Гончар, 1978; Saff, Totik, 1997; Baglama et al., 1998]).

Замечание 16. Адаптивный (не априорный) выбор параметров предложен в [Druskin et al., 2010].

ОПТИМИЗАЦИЯ ПОЛЮСОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЧАСТОТНЫХ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ ГАЛЁРКИНСКОГО ПОДХОДА НА РАЦИОНАЛЬНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

Надо найти экономичный способ решать уравнения из параметрического семейства уравнений

$$(A + i\omega I)u_\omega = \varphi, \quad \omega \in \mathbf{R}, \quad 0 < \omega_{\min} \leq |\omega| \leq \omega_{\max}, \quad A = A^T, A \geq 0.$$

Хотим найти хорошие интерполяционные частотные (по переменной ω) узлы (в заданном количестве n). Скалярная переформулировка: хотим интерполировать по переменной ω функцию

$$\frac{1}{\lambda + i\omega}, \quad \lambda, \omega \in \mathbf{R}, \quad \lambda \geq 0, \quad 0 < \omega_{\min} \leq |\omega| \leq \omega_{\max},$$

функциями

$$\frac{1}{\lambda + i\omega_j}, \quad 1 \leq j \leq n.$$

Мы опять используем СА, но на этот раз приходим к третьей задаче Золотарёва в $\bar{C}$ для плоского конденсатора с платами $[0, +\infty) \cup \{\infty\}$ и $S = i[\omega_{\min}, \omega_{\max}] \cup (-i)[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$. Качество решения задачи Золотарёва определяется величиной

$$\sigma_n(R_+, S) \equiv \min_{\lambda_1, \dots, \lambda_n, \omega_1, \dots, \omega_n} \frac{\max_{\lambda \geq 0} |r(\lambda)|}{\min_{z \in S} |r(z)|}, \quad r(z) = \prod_{j=1}^n \frac{z - \lambda_j}{z + i\omega_j}.$$

Положим

$$\frac{\omega_{\min}}{\omega_{\max}} = 1 - \kappa^2, \quad 0 < \kappa < 1, \quad \rho = \exp \left[-\frac{\pi K(\sqrt{1 - \kappa^2})}{2K(\kappa)} \right],$$

где K – полный эллиптический интеграл.

Теорема 3 [Knizhnerman et al., 2009; теорема 3.4]. Справедливы следующие утверждения:

$$\sigma_n(R_+, S) \geq \rho^n, \quad n \in \mathbb{N}, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{\sigma_n(R_+, S)} = \rho.$$

При четном n в качестве асимптотически (в смысле Коши—Адамара) лучших параметров ω_j можно взять заданные равенствами

$$\frac{\omega_j}{\omega_{\max}} = 1 - (1 - \kappa^2) \operatorname{sn} \left(\frac{2j-1}{n}, \kappa \right)^2, \quad \omega_{\frac{n}{2}+j} = -\omega_j, \quad j = 1, \dots, \frac{n}{2},$$

где sn – эллиптическая функция.

ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНОЕ ЗАМЕЧАНИЕ (ПРО НЕСИММЕТРИЧНЫЙ СЛУЧАЙ)

Замечание 17. Аналог м. Л. для случая несамосопряженных операторов (несимметричных матриц) A – метод Арнольди. Он отличается от м. Л. длинной рекурсией для построения ортонормального базиса и верхней хессенберговой матрицей коэффициентов рекурсии вместо симметричной трехдиагональной. Для анализа сходимости метода Арнольди вместо многочленов Чебышёва используются многочлены Фабера, построенные на числовом образе (хаусдорфовом множестве, поле значений) A .

Адаптация крыловского процесса к спектру бывает и в несамосопряженном случае.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 2. М.: Наука, 1974. 296 с.
 Гончар А.А. О задачах Е. И. Золотарева, связанных с рациональными функциями // Математический сборник. 1969. Т. 78, № 4. С. 640–654.

