arXiv:2603.04350v1 [math.NA] 4 Mar 2026

EXP-PARADIAG：抛物型偏微分方程的时间并行指数积分器

Gobinda Garai 与 Nagaiah Chamakuri

Abstract. 本文提出 Exp-ParaDiag，这是一种将指数积分器的优势融入 ParaDiag 框架的新型时间并行方法。我们基于一阶和二阶精度的指数积分器开发并分析了 Exp-ParaDiag。我们证明了所提方法作为预条件不动点迭代以及在 GMRES 框架内作为预条件子时的收敛性。此外，我们扩展了 Exp-ParaDiag 公式，利用指数积分器实现六阶时间精度。所提方法还推广至非线性问题，并对其收敛性给出了严格证明。文中给出一系列数值实验，以验证理论结果，并说明所开发方法的稳健性与效率。

1. Introduction

抛物型偏微分方程（偏微分方程）是模拟热扩散、流体动力学和相变等时变现象的基础，但由于时间步进方法固有的顺序性，其数值求解往往需要大量计算资源。近几十年来，对高效求解器的追求推动了时间并行技术的发展，这些技术旨在将时间计算分配到多个处理器上，从而加速大规模系统的模拟。关于并行时间（PinT）方法的全面综述可见于 [10, 12]。在这些并行时间方法中，基于对角化的策略尤为突出。一种针对时空系统的基于对角化的方法最初在 [23], 中提出，并纳入了非均匀的可变时间步长。 [24] 中的研究为整体求解形式引入了块循环预条件子，所得系统可通过对角化求解。 [13] 在微分层面提出的 ParaDiag 框架基于对角化以及类周期初始条件，通过对整体系统中重构的时间离散矩阵进行对角化来实现时间并行性。ParaDiag 方法既可作为不动点迭代，也可作为广义最小残差（GMRES）方法中的预条件子，并已成功应用于各类偏微分方程，如 [20, 29, 22, 14] 所示。

与此同时，指数积分器（EI）已成为求解刚性偏微分方程的有力工具：它们通过矩阵指数精确积分系统的线性部分，从而有望在不牺牲稳定性的情况下采用更大的时间步长 [4, 5, 9]。此类方法的例子包括指数时间差分（ETD）格式和基于积分因子的方法

2020 *Mathematics Subject Classification.* 65M12, 65Y05, 65M15, 65F08.*Key words and phrases.* 指数积分器、时间并行方法、收敛性分析、抛物型模型、指数型 ParaDiag 方法、高阶时间积分。通讯作者：Gobinda Garai 和 Nagaiah Chamakuri。

。尽管这种方法具有诸多优势，但仍面临两大挑战：计算矩阵指数（尤其是在高维情形下），以及高效计算矩阵指数-向量乘积。大规模计算的最新进展、矩阵指数运算并行算法的发展 [6, 25]„ 以及用于近似矩阵指数的 Krylov 子空间技术的引入 [17, 26], ，使得将指数积分器应用于大规模问题成为可能。此外，高效计算矩阵指数作用于向量的数值方法也取得了显著进展 [1, 2]。这些发展推动了指数积分器在多种偏微分方程中的成功应用，包括 Navier–Stokes方程 [19], 、浅水方程 [16], 和相场模型 [18, 15], 等。

本文中的模型问题具有以下形式：

$$u_t = \mathcal{L}u + \mathcal{N}(u), \tag{1.1}$$

并满足适当的初边值条件，具体条件将在稍后针对所考虑的问题给出。这里， $\mathcal{L}$ 是一个线性算子， $\mathcal{N}(u)$ 表示一个非线性项。我们考虑算子 $\mathcal{L}$的以下形式：

$$\mathcal{L} := a\Delta - c, \tag{1.2}$$

其中， a 和 c是严格正数。我们假设 $\mathcal{N}$ 满足常数为 M的单侧利普希茨条件，即：

$$\langle \mathcal{N}(\mathbf{u}_1) - \mathcal{N}(\mathbf{u}_2), \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 \rangle \leqslant -M\|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\|^2, \quad \forall t \in [0, T], \quad \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \mathbb{R}^m, \tag{1.3}$$

其中， $\langle \cdot$和 $\cdot \rangle$ 表示标准欧几里得内积。

本研究提出了一种新颖的框架，将指数积分器的优势与ParaDiag策略相结合，从而形成指数 ParaDiag（Exp-ParaDiag）方法。通过在ParaDiag结构中融入指数时间离散，我们开发出一种可扩展的时空求解器，能够高效处理刚性和非刚性偏微分方程。我们从两个互补的角度考察所提出的Exp-ParaDiag方法：首先，将其作为独立的不动点迭代方案；其次，将其作为GMRES迭代求解器中的有效预条件子。此外，该框架经过系统扩展，可支持高阶时间离散方案和非线性偏微分方程，展现出其灵活性、稳健性，以及在求解复杂演化方程方面的广泛应用潜力。

本文的组织结构如下。第2节在微分层面介绍 Exp-ParaDiag方法，并分析其收敛行为。第3节分别将 Exp-ParaDiag作为预条件固定点方法和 GMRES 的预条件子进行研究，并给出相应的收敛结果。第4节重点将 Exp-ParaDiag扩展到二阶离散化方案，构造预条件固定点方法和 GMRES 预条件子，并进行收敛性分析。第5节将 Exp-ParaDiag公式扩展到高阶指数积分器。第6节将所提出的方法扩展到非线性问题。最后，第7节报告了一组全面的数值实验，旨在评估所提出方法的性能，展示其在一系列测试问题中的精度和稳健性。

2. Formulation and Convergence of Exp-ParaDiag

本节将在线性情形下介绍并分析基于指数积分器的 ParaDiag 方法。在微分层面，ParaDiag公式具有以下形式：

$$\begin{cases} u_t^k = \mathcal{L}u^k, & (x,t) \in \Omega \times (0,T], \\ u^k(x,0) = \alpha u^k(x,T) - \alpha u^{k-1}(x,T) + u_0(x), & x \in \Omega, \\ u^k = 0, & (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T], \end{cases} \tag{2.1}$$

其中， α 是自由参数， k 是迭代次数。在空间上采用中心有限差分法，将区间均匀离散，网格尺寸为 h ，内点数为 N_x ；在时间上采用一阶指数积分器，时间步长均匀取为 Δt ， $N_t = T/\Delta t,$ ，即可得到与（ 2.1 ）对应的如下全离散迭代系统：

$$\begin{cases} \mathbf{u}_n^k = A\mathbf{u}_{n-1}^k, \text{where } A = \exp(\Delta t \mathcal{L}_h), \text{and } n = 1, 2, \cdots, N_t, \\ \mathbf{u}_0^k = \alpha \mathbf{u}_{N_t}^k - \alpha \mathbf{u}_{N_t}^{k-1} + \mathbf{u}_0, \end{cases} \tag{2.2}$$

其中， $\mathbf{u}_n$ 表示第 n 个时间步的解。这里， $\mathcal{L}_h = a\Delta_h - cI_x \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$ ，其中 Δ_h表示对应于齐次狄利克雷边界条件的离散拉普拉斯算子， I_x 是单位矩阵。与（2.2）对应的时空系统为

$$(I_t \otimes I_x - C_0^\alpha \otimes A)\,\mathcal{U}^k = \mathbf{b}^{k-1}, \tag{2.3}$$

其中， $\mathcal{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ \cdots, \ \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x N_t}$ ， $\mathbf{b}^{k-1} = \left(-\alpha A\mathbf{u}_{N_t}^{k-1} + A\mathbf{u}_0, \ \mathbf{0}, \ \cdots, \ \mathbf{0}\right)^\top \in \mathbb{R}^{N_x N_t}$ 以及

$$C_0^\alpha = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & \alpha \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N_t \times N_t}. \tag{2.4}$$

我们注意到，在 (2.3) 中，整体时间矩阵 C_0^α 与采用后向欧拉（BE）格式作为时间积分器时所得到的矩阵不同。此外，当前表述修改了时间耦合结构，从而得到与经典的基于 BE 的表述 [13, 24, 20, 29, 22]不同的时空系统。α-循环矩阵 C_0^α 是可对角化的，如 [3], 所示，并可表示为形式$C_0^\alpha = \mathcal{P}_\alpha \mathcal{D}_0 \mathcal{P}_\alpha^{-1}$ ，其中 $\mathcal{P}_\alpha = \Gamma_\alpha^{-1}\mathbb{F}^*$ ，且 $\Gamma_\alpha = \mathbf{diag}\left(1, \alpha^{1/N_t}, \ldots, \alpha^{(N_t-1)/N_t}\right)$ 以及 $\mathbb{F} = \frac{1}{\sqrt{N_t}}\left[\omega_0^{(l_1-1)(l_2-1)}\right]_{l_1,l_2=1}^{N_t}$ ，其中 $\omega_0 = e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N_t}}$. $\mathcal{D}_0$ 的对角元素记为 $\lambda_{0,n}$，由 $\lambda_{0,n} = \alpha^{\frac{1}{N_t}} e^{\frac{2(n-1)\pi \mathrm{i}}{N_t}}$ 显式给出，其中 $n = 1, 2, \cdots, N_t$。利用 C_0^α 的可对角化性，我们将时空系统 $(I_t \otimes I_x - C_0^\alpha \otimes A)$ 分解为 $(\mathcal{P}_\alpha \otimes I_x)\,(I_t \otimes I_x - \mathcal{D}_0 \otimes A)\,(\mathcal{P}_\alpha^{-1} \otimes I_x)$。于是，系统 (2.3) 可通过以下三个步骤求解：

$$\begin{aligned} &\text{Step-(1)} \quad S_1 = (\mathbb{F} \otimes I_x)\,(\Gamma_\alpha \otimes I_x)\,\mathbf{b}^{k-1}, \\ &\text{Step-(2)} \quad S_{2,n} = \left(I_x - \lambda_{0,n} A\right)^{-1} S_{1,n}, \quad n = 1, 2, \ldots, N_t, \\ &\text{Step-(3)} \quad \mathcal{U}^k = \left(\Gamma_\alpha^{-1} \otimes I_x\right)(\mathbb{F}^* \otimes I_x)\, S_2. \end{aligned}$$

第一步和第三步仅涉及矩阵向量乘法，可利用快速傅里叶变换（快速傅里叶变换）高效执行。计算量最大的部分是第二步；不过，它可在 N_t 个时间步长上自然并行化，因而非常适合并行实现。下一节讨论所提方法的收敛行为。

2.1. 离散情形下的收敛。为观察迭代过程中的误差收缩，我们将全离散误差记为 $\mathbf{e}_n^k = \mathbf{u}_n^k - \mathbf{u}_n$。于是，我们得到以下误差关系

$$\begin{cases} \mathbf{e}_n^k = A\mathbf{e}_{n-1}^k, \text{for } n = 1, 2, \cdots, N_t, \\ \mathbf{e}_0^k = \alpha \mathbf{e}_{N_t}^k - \alpha \mathbf{e}_{N_t}^{k-1}. \end{cases} \tag{2.5}$$

利用 $(2.5)_1$ 在 $(2.5)_2$ 中，我们得到

$$\mathbf{e}_0^k = \frac{-\alpha e^{T\mathcal{L}_h^{\mathrm{rd}}}}{1 - \alpha e^{T\mathcal{L}_h^{\mathrm{rd}}}} \mathbf{e}_0^{k-1}. \tag{2.6}$$

由于 $\mathcal{L}_h$ 可正交对角化，我们有 $\mathcal{L}_h = V_h D_h V_h^{-1}$，其中 $D_h = \mathbf{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{N_x})$。对于 $j = 1,\ 2, \cdots, N_x$，λ_j 满足 $\lambda_j \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \subset (-\infty, 0)$，其中 $\lambda_{\min} = \mathbf{min}_{1 \leqslant j \leqslant N_x} \lambda_j$ 且 $\lambda_{\max} = \mathbf{max}_{1 \leqslant j \leqslant N_x} \lambda_j$。利用 $\mathcal{L}_h$ 的可对角化性，我们有 $e^{T\Delta_h} = V_h e^{TD_h} V_h^{-1}$。接着由 (2.6) 并取范数，得到

$$\| V_h \mathbf{e}_0^k \| \leqslant \max_{z \in (-\infty, 0)} |\psi(z)| \, \| V_h \mathbf{e}_0^{k-1} \|, \tag{2.7}$$

其中 $\psi(z) = \frac{\alpha e^z}{1 - \alpha e^z}$ 满足 $z = \lambda T$，且 $\lambda \in \sigma(\mathcal{L}_h)$（此处 $\sigma(\mathcal{L}_h)$表示$\mathcal{L}_h$的谱）。因此，Exp-ParaDiag 的收敛取决于量 $\mathbf{max}_{z \in (-\infty, 0)} |\psi(z)|$。显然，$|\psi(z)| \leqslant \frac{|\alpha| e^z}{1 - |\alpha| e^z} \leqslant \frac{|\alpha| e^{\lambda_{\max} T}}{1 - |\alpha| e^{\lambda_{\max} T}}$。由于 V_h 是正交的，由 (2.7) 得

$$\| \mathbf{e}_0^k \| \leqslant \left(\frac{|\alpha| e^{\lambda_{\max} T}}{1 - |\alpha| e^{\lambda_{\max} T}} \right) \| \mathbf{e}_0^{k-1} \| . \tag{2.8}$$

上述讨论总结为以下定理。

定理 2.1。Exp-ParaDiag方法的离散误差 $\mathbf{e}_n^k$ 满足以下误差收缩关系

$$\max_{1 \leqslant n \leqslant N_t} \| \mathbf{e}_n^k \| \leqslant \left(\frac{|\alpha| e^{\lambda_{\max} T}}{1 - |\alpha| e^{\lambda_{\max} T}} \right)^k \| \mathbf{e}_0^0 \| . \tag{2.9}$$

证明。对 (2.5) 取范数$_1$, , 得到 $\| \mathbf{e}_n^k \| \leqslant \| A \| \| \mathbf{e}_{n-1}^k \| < \| \mathbf{e}_{n-1}^k \| < \| \mathbf{e}_0^k \|$，因为 $\| A \| < 1$。接下来，在上述不等式中使用 (2.8)，即可得到所需结果。□

注 2.2. 定理 2.1 显然适用于均匀网格上的 $\mathcal{L}_h$ 的高维情形，因为特征值的性质在高维情形下保持不变。

2.2. 自由参数 α 的优化。实际应用中，自由参数 α 通常取接近零的值，但并没有明确定义的最优选择。这里，我们通过对与 (2.1) 对应的误差方程作空间傅里叶变换，介绍一种优化 α 的方法。令 $\widehat{e}^k(t) = \widehat{u}(t) - \widehat{u}^k(t)$，可得傅里叶空间中的以下误差关系：

$$\widehat{e}^k(0) = \left(\frac{-\alpha e^{-(a\omega^2+c)T}}{1-\alpha e^{-(a\omega^2+c)T}} \right) \widehat{e}^{k-1}(0), \tag{2.10}$$

其中，ω 是傅里叶变量。因此，为了优化 α，我们旨在求解以下极小极大问题：

$$\alpha_{\text{opt}} := \min_{\alpha\in(0,1)} \max_{\omega\in[-\omega_{\max},\omega_{\max}]} \left| \frac{-\alpha e^{-(a\omega^2+c)T}}{1-\alpha e^{-(a\omega^2+c)T}} \right|, \tag{2.11}$$

其中，$\omega_{\max} = \frac{\pi}{h}$ 是数值网格中的最高傅里叶频率。我们通过使用 `fminsearch`数值求解极小极大问题 (2.11)，得到 α_{opt}。在更高维度下，求取 α_{opt}的公式很直接。

3. Preconditioner for $\mathcal{O}(\Delta t)$ Scheme

本节将第 2 节概述的过程表述为预条件定点 Richardson 迭代。将 (2.2) 中描述的一阶精度指数积分器应用于模型问题 $u_t = \mathcal{L}u$ 的线性部分，并施加齐次狄利克雷边界条件，可得到以下整体系统：

$$\mathcal{Q}\mathbf{u} = \mathbf{f}, \text{where } \mathcal{Q} := I_t \otimes I_x - C_0 \otimes A, \text{with } A = \exp(\Delta t \mathcal{L}_h), \tag{3.1}$$

其中 $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x N_t}$，$\mathbf{f} = (A\mathbf{u}_0, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$，且 C_0 是 C_0^α，其中 $\alpha = 0$ 见 (2.4)。用于求解整体系统 (3.1) 的预条件迭代格式如下：