- Гончар А.А.** О скорости рациональной аппроксимации некоторых аналитических функций // Математический сборник. 1978. Т. 105, № 2. С. 147–163.
- Друскин В.Л., Книжнерман Л.А.** Спектральный дифференциально-разностный метод численного решения трехмерных нестационарных задач электроразведки // Известия АН СССР. Физика Земли. 1988. № 8. С. 63–74.
- Друскин В.Л., Книжнерман Л.А.** Два полиномиальных метода вычисления функций от симметричных матриц // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1989. Т. 29, № 12. С. 1763–1775.
- Друскин В.Л., Книжнерман Л.А.** Оценки ошибок в простом процессе Ланцоша при вычислении функций от симметричных матриц и собственных значений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1991. Т. 31, № 7. С. 970–983.
- Оселедец И.В.** Оценки снизу для сепарабельных аппроксимаций ядра Гильберта // Математический сборник. 2007. Т. 198, № 3. С. 137–144. doi:10.4213/sm1530.
- Парлетт Б.** Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М.: Мир, 1983. 384 с.
- Пашковский С.** Вычислительные применения многочленов и рядов Чебышева. М.: Наука, 1983. 384 с.
- Baglama J., Calvetti D., Reichel L.** Fast Leja points // ETNA (electronic only). 1998. Vol. 7. P. 124–140. <https://www.emis.de/journals/ETNA/vol.7.1998/pp124-140.dir/pp124-140.pdf>.
- Beckermann B., Reichel L.** Error estimates and evaluation of matrix functions via the Faber transform // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2009. Vol. 47 (5). P. 3849–3883. doi:10.1137/080741744.
- Druskin V., Knizhnerman L.** The Lanczos optimization of a splitting-up method to solve homogeneous evolutionary equations // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1992. Vol. 42 (2). P. 221–231. doi:10.1016/0377-0427(92)90076-A.
- Druskin V., Knizhnerman L.** Extended Krylov subspaces: approximation of the matrix square root and related functions // SIAM Journal on Matrix Analysis and Application. 1998. Vol. 19 (3). P. 755–771. doi:10.1137/S0895479895292400.
- Druskin V.L., Knizhnerman L.A., Ping Lee.** New spectral Lanczos decomposition method for induction modeling in arbitrary 3-D geometry // Geophysics. 1999. Vol. 64 (3). P. 701–706. doi:10.1190/1.1444579.
- Druskin V., Knizhnerman L., Zaslavsky M.** Solution of large scale evolutionary problems using rational Krylov subspaces with optimized shifts // SIAM Journal on Scientific Computing. 2009. Vol. 31 (5). P. 3760–3780. doi:10.1137/080742403.
- Druskin V., Lieberman C., Zaslavsky M.** On adaptive choice of shifts in rational Krylov subspace reduction of evolutionary problems // SIAM Journal on Scientific Computing. 2010. Vol. 32. P. 2485–2496. doi:10.1137/090774082.
- Greenbaum A.** Behavior of slightly perturbed Lanczos and conjugate-gradient recurrences // Linear Algebra and its Applications. 1989. Vol. 113. P. 7–63. doi:10.1016/0024-3795(89)90285-1.
- Knizhnerman L., Druskin V., Zaslavsky M.** On optimal convergence rate of the Rational Krylov Subspace Reduction for electromagnetic problems in unbounded domains // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2009. Vol. 47 (2). P. 953–971. doi:10.1137/080715159.
- Le Bailly B., Thiran J.P.** Optimal rational functions for the generalized Zolotarev problem in the complex plane // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2000. Vol. 38 (5). P. 1409–1424. doi:10.1137/S003614299936068.
- Leja F.** Sur certaines suites liées aux ensemble plan et leur application à la représentation conforme // Annales Polonici Mathematici. 1957. Vol. 4 (1). P. 8–13.

- Ruhe A.** The rational Krylov algorithm for nonsymmetric eigenvalue problems. III: Complex shifts for real matrices // BIT Numerical Mathematics. 1994. Vol. 34. P. 165–176. doi:10.1007/BF01935024.
- Saff E.B., Totik V.** Logarithmic potentials with external fields. Springer Berlin, Heidelberg, 1997. 505 p. doi:10.1007/978-3-662-03329-6.
- Simoncini V.** A new iterative method for solving large-scale Lyapunov matrix equations // SIAM Journal on Science Computing. 2007. Vol. 29 (3). P. 1268–1288. doi:10.1137/06066120X.
- Tyrtysnikov E.E.** Mosaic-skeleton approximations // Calcolo. 1996. Vol. 33. P. 47–57. doi:10.1007/BF02575706.