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \mathbf{s}^k,\ \mathcal{Q}_\alpha \mathbf{s}^k = \mathbf{f} - \mathcal{Q}\mathbf{u}^k, \text{where } \mathcal{Q}_\alpha := I_t \otimes I_x - C_0^\alpha \otimes A. \tag{3.2}$$

现在，我们旨在以 PinT 方式求解残差系统 $\mathcal{Q}_\alpha \mathbf{s}^k = \mathbf{f} - \mathcal{Q}\mathbf{u}^k$，如下所述：

$$\begin{cases} \text{Step-(a):} & S_a = (\mathbb{F} \otimes I_x)\left[(\Gamma_\alpha \otimes I_x)\left(\mathbf{f} - \mathcal{Q}\mathbf{u}^k\right)\right], \\ \text{Step-(b):} & S_{b,n} = \left(I_x - \lambda_{0,n} A\right)^{-1} S_{a,n}, \quad n = 1, 2, \ldots, N_t, \\ \text{Step-(c):} & \mathbf{s}^k = \left(\Gamma_\alpha^{-1} \otimes I_x\right)(\mathbb{F}^* \otimes I_x) S_{b,n}, \end{cases} \tag{3.3}$$

其中，涉及的矩阵定义已在前文给出。接下来，我们分析不动点迭代过程的误差估计。

3.1. 预条件系统的特征值估计。令第 k 次迭代的误差为 $\mathbf{e}^k := \mathbf{u} - \mathbf{u}^k$。则有如下误差关系。

$$\mathbf{e}^k = (I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})\mathbf{e}^{k-1}, \tag{3.4}$$

其中 $I_{xt} \in \mathbb{R}^{N_x N_t \times N_x N_t}$ 是单位矩阵。将 $\mathbf{d}^k := \mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k$ 记为相邻两次迭代之间的差，则有 $\mathbf{d}^k = (I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})\mathbf{d}^{k-1}$。将 $\mathbf{r}^k := \mathbf{f} - \mathcal{Q}\mathbf{u}^k$记为残差，可得 $\mathbf{r}^k = (I_{xt} - \mathcal{Q}\mathcal{Q}_\alpha^{-1})\mathbf{r}^{k-1}$。但 $I_{xt} - \mathcal{Q}\mathcal{Q}_\alpha^{-1}$与 $I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$相似，

因此二者的谱必然相同。所以，只需研究$I_{xt}-\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$的谱分布。现在，利用 A的可对角化性，可得

$$\mathcal{Q}=(I_t\otimes V_h)\underbrace{\left(I_t\otimes I_x-C_0\otimes e^{\Delta tD_h}\right)}_{\bar{\mathcal{Q}}}\left(I_t\otimes V_h^{-1}\right),$$
$$\mathcal{Q}_\alpha=(I_t\otimes V_h)\underbrace{\left(I_t\otimes I_x-C_0^\alpha\otimes e^{\Delta tD_h}\right)}_{\bar{\mathcal{Q}}_\alpha}\left(I_t\otimes V_h^{-1}\right).$$

因此， $\mathcal{Q}$ 与 $\bar{\mathcal{Q}}$相似，且 $\mathcal{Q}_\alpha$ 与 $\bar{\mathcal{Q}}_\alpha$相似。因此，只需研究 $I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$的谱。

定理3.1。 $I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 的谱上界为 $\frac{|\alpha|e^{\lambda_{\max}T}}{1-|\alpha|e^{\lambda_{\max}T}}$。

证明。注意，项 $I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 可以写成 $I_{xt}-\left(I_{xt}+\bar{\mathcal{Q}}^{-1}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha-\bar{\mathcal{Q}})\right)^{-1}$。接下来，块托普利兹矩阵 $\mathcal{Q}$ 的逆以及低秩矩阵 $\mathcal{H}:=\mathcal{Q}_\alpha-\mathcal{Q}$ 的结构如下:

$$\bar{\mathcal{Q}}^{-1}=\begin{bmatrix} I_x & & & & \\ E & I_x & & & \\ E^2 & E & I_x & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ E^{N_t-1} & E^{N_t-2} & \cdots & E & I_x \end{bmatrix},\mathcal{H}=\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & -\alpha E \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

其中 $E=e^{\Delta tD_h}$。经过直接计算可得 $I_{xt}+\bar{\mathcal{Q}}^{-1}\mathcal{H}$ 和 $\left(I_{xt}+\bar{\mathcal{Q}}^{-1}\mathcal{H}\right)^{-1}$ 如下

$$I_{xt}+\bar{\mathcal{Q}}^{-1}\mathcal{H}=\begin{bmatrix} I_x & & & -\alpha E \\ & I_x & & -\alpha E^2 \\ & & I_x & -\alpha E^3 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & I_x-\alpha E^{N_t} \end{bmatrix},\left(I_{xt}+\bar{\mathcal{Q}}^{-1}\mathcal{H}\right)^{-1}=\begin{bmatrix} I_x & & & \frac{\alpha E}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & I_x & & \frac{\alpha E^2}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & & I_x & \frac{\alpha E^3}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}} \end{bmatrix}. \tag{3.5}$$

因此，迭代矩阵 $I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 具有如下形式

$$I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}=\begin{bmatrix} \mathbf{0} & & & -\frac{\alpha E}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & \mathbf{0} & & -\frac{\alpha E^2}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & & \mathbf{0} & -\frac{\alpha E^3}{I_x-\alpha E^{N_t}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & I_x-\frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}} \end{bmatrix}. \tag{3.6}$$

因此， $I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 的非零谱为 $\sigma\left(I_x-\frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}}\right)$。从而，$I_{xt}-\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 的谱半径为 $\max_{\lambda\in\sigma(\mathcal{L}_h)}\left|1-\frac{1}{1-\alpha e^{\lambda T}}\right|\leqslant\frac{|\alpha|e^{\lambda_{\max}T}}{1-|\alpha|e^{\lambda_{\max}T}}$。定理得证。 □

注 3.2. 定理3.1 可自然地推广到更高的空间维度，其有效性不会受到维度增加的影响。

3.2. GMRES设置下的收敛性分析。本节考察 GMRES方法应用于线性系统 (3.1) 时的收敛行为，其中预条件子为 $\mathcal{Q}_\alpha$。我们的主要目标是了解在整体求解框架中，该预条件子的选择如何影响 GMRES 的性能和收敛性质。为此，我们首先关注预条件子具有单位加低秩矩阵结构的情形。这种特殊结构有助于预条件系统的收敛。

定理 3.3。应用于预处理系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\mathbf{u} = \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathbf{f}$ 的 GMRES方法至多经过 $N_x + 1$ 迭代次数后收敛。

证明。按照定理3.1中的步骤，可以很容易地观察到，$I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 具有与（3.6）中完全相同的形式，只是 E 的新定义为 $E = \exp(\Delta t\mathcal{L}_h)$。显然，$I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 的秩为 N_x（因为最后一列中的块均可逆）。因此，预处理系统是单位矩阵加上一个秩为 N_x的低秩矩阵。因此，GMRES至多经过 $N_x + 1$ 迭代次数后收敛。□

尽管定理 3.3 保证了预条件GMRES方法的收敛性，但它并未给出一个精确的界，因为迭代次数会随着N_x增加。为了解决这一问题，我们考虑一种将特征值聚集性和预处理系统的可对角化性纳入考量的分析。具体而言，我们观察到预条件矩阵 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 的特征值聚集在 1 附近。以下引理确立了这种聚集性。我们将预处理残差记为 $\mathbf{r}_{g,\ \alpha}^{k} = \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathbf{f} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\mathbf{u}^k$，经过 k次迭代后。

引理3.4. 预条件系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 的特征值集中在1附近，半径为$\frac{\alpha}{1-\alpha}$。

证明。注意到 $\sigma\left(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\right) = \{1\} \cup \sigma\left(\frac{1}{I_x - \alpha E^{N_t}}\right)$ 与 $E = \exp(\Delta t\mathcal{L}_h)$。于是我们有$\max_{\lambda\in\sigma\left(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\right)} |\lambda - 1| = \max_{\lambda\in\{1\}\cup\sigma\left(\frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}}\right)} |\lambda - 1| \leqslant \max_{\lambda\in\sigma\left(\frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}}\right)} |\lambda - 1| \leqslant \max_{\lambda\in\sigma(\mathcal{L}_h)} \left|\frac{\alpha e^{\lambda T}}{1-\alpha e^{\lambda T}}\right| \leqslant \frac{\alpha}{1-\alpha}$。因此得该引理。□

引理 3.5. 预条件系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 是可对角化的。

证明。利用 A 的可对角化性，系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 可写为 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} = (I_t \otimes V_h)\,\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}\left(I_t \otimes V_h^{-1}\right)$，其中 $\bar{\mathcal{Q}} = \left(I_t \otimes I_x - C_0 \otimes e^{\Delta t D_h}\right)$ 和 $\bar{\mathcal{Q}}_\alpha = \left(I_t \otimes I_x - C_0^\alpha \otimes e^{\Delta t D_h}\right)$。现在很容易看出，系统 $\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}$ 可对角化为 $\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}} = \bar{V}\bar{D}\bar{V}^{-1}$，其中

$$\bar{V} = \begin{bmatrix} I_x & & & \frac{1}{E^{N_t-1}} \\ & I_x & & \frac{1}{E^{N_t-2}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & I_x & \frac{1}{E} \\ & & & I_x \end{bmatrix}, \bar{D} = \begin{bmatrix} I_x & & & \\ & I_x & & \\ & & \ddots & \\ & & & I_x \\ & & & & \frac{1}{I_x - \alpha E^{N_t}} \end{bmatrix}.$$

这里$E = e^{\Delta t D_h}$，其中 D_h 是对应于 $\mathcal{L}_h$的对角矩阵。因此 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$可对角化，且 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} = \widehat{V}\bar{D}\widehat{V}^{-1}$，其中 $\widehat{V} = (I_t \otimes V_h)\,\bar{V}$。□

定理 3.6。设将GMRES方法应用于预条件系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\mathbf{u} = \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathbf{f}$。则残差满足误差估计 $\| \mathbf{r}_{g,\alpha}^k \| \leqslant \kappa(\widehat{V}) \left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right)^k \| \mathbf{r}_{g,\alpha}^0 \|$ 其中 $\kappa(\widehat{V}) = \| \widehat{V} \| \| \widehat{V}^{-1} \|$。

证明。由引理 3.5，我们得到预条件系统的可对角化性。然后，根据经典理论，对于预处理GMRES残差，我们有 $\| \mathbf{r}_{g,\ \alpha}^k \| \leqslant \kappa(\widehat{V}) \min_{p \in P_k(0)} \max_{1 \leqslant i \leqslant N_x} |p(\lambda_i)| \| \mathbf{r}_{g,\ \alpha}^0 \|$，其中 P_k 是次数不超过 k 的多项式集合。随后，利用 [27, 第6.11] 节和引理3.4，即可得到所需结果。□

注 3.7。我们简要考察当算子 $\mathcal{L}$ 包含对流项，即 $\mathcal{L} = a\Delta u - \mathbf{b}\nabla u - cu$ 时，预处理GMRES的收敛行为。对所涉及的算子采用周期边界条件和中心差分离散，我们得到离散的 $\mathcal{L}_h$，它虽非对称但可对角化。由定理 3.3的证明可见，即使算子 $\mathcal{L}_h$ 包含对流项，该论证仍然成立，因此定理 3.3依然成立。类似地，引理 3.4 和 3.5在此情形下同样可以证明，因而定理 3.6仍然有效。

尽管定理 3.6 给出了收敛估计，但在实际中准确估计条件数 κ 仍然很有挑战。这促使我们考虑另一种框架来建立 GMRES 的收敛界。具体而言，我们利用 Elman [8]的结果。沿着这一思路，我们证明，只要参数 α 选得足够小，预处理GMRES方法的收敛率就与网格参数无关。这种网格无关收敛确保了即使离散化不断细化，迭代求解器仍然高效。在证明主要结果之前，我们先给出几个辅助引理。

引理 3.8. 函数 $g_\alpha(y) = 4(1-\alpha y^{N_t})(1-y^2) - \alpha^2(y^2 - y^{2N_t})$ 在满足 $y \in (0,1)$ 的 $\alpha \in (0, \frac{2}{1+\sqrt{2}})$ 下严格为正。

证明。将函数 g_α 视为关于 α 的二次函数，可得 $g_\alpha = -\xi_1\alpha^2 - 4\xi_2\alpha + 4\xi_3$，其中 $\xi_1 = (y^2 - y^{2N_t})$, $\xi_2 = y^{N_t}(1-y^2)$ 且 $\xi_3 = (1-y^2)$。这是关于 α 的开口向下的二次函数。当 $\alpha = 0$ 时，$g_\alpha(0) = 4(1-y^2) > 0$，因此对于每个固定的 y，有两个实根 $\alpha_1(y) < 0 < \alpha_2(y)$，且当且仅当 $\alpha \in (\alpha_1(y)$ 时，$g_\alpha(y) > 0\ \alpha_2(y))$. 因此，为了使 g_α 对所有 $y \in (0,1)$ 均为正，我们需要 $\alpha < \inf_{y\in(0,1)} \alpha_2(y)$。直接计算可得 $\alpha_2(y) = \frac{2\xi_3}{\sqrt{\xi_2^2 + \xi_1\xi_3} + \xi_2} = \frac{2}{y^{N_t} + y\sqrt{\sum_{j=0}^{N_t-1} y^{2j}}}$. 容易看出，$\alpha_2(y)$ 单调递减，且 $\inf_{y\in(0,1)} \alpha_2(y) = \frac{2}{1+\sqrt{N_t}}$。当 $N_t \geqslant 2$ 时，我们得到所需结果。

□

我们将任意方阵 Z 的对称部分定义为 $\mathrm{H}(Z) = \frac{Z+Z^*}{2}$。

引理 3.9. 对于 $\alpha \in (0, \frac{2}{1+\sqrt{2}})$，$\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})$ 是正定的。

证明。注意到 $\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}) = (I_t \otimes V_h)\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})\left(I_t \otimes V_h^{-1}\right)$。因此，$\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})$ 与 $\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})$ 相似，故谱必然相同。$\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})$ 具有以下形式

$$\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}}) := \begin{bmatrix} \mathfrak{A} & \mathfrak{B} \\ \mathfrak{B}^\top & \mathfrak{D} \end{bmatrix}, \tag{3.7}$$

$$\text{where}\,\mathfrak{A} = \begin{bmatrix} I_x & & & \\ & I_x & & \\ & & \ddots & \\ & & & I_x \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{J\times J}, \mathfrak{B} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha E}{2(I_x-\alpha E^{N_t})} \\ \frac{\alpha E^2}{2(I_x-\alpha E^{N_t})} \\ \vdots \\ \frac{\alpha E^{N_t-1}}{2(I_x-\alpha E^{N_t})} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{J\times N_x}, \text{and } \mathfrak{D} = \frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}}, \tag{3.8}$$

其中 $J = (N_t-1)N_x$。这里我们的目标是证明 $\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})$ 正定。为此，只需证明 $\mathfrak{A} \succ 0$ 以及舒尔补 $\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})/\mathfrak{A} := \mathfrak{D} - \mathfrak{B}^\top\mathfrak{A}^{-1}\mathfrak{B} \succ 0$。显然，$\mathfrak{A} \succ 0$。接下来证明 $\mathrm{H}(\bar{\mathcal{Q}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{Q}})/\mathfrak{A} \succ 0$。现在 $\mathfrak{D} - \mathfrak{B}^\top\mathfrak{A}^{-1}\mathfrak{B} = \frac{1}{I_x-\alpha E^{N_t}} - \frac{\alpha^2}{4}\frac{1}{(I_x-\alpha E^{N_t})^2}\left(E^2 + E^4 + \cdots + \left(E^{N_t-1}\right)^2\right)$。由于 $\mathfrak{D} - \mathfrak{B}^\top\mathfrak{A}^{-1}\mathfrak{B}$ 的右端是对角矩阵，其特征结构具有如下形式：$\zeta(\lambda) = \frac{1}{1-\alpha e^{\lambda T}} - \frac{\alpha^2}{4}\left(\frac{1-e^{2\lambda T}}{1-e^{2\lambda\Delta t}} - 1\right)\frac{1}{(1-\alpha e^{\lambda T})^2}$。现在 $\zeta(\lambda)$ 可以写成 $\zeta(\lambda) = \frac{g_\alpha(\lambda)}{4(1-\alpha e^{\lambda T})^2(1-e^{2\lambda\Delta t})}$。因此，只需证明 $g_\alpha(\lambda) > 0$；利用变量替换 $y = e^{\lambda\Delta t}$，由引理 3.8 可知这一点成立。□

引理 3.10. 对于 $m = 1$、2、$\cdots$，矩阵 E^m 是正定的，其中 $E = \exp(\Delta t\mathcal{L}_h)$。

引理 3.10 的证明是直接的。

引理 3.11. 对于 $y \in (0, 1)$，函数 $\alpha_\pm(y) := \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha y}{1-\alpha y} \pm \sqrt{\tau(y)}\right)$，其中 $\tau(y) = \frac{\alpha^2}{(1-\alpha y)^2}\left(\sum_{j=1}^{N_t-1} y^{2j} + y^2\right)$ *satisfies* $|\alpha_\pm(y)| < 1$ *for* $\alpha \in (0, \frac{2}{3+\sqrt{2}})$.