REFERENCES

- Baglama J., Calvetti D., Reichel L.** Fast Leja points // ETNA (electronic only). 1998. Vol. 7. P. 124–140. <https://www.emis.de/journals/ETNA/vol.7.1998/pp124-140.dir/pp124-140.pdf>.
- Bateman H., Magnus W., Oberhettinger F., Tricomi F.G., Bertin D., Fulks W.B., Harvey A.R., Thomsen D.L. Jr., Weber M.A., Whitney E.L., Erdélyi A.** Higher transcendental functions. Vol. 2. McGraw Hill Book Company, N.Y., 1953.
- Beckermann B., Reichel L.** Error estimates and evaluation of matrix functions via the Faber transform // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2009. Vol. 47 (5). P. 3849–3883. doi:10.1137/080741744.
- Druskin V.L., Knizhnerman L.A.** Spectral differential-difference method for numeric solution of three-dimensional nonstationary problems of electric prospecting // Izvestiya. Earth Physics. 1988. Vol. 24 (8), P. 641–648.
- Druskin V.L., Knizhnerman L.A.** Two polynomial methods of calculating functions of symmetric matrices // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1989. Vol. 29 (6). P. 112–121. doi:10.1016/S0041-5553(89)80020-5.
- Druskin V.L., Knizhnerman L.A.** Error bounds in the simple Lanczos procedure for computing functions of symmetric matrices and eigenvalues // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1991. Vol. 31, No. 7. P. 20–30.
- Druskin V., Knizhnerman L.** The Lanczos optimization of a splitting-up method to solve homogeneous evolutionary equations // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1992. Vol. 42 (2). P. 221–231. doi:10.1016/0377-0427(92)90076-A.
- Druskin V., Knizhnerman L.** Extended Krylov subspaces: approximation of the matrix square root and related functions // SIAM Journal on Matrix Analysis and Application. 1998. Vol. 19 (3). P. 755–771. doi:10.1137/S0895479895292400.
- Druskin V.L., Knizhnerman L.A., Ping Lee.** New spectral Lanczos decomposition method for induction modeling in arbitrary 3-D geometry // Geophysics. 1999. Vol. 64 (3). P. 701–706. doi:10.1190/1.1444579.
- Druskin V., Knizhnerman L., Zaslavsky M.** Solution of large scale evolutionary problems using rational Krylov subspaces with optimized shifts // SIAM Journal on Scientific Computing. 2009. Vol. 31 (5). P. 3760–3780. doi:10.1137/080742403.
- Druskin V., Lieberman C., Zaslavsky M.** On adaptive choice of shifts in rational Krylov subspace reduction of evolutionary problems // SIAM Journal on Scientific Computing. 2010. Vol. 32. P. 2485–2496. doi:10.1137/090774082.

- Gončar A.A.** Zolotarev problems connected with rational functions // Mathematics of the USSR-Sbornik. 1969. Vol. 7 (4). P. 623–635. doi:10.1070/SM1969v007n04ABEH001107.
- Gončar A.A.** On the speed of rational approximation of some analytic functions // Mathematics of the USSR-Sbornik. 1978. Vol. 34 (2). P. 131–145. doi:10.1070/sm1978v034n02abeh001152.
- Greenbaum A.** Behavior of slightly perturbed Lanczos and conjugate-gradient recurrences // Linear Algebra and its Applications. 1989. Vol. 113. P. 7–63. doi:10.1016/0024-3795(89)90285-1.
- Knizhnerman L., Druskin V., Zaslavsky M.** On optimal convergence rate of the Rational Krylov Subspace Reduction for electromagnetic problems in unbounded domains // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2009. Vol. 47 (2). P. 953–971. doi:10.1137/080715159.
- Le Bailly B., Thiran J.P.** Optimal rational functions for the generalized Zolotarev problem in the complex plane // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2000. Vol. 38 (5). P. 1409–1424. doi:10.1137/S003614299936068.
- Leja F.** Sur certaines suites liées aux ensemble plan et leur application à la représentation conforme // Annales Polonici Mathematici. 1957. Vol. 4 (1). P. 8–13.
- Oseledets I.V.** Lower bounds for separable approximations of the Hilbert kernel // Sbornik: Mathematics. 2007. Vol. 198, No. 3. P. 425–432. doi:10.1070/SM2007v198n03ABEH003842.
- Parlett B.N.** The symmetric eigenvalue problems. Philadelphia, SIAM, 1998.
- Paszkowski S.** Computational applications of Chebyshev polynomials and series [in Russian]. Nauka, Moscow, 1983. 384 p.
- Ruhe A.** The rational Krylov algorithm for nonsymmetric eigenvalue problems. III: Complex shifts for real matrices // BIT Numerical Mathematics. 1994. Vol. 34. P. 165–176. doi:10.1007/BF01935024.
- Saff E.B., Totik V.** Logarithmic potentials with external fields. Springer Berlin, Heidelberg, 1997. 505 p. doi:10.1007/978-3-662-03329-6.
- Simoncini V.** A new iterative method for solving large-scale Lyapunov matrix equations // SIAM Journal on Science Computing. 2007. Vol. 29 (3). P. 1268–1288. doi:10.1137/06066120X.
- Tyrtysnikov E.E.** Mosaic-skeleton approximations // Calcolo. 1996. Vol. 33. P. 47–57. doi:10.1007/BF02575706.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

КНИЖНЕРМАН Леонид Аронович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики РАН им. Г.И. Марчука. Основные научные интересы: вычислительная линейная алгебра – методы Ланцоша и Арнольди, метод расширенных подпространств Крылова, метод рациональных подпространств Крылова; численное решение уравнений в частных производных с помощью методов спектрального разложения Ланцоша и Арнольди и других линейно-алгебраических методов; теория рациональной аппроксимации и ее приложения к построению оптимальных разностных сеток для численного решения уравнений в частных производных; численное решение некорректных задач геофизики с помощью вариационной регуляризации и других методов.

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2023 г.,
одобрена после рецензирования 25 декабря 2023 г.,
принята к публикации 26 декабря 2023 г.