证明。化简 $\alpha_\pm(y)$，我们得到 $\alpha_\pm(y) = \frac{\alpha}{2(1-\alpha y)}\left(y \pm \sqrt{\tau(y)}\right)$。显然，对所有 $y \in (0, 1)$，$\sqrt{\tau(y)} \geqslant y$。因此，我们有 $y + \sqrt{\tau(y)} \geqslant 0$ 和 $y - \sqrt{\tau(y)} \leqslant 0$。此外，容易看出 $y + \sqrt{\tau(y)}$ 关于 y 递增，而 $y - \sqrt{\tau(y)}$ 关于 y 递减。由于 $\frac{\alpha}{1-\alpha y}$ 关于 y 严格递增，且对 $\alpha > 0$ 为正，故 $\alpha_+(y)$ 单调递增，$\alpha_-(y)$ 单调递减。因此 $\sup_{y\in(0,1)} \alpha_+(y) = \frac{\alpha}{2(1-\alpha)}(1+\sqrt{N_t})$ 且 $\inf_{y\in(0,1)} \alpha_-(y) = \frac{\alpha}{2(1-\alpha)}(1-\sqrt{N_t})$。于是 $|\alpha_+(y)| < 1 \iff 0 < \alpha < \frac{2}{3+\sqrt{N_t}}$，以及 $|\alpha_-(y)| < 1 \iff \alpha < \frac{2}{1+\sqrt{N_t}}$。从而 $|\alpha_\pm(y)| < 1 \iff 0 < \alpha < \frac{2}{3+\sqrt{N_t}}$。由于 $N_t \geqslant 2$，我们得到所需结果。□

引理 3.12. 对于 $\alpha \in (0, \frac{2}{3+\sqrt{2}})$，有 $\| \mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt}) \| < 1$。

证明。由于 $\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt})$ 是对称的，因此谱估计就足够了。现在，$\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt})$ 可以写成 $\mathrm{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt}) = \mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}$，其中 $\mathbb{D} = \mathrm{blkdiag}(0, 0, \cdots, 0, G_-, G_+)$。

这些分块 $G_\pm$ 由 $G_\pm = \frac{1}{2}\left(\Gamma_{N_t} - I_{xt} \pm \sqrt{\sum_{j=1}^{N_t-1}\Gamma_j^2 + (I_{xt}-\Gamma_{N_t})^2}\right)$给出，其定义为

$\Gamma_j = \frac{\alpha E^j}{I_{xt}-\alpha E^{N_t}}$，适用于 $j = 1$、2、$\cdots$、$N_t - 1$和 $\Gamma_{N_t} = \frac{1}{I_{xt}-\alpha E^{N_t}}$。平方根内的矩阵是正定的。这由 Γ_j 项的诺伊曼级数展开得出；根据引理 3.10，由于$\|\alpha E^{N_t}\| < 1$，该展开是有效的。此外，引理 3.10 还证明了 powers of E 的正定性，从而确保每个 Γ_j 均作出正贡献。因此，平方根是良定义的。利用 E的可对角化性，可以很容易地观察到，$G_\pm$ 是可对角化的。因此，$G_\pm$ 的特征值具有如下形式$\alpha_\pm(y) := \frac{1}{2}\left(\frac{1}{1-\alpha y} - 1 \pm \sqrt{\tau(y)}\right)$，其中 $y = e^{\lambda\Delta t}$，且 $\tau(y) = \frac{\alpha^2}{(1-\alpha y)^2}\sum_{j=1}^{N_t-1} y^{2j} + \left(\frac{\alpha y}{1-\alpha y}\right)^2$。然后，应用引理 3.11即可得到所需结果。□

引理 3.13（参见 [8], 定理 5.4, [7]）。设 Λ 为一个实方阵，满足 $\mu(\Lambda) > 0$，其中$\mu(\Lambda)$表示 H(Λ)的最左特征值。使用 GMRES 求解 Λy =c 时，第 k 次迭代的残差 $\mathbf{r}_g^k = \mathbf{c} - \Lambda\mathbf{y}^k$ 满足 $\| \mathbf{r}_g^k \| \leqslant \left(1 - \frac{\mu(\Lambda)^2}{\|\Lambda\|^2}\right)^{k/2} \| \mathbf{r}_g^0 \|$.

定理 3.14。设 GMRES 应用于 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\mathbf{u} = \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathbf{f}$。则 ^k_g 的残差 $\mathbf{r}_{,\ \alpha} = \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathbf{f} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\mathbf{u}^k$ 在 k 次迭代后满足 $\| \mathbf{r}_{g,\ \alpha}^k \| \leqslant (4\alpha(1-\alpha))^{k/2} \| \mathbf{r}_{g,\ \alpha}^0 \|$，其中 $\alpha \in (0、\ \frac{2}{3+\sqrt{2}})$。

证明。我们对预条件系统应用引理 3.13。为此，$\mu(\mathbf{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}))$ 必须为正，这由引理 3.9 对于 $\alpha \in (0, \frac{2}{1+\sqrt{2}})$ 保证。现在需要估计$\mu(\mathbf{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}))^2$ 和 $\| \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} \|^2$。项 $\mathbf{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})$ 可改写为 I_{xt}+H $(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt})$。利用引理 3.12，我们有 $\| \mathbf{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}) \| \geqslant \| I_{xt} \| - \| \mathbf{H}$ $(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt}) \| \geqslant \| I_{xt} \| - \|\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} - I_{xt} \| \geqslant 1 - \frac{\alpha}{1-\alpha} = \frac{1-2\alpha}{1-\alpha}$。因此，对于 $\alpha \in (0, \frac{2}{3+\sqrt{2}})$，有 $\mu($ $\mathbf{H}(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}))^2 \geqslant \left(\frac{1-2\alpha}{1-\alpha}\right)^2$。
我们有 $I_{xt} - \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} = L_r$，其中 L_r 与 (3.6) 中的结构相同，且 $E = \exp(\Delta t\Delta_h)$。于是 $\| \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} \| = \sqrt{\rho\left[(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})(\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q})^\top\right]} = \sqrt{\rho\left(I_{xt} - L_r - L_r^\top + L_r L_r^\top\right)}$，其上界进一步可由 $1 + \rho(L_r)$给出。现在 $\sigma(L_r) = \{0\} \cup \sigma\left(I_x - \frac{1}{I_x - \alpha E^{N_t}}\right)$。因此 $\rho(L_r)$的上界为$\frac{\alpha}{1-\alpha}$。所以，我们得到 $\| \mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q} \| \leqslant \frac{1}{1-\alpha}$。因此，项 $1 - \frac{\mu(\mathrm{H}\ (\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}))^2}{\|\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}\|^2} \leqslant 1 - (1 - 2\alpha)^2 = 4\alpha(1-\alpha)$。由此得证。□

4. Preconditioner for $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$ Scheme

本节中，我们将构造一种基于时间二阶后向差分公式（BDF2）的预条件子。模型问题（1.1）线性部分的二阶精度指数积分器为

$$\mathbf{u}_n = \frac{4}{3}A\mathbf{u}_{n-1} - \frac{1}{3}B\mathbf{u}_{n-2}, \text{where } A = \exp(\Delta t\mathcal{L}_h) \text{ and } B = A^2. \tag{4.1}$$

利用（4.1），可得如下时空系统

$$\mathcal{R}\mathbf{v} = \mathbf{f}_2, \text{where } \mathcal{R} := I_{t-1} \otimes I_x - \frac{4}{3}C_0 \otimes A + \frac{1}{3}C_1 \otimes B, \tag{4.2}$$

其中 $\mathbf{v} = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-1)}$, $\mathbf{f}_2 = (\frac{4}{3}A\mathbf{u}_1 - \frac{1}{3}B\mathbf{u}_0, -\frac{1}{3}B\mathbf{u}_1, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$ 且 C_1由下式给出

$$C_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N_t-1)\times(N_t-1)}. \tag{4.3}$$

求解 (4.2) 的预条件迭代系统由下式给出

$$\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{v}^k + \mathbf{s}^k,\ \mathcal{R}_\alpha \mathbf{s}^k = \mathbf{f}_2 - \mathcal{R}\mathbf{v}^k, \text{where } \mathcal{R}_\alpha := I_{t-1} \otimes I_x - \frac{4}{3}C_0^\alpha \otimes A + \frac{1}{3}C_1^\alpha \otimes B. \tag{4.4}$$

α-循环矩阵 C_1^α是 C_1的修改版本，唯一的差别在于元素 $C_1(1、 N_t - 2) = \alpha$ 以及 $C_1(2、 N_t - 1) = \alpha.$。注意， C_0 和 C_0^α 的结构仍与之前相同，但规模有所减小。矩阵 C_0^α 和 C_1^α 是同时可对角化的，其中 $C_0^\alpha = \mathcal{P}_\alpha \mathcal{D}_0 \mathcal{P}_\alpha^{-1}$和 $C_1^\alpha = \mathcal{P}_\alpha \mathcal{D}_1 \mathcal{P}_\alpha^{-1}$，而 $\mathcal{P}_\alpha$ 和 $\mathcal{D}_0$ 的表达式在第 2 节中讨论，只是将 N_t 替换为 $N_t - 1$。矩阵 $\mathcal{D}_1$ 的形式为 $\mathcal{D}_1 = \mathbf{diag}(\lambda_{1,}\mathbf{1}, \lambda_{1,}\mathbf{2}, \ldots, \lambda_{1,N_t-1})$，其中 $\lambda_{1、n}$ 对应于与 C_1^α 相关联的第 n 个特征值，并由 $\lambda_{1、n} = \alpha^{\frac{2}{N_t-1}} e^{\frac{4(n-1)\pi \mathrm{i}}{N_t-1}}$ 给出，对于 $n = 1, 2, \cdots, N_t - 1$。接下来，我们希望以 PinT 方式求解残差系统 $\mathcal{R}_\alpha \mathbf{s}^k = \mathbf{f}_2 - \mathcal{R}\mathbf{v}^k$，具体如下所述:

$$\begin{cases} \text{Step-(a):} & S_p = (\mathbb{F} \otimes I_x)\left[(\Gamma_\alpha \otimes I_x)\left(\mathbf{f}_2 - \mathcal{R}\mathbf{v}^k\right)\right], \\ \text{Step-(b):} & S_{q,n} = \left(I_x - \frac{4}{3}\lambda_{0,n}A + \frac{1}{3}\lambda_{1,n}B\right)^{-1} S_{p,n}, \quad n = 2, 3, \ldots, N_t, \\ \text{Step-(c):} & \mathbf{s}^k = \left(\Gamma_\alpha^{-1} \otimes I_x\right)(\mathbb{F}^* \otimes I_x)\, S_{q,n}, \end{cases} \tag{4.5}$$

在方程 4.5 中，步骤 (a) 和步骤 (c) 可利用快速傅里叶变换高效执行，而步骤 (b) 仍具有高度可并行性。我们现在着手建立所提方法的收敛估计。

4.1. 预条件系统的特征值估计。这里，我们讨论不动点预条件 Richardson 格式 (4.4) 的收敛。我们将第 k 次迭代的误差记为 $\mathbf{e}^k := \mathbf{v} - \mathbf{v}^k$。于是我们有如下误差关系

$$\mathbf{e}^k = (I_{xt-1} - \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R})\mathbf{e}^{k-1}, \tag{4.6}$$

其中 $I_{xt-1} \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-1)\times N_x(N_t-1)}$ 是单位矩阵。利用空间算子 $\mathcal{L}_h$ 的可对角化性，我们将 $\mathcal{R}$ 和 $\mathcal{R}_\alpha$ 重写为

$$\mathcal{R} = (I_{t-1} \otimes V_h) \underbrace{\left(I_{t-1} \otimes I_x - \frac{4}{3}C_0 \otimes e^{\Delta t D_h} + \frac{1}{3}C_1 \otimes e^{2\Delta t D_h}\right)}_{\bar{\mathcal{R}}} \left(I_{t-1} \otimes V_h^{-1}\right),$$

$$\mathcal{R}_\alpha = (I_{t-1} \otimes V_h) \underbrace{\left(I_{t-1} \otimes I_x - \frac{4}{3}C_0^\alpha \otimes e^{\Delta t D_h} + \frac{1}{3}C_1^\alpha \otimes e^{2\Delta t D_h}\right)}_{\bar{\mathcal{R}}_\alpha} \left(I_{t-1} \otimes V_h^{-1}\right).$$

因此， $\bar{\mathcal{R}}$ 与 $\mathcal{R}$ 相似，且 $\bar{\mathcal{R}}_\alpha$ 与 $\mathcal{R}_\alpha$ 相似。因此，只需研究 $I_{xt-1}-\bar{\mathcal{R}}_\alpha^{-1}\bar{\mathcal{R}}$ 的谱。令 $z=\lambda\Delta t$，其中 $\lambda\in\sigma(D_h)$。于是有

$$\bar{\mathcal{R}}=\underbrace{\left(I_{t-1}-\frac{4}{3}e^zC_0+\frac{1}{3}e^{2z}C_1\right)}_{\mathcal{T}_z}\otimes I_x,\ \bar{\mathcal{R}}_\alpha=\underbrace{\left(I_{t-1}-\frac{4}{3}e^zC_0^\alpha+\frac{1}{3}e^{2z}C_1^\alpha\right)}_{\mathcal{T}_{z,\alpha}}\otimes I_x.$$

因此，为了证明该方法的收敛性，我们只需研究 $\mathcal{M}_z=I_{t-1}-\mathcal{T}_z^{-1},_\alpha\mathcal{T}_z$ 的谱分布。

定理 4.1。 $\mathcal{M}_z$ 的谱界满足估计 $\rho(\mathcal{M}_z)\leqslant\frac{\alpha}{1-\alpha}$。

证明。显然，$\mathcal{M}_z=I_{t-1}-[I_{t-1}+\mathcal{T}_z^{-1}(\mathcal{T}_{z,\ \alpha}-\mathcal{T}_z)]^{-1}=I_{t-1}-[I_{t-1}+\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\ \alpha}]^{-1}$，其中 $\mathcal{T}_z$ 和 $\mathcal{H}_{z,\ \alpha}$ 的显式形式如下：

$$\mathcal{T}_z=\begin{bmatrix}a_0&0&\cdots&\cdots&\cdots&0\\a_1&a_0&\cdots&\cdots&\cdots&0\\a_2&a_1&a_0&\cdots&\cdots&0\\0&a_2&a_1&a_0&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\ddots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&a_2&a_1&a_0\end{bmatrix},\mathcal{H}_{z,\alpha}=\frac{\alpha}{3}\begin{bmatrix}0&0&\cdots&e^{2z}&-4e^z\\0&0&\cdots&0&e^{2z}\\0&0&\cdots&0&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&0&0\end{bmatrix},$$

其中 $a_0=1$、$a_1=-\frac{4}{3}e^z$ 和 $a_2=\frac{1}{3}e^{2z}$。因此，$\sigma(\mathcal{M}_z)=1-\frac{1}{1+\sigma(\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\ \alpha})}$。所以，为了得到一个界，我们需要 $\sigma(\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\ \alpha})$。根据 [21, 第 172] 页，我们有下三角托普利兹矩阵 $\mathcal{T}_z$ 的逆为

$$\mathcal{B}_z=\begin{bmatrix}b_0&0&\cdots&\cdots&0\\b_1&b_0&\cdots&\cdots&0\\b_2&b_1&b_0&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\b_{N_t-2}&b_{N_t-3}&\cdots&b_1&b_0\end{bmatrix},$$

其中 $b_0=1$ 且 $b_m=-\sum_{l=0}^{m-1}a_{m-l}b_l$，对于 $1\leqslant m\leqslant N_t-2$。求解该差分方程可得 b_m 的显式表达式为 $b_m=\frac{3}{2}e^{mz}-\frac{1}{2}\frac{e^{mz}}{3^m}$，对于 $1\leqslant m\leqslant N_t-2$。现在 $\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\ \alpha}$ 具有如下形式：

$$\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\alpha}=\frac{\alpha}{3}\begin{bmatrix}0&\cdots&0&b_0e^{2z}&-4b_0e^z\\0&\cdots&0&b_1e^{2z}&-4b_1e^z+b_0e^{2z}\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&\cdots&0&b_{N_t-2}e^{2z}&-4b_{N_t-2}e^z+b_{N_t-3}e^{2z}\end{bmatrix}.$$

显然，$\mathcal{T}_z^{-1}\mathcal{H}_{z,\ \alpha}$ 有 N_t-3 个零特征值和两个非零特征值。非零特征值对应于下列方程的根

$$\det\begin{bmatrix}\frac{\alpha}{3}b_{N_t-3}e^{2z}-r&\frac{\alpha}{3}\left(-4b_{N_t-3}e^z+b_{N_t-4}e^{2z}\right)\\\frac{\alpha}{3}b_{N_t-2}e^{2z}&\frac{\alpha}{3}\left(-4b_{N_t-2}e^z+b_{N_t-3}e^{2z}\right)-r\end{bmatrix}=0.$$

求解上述关于 r 的系统，我们得到

$$r_{\pm}=\frac{\alpha}{3}\left\{\left(b_{N_t-3}e^{2z}-2b_{N_t-2}e^{z}\right)\pm\sqrt{4b_{N_t-2}^2e^{2z}-4b_{N_t-2}b_{N_t-3}e^{3z}+b_{N_t-2}b_{N_t-4}e^{4z}}\right\}. \quad (4.7)$$

将 b_m 的值代入（4.7）并化简表达式，可得 $r_+=\frac{}{}\alpha\left(\frac{e^z}{3}\right)^{N_t-1}$and $r_-=-\alpha e^{(N_t-1)z}$。因此 $\sigma(\mathcal{M}_z)=\{0,\underbrace{\cdots\ 0}\}\cup\left\{\frac{-\alpha e^{(N_t-1)z}}{1-\alpha e^{(N_t-1)z}}\right\}\cup\left\{\frac{-\alpha\left(\frac{e^z}{3}\right)^{N_t-1}}{1-\alpha\left(\frac{e^z}{3}\right)^{N_t-1}}\right\}$,。由于 $z\in\mathbb{R}N_t-3$and $z<0$,

由 $\sigma(\mathcal{M}_z)$ 可知我们有 $\rho(\mathcal{M}_z)\leqslant\frac{\alpha}{1-\alpha}$。证毕。

□

4.2. GMRES设置下预条件系统的分析。为分析预条件系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 的 GMRES方法的收敛性，我们将 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 重写为 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}=\left[I_{xt-1}+\mathcal{R}^{-1}\mathcal{L}_\alpha\right]^{-1}$，其中 $\mathcal{L}_\alpha:=\mathcal{R}_\alpha-\mathcal{R}$。下三角块托普利兹矩阵的逆为

$$\mathcal{R}^{-1}=\begin{bmatrix}R_0 & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ R_1 & R_0 & \cdots & \cdots & 0\\ R_2 & R_1 & R_0 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ R_{N_t-2} & R_{N_t-3} & \cdots & R_1 & R_0\end{bmatrix},$$

其中，对于 $1\leqslant m\leqslant N_t-2$，$R_0=I_x$ 和 $R_m=\frac{4}{3}AR_{m-1}-\frac{1}{3}BR_{m-2}$。求解该差分方程，可得到 R_m 的显式表达式，即对于 $1\leqslant m\leqslant N_t-2$，$R_m=\frac{3}{2}A^m-\frac{1}{2}\left(\frac{A}{3}\right)^m$。现在，$\mathcal{R}^{-1}\mathcal{L}_\alpha$ 具有以下形式：

$$\mathcal{R}^{-1}\mathcal{L}_\alpha=\frac{\alpha}{3}\begin{bmatrix}0 & \cdots & 0 & R_0B & -4R_0A\\ 0 & \cdots & 0 & R_1B & -4R_1A+R_0B\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & R_{N_t-2}B & -4R_{N_t-2}A+R_{N_t-3}B\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \cdots & 0 & \Xi_0 & \Sigma_0\\ 0 & \cdots & 0 & \Xi_1 & \Sigma_1\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & \Xi_{N_t-2} & \Sigma_{N_t-2}\end{bmatrix},$$

其中，对于 $j=1$、2、$\cdots$、N_t-2，Ξ_j和 Σ_j具有显然的定义。于是，预条件系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 具有以下结构

$$\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}=\begin{bmatrix}I_x & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_0+\Xi_0\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_0}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_0-\Xi_0\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_0}{\mathbb{S}}\\ 0 & I_x & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_1+\Xi_1\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_1}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_1-\Xi_1\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_1}{\mathbb{S}}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & I_x & -\frac{\Xi_{N_t-4}+\Xi_{N_t-4}\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_{N_t-4}}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_{N_t-4}-\Xi_{N_t-4}\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_{N_t-4}}{\mathbb{S}}\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{I_x+\Sigma_{N_t-2}}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_{N_t-3}}{\mathbb{S}}\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_{N_t-2}}{\mathbb{S}} & \frac{I_x+\Xi_{N_t-3}}{\mathbb{S}}\end{bmatrix},$$

其中 $\mathbb{S}=I_x+\Xi_{N_t-3}+\Sigma_{N_t-2}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_{N_t-3}$。将 Ξ_j 和 Σ_j 的值代入 $j=N_t-2$、N_t-3，并在 $\mathbb{S}$ 的表达式中使用 R_m 的值，可得
$\mathbb{S}=I_x+\alpha A^{N_t-1}\left(-1+\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)+\alpha^2A^{2(N_t-1)}\frac{1}{3^{N_t-1}}$。因此，系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 可写为

$\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R} = I_{xt-1} + \Pi$，其中 Π 由下式给出

$$\Pi = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_0+\Xi_0\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_0}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_0-\Xi_0\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_0}{\mathbb{S}} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_1+\Xi_1\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_1}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_1-\Xi_1\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_1}{\mathbb{S}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_{N_t-4}+\Xi_{N_t-4}\Sigma_{N_t-2}-\Xi_{N_t-2}\Sigma_{N_t-4}}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_{N_t-4}-\Xi_{N_t-4}\Sigma_{N_t-3}+\Xi_{N_t-3}\Sigma_{N_t-4}}{\mathbb{S}} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -I_x + \frac{I_x^2+\Sigma_{N_t-2}}{\mathbb{S}} & -\frac{\Sigma_{N_t-3}}{\mathbb{S}} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\Xi_{N_t-2}}{\mathbb{S}} & -I_x + \frac{I_x^2+\Xi_{N_t-3}}{\mathbb{S}} \end{bmatrix}.$$

引理 4.2。Π 的最后两列中的块可逆。

定理 4.3。GMRES 至多经过 $2N_x + 1$ 次迭代即可收敛。

证明。显然，Π 的秩为 $2N_x$（因为最后两列中的块可逆）。因此，预条件系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$是单位矩阵加上一个秩为 $2N_x$的低秩矩阵。因此，GMRES 至多经过 $2N_x + 1$ 次迭代即可收敛。□

接下来，我们讨论预条件系统的特征值集中性。令$\mathbb{G} = \left(I_{2x} \otimes \frac{1}{\mathbb{S}}\right)(I_{2x} + \mathcal{W})$，其中 $I_{2x} = \mathsf{diag}(I_x,\ I_x)$，且 $\mathcal{W}$由下式给出

$$\mathcal{W} = \begin{bmatrix} \Sigma_{N_t-2} & -\Sigma_{N_t-3} \\ -\Xi_{N_t-2} & \Xi_{N_t-3} \end{bmatrix},$$

其中 $\Sigma_{N_t-2} = \alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)A^{N_t-1}$、$\Sigma_{N_t-3} = \alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)A^{N_t-2}$、$\Xi_{N_t-2} = \alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)A^{N_t}$和 $\Xi_{N_t-3} = \alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)A^{N_t-1}$。

引理 4.4. $\mathbb{G}$ 的特征值由 $\frac{1+s_+}{1+\nu}$ 和 $\frac{1+s_-}{1+\nu}$ 给出，其中 s_+、s_-和 ν 在证明中定义。

证明。由于 $\mathcal{L}_h$ 可对角化，矩阵 $\mathbb{G}$ 可写为

$$\mathbb{G} = \begin{bmatrix} V_h & 0 \\ 0 & V_h \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbb{D}_\mathbb{S}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathbb{D}_\mathbb{S}^{-1} \end{bmatrix}(I_{2x} + \mathcal{D}_\mathcal{W})\begin{bmatrix} V_h^{-1} & 0 \\ 0 & V_h^{-1} \end{bmatrix}, \text{ where } \mathcal{D}_\mathcal{W} \text{ is given by}$$

$$\mathcal{D}_\mathcal{W} = \begin{bmatrix} \alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)E^{N_t-1} & -\alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)E^{N_t-2} \\ -\alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)E^{N_t} & \alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)E^{N_t-1} \end{bmatrix},$$

且 $\mathbb{D}_\mathbb{S} = I_x + \alpha E^{N_t-1}\left(-1 + \frac{1}{3^{N_t-1}}\right) + \alpha^2 E^{2(N_t-1)}\frac{1}{3^{N_t-1}}$。接下来，对于重排行和列的置换矩阵$\mathbb{P} \in \mathbb{R}^{2N_x \times 2N_x}$，矩阵 $\mathcal{D}_\mathcal{W}$ 满足 $\mathbb{P}^\top\mathcal{D}_\mathcal{W}\mathbb{P}$ =分块对角矩阵(b_{d_1}、b_{d_2}、$\cdots$、$b_{d_{N_x}}$)，其中各块 b_{d_j}为

$$b_{d_j} = \begin{bmatrix} \alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)e^{\lambda_j\Delta t(N_t-1)} & -\alpha\left(-\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)e^{\lambda_j\Delta t(N_t-2)} \\ -\alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)e^{\lambda_j\Delta tN_t} & \alpha\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3^{N_t-2}}\right)e^{\lambda_j\Delta t(N_t-1)} \end{bmatrix},$$

其中 $\lambda_j \in \sigma(\mathcal{L}_h)$ 对于 $j = 1, 2, \cdots, N_x$。经过置换相似变换后，特征值保持不变；因此，只需研究各个块 b_{d_j}的特征值。通过求解二次方程 $\mathsf{det}(b_{d_j} - sI_2) = 0$ for s，得到特征值为

$$s_+ = -\alpha e^{\lambda_j\Delta t(N_t-1)}\frac{1}{3^{N_t-1}},\ s_- = -\alpha e^{\lambda_j\Delta t(N_t-1)}.$$

因此， $\mathbb{G}$ 的特征结构形式为$\frac{1+s_+}{1+\nu}$和 $\frac{1+s_-}{1+\nu}$，其中 $\nu=\alpha\left(-1+\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)e^{\lambda_j\Delta t(N_t-1)}+\alpha^2\frac{1}{3^{N_t-1}}e^{2\lambda_j\Delta t(N_t-1)}$。至此，证明完成。□

为简化记号，我们用通用的 λ替换定义中的 λ_j，并使用 s_+、s_-和 ν。

引理4.5. 预条件系统的特征值集中在 1 附近，半径为$\frac{\alpha+\alpha^2}{1-\alpha-\alpha^2}$。

证明. 显然， $\sigma\left(\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\right)=\{1\}\cup\sigma\left(\mathbb{G}\right)$。于是我们有 $\max\limits_{\lambda\in\sigma\left(\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\right)}|\lambda-1|=\max\limits_{\lambda\in\{1\}\cup\sigma(\mathbb{G})}|\lambda-1|\leqslant\max^{\lambda\in\sigma(\mathcal{L}_h)}\max\left\{\left|\frac{s_+-\nu}{1+\nu}\right|,\left|\frac{s_--\nu}{1+\nu}\right|\right\}$。现在我们估计 $\left|\frac{s_+-\nu}{1+\nu}\right|$和 $\left|\frac{s_--\nu}{1+\nu}\right|$。令 $y=e^{\lambda\Delta t}$，则 $\left|\frac{s_--\nu}{1+\nu}\right|$ 的表达式变为

$$\left|\frac{s_--\nu}{1+\nu}\right|=\left|\frac{\alpha\frac{1}{3^{N_t-1}}y^{N_t-1}(1+\alpha y^{N_t-1})}{1+\nu}\right|. \tag{4.8}$$

由于 $\lambda\in\mathbb{R}$ 且 $\lambda<0$，因此 $y\in(0,\ 1)$。由此可见，(4.8) 中的分子上界为$\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}(1+\alpha)$。现在我们重写 $1+\nu=1-\nu_0$，其中 $\nu_0=\alpha y^{N_t-1}\left(1-\frac{1}{3^{N_t-1}}-\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}y^{N_t-1}\right)$。接下来，我们证明对于 $y<1$，有 $|\nu_0|<1$。利用三角不等式和 $y<1$，我们得到对于 $N_t\geqslant 2$ 和 $\alpha\leqslant 1$，有 $|\nu_0|\leqslant\alpha y^{N_t-1}\left(\left|1-\frac{1}{3^{N_t-1}}\right|+\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}y^{N_t-1}\right)<\alpha\left(1+(\alpha-1)\frac{1}{3^{N_t-1}}\right)<1$。因此 $|1+\nu|\geqslant 1-|\nu_0|>1-\alpha\left(1+\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}\right)>1-\alpha-\alpha^2$。因此，由 (4.8) 可得

$$\left|\frac{s_--\nu}{1+\nu}\right|\leqslant\frac{\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}(1+\alpha)}{1-\alpha-\alpha^2}<\frac{\alpha+\alpha^2}{1-\alpha-\alpha^2}:=\epsilon_0. \tag{4.9}$$

对于项$\left|\frac{s_+-\nu}{1+\nu}\right|$，我们有

$$\left|\frac{s_+-\nu}{1+\nu}\right|=\left|\frac{\alpha y^{N_t-1}(-1+\frac{2}{3^{N_t-1}}+\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}y^{N_t-1})}{1+\nu}\right|\leqslant\frac{\alpha(|-1+\frac{2}{3^{N_t-1}}|+|\frac{\alpha}{3^{N_t-1}}y^{N_t-1}|}{|1+\nu|}. \tag{4.10}$$

对于 $N_t\geqslant 2$，有$|-1+\frac{2}{3^{N_t-1}}|\leqslant 1$。将其用于 (4.10) 的分子中，我们发现该分子的上界为 $\alpha(1+\frac{\alpha}{3^{N_t-1}})$，进而又被 $\alpha+\alpha^2$ 所界定。因此，在这种情况下，我们同样得到 (4.10) 的上界 ϵ_0。故结论成立。

□

引理 4.6。预条件系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 是可对角化的。

证明。为证明该结论，我们假设 N_t 为奇数，使得 N_t-1 为偶数（因为N_t 可以自由选择）。那么， $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}$ 可以重写为 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}=I_{xt-1}+\widetilde{\Pi}$，其中 $\widetilde{\Pi}$ 是对 Π的块的重新分组，表示为

$$\widetilde{\Pi}=\begin{bmatrix}0&0&\cdots&0&\Theta_1\\0&0&\cdots&0&\Theta_2\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&0&\cdots&0&\Theta_{\frac{N_t-1}{2}-1}\\0&0&\cdots&0&\Theta_{\frac{N_t-1}{2}}\end{bmatrix},$$

其中，对于 $j=1$，$\Theta_j \in \mathbb{R}^{2N_x \times 2N_x}$ 为 2，$\cdots \frac{N_t-1}{2}$。新的块 Θ_j 通过取 Π最后两列中的块构成，每列包含两个行块。我们尤其关注 $\Theta_{\underline{N_t-1}}$，其形式为 $\Theta_{\underline{N_t-1}} = -I_{2x} + \mathbb{G}$。利用引理 4.4以及$_2$ $_2$引理4.5的分析，可以清楚地看出$\Theta_{\underline{N_t-1}}$是可逆的。于是，$\widetilde{\Pi}$可以写成 $\widetilde{\Pi} = \widetilde{V}\widetilde{D}\widetilde{V}^{-1}$，其中$_2$∼ ∼$V$和 D 表示为

$$\widetilde{V} = \begin{bmatrix} I_{2x} & & & \Theta_1\Theta^{-1}_{\frac{N_t-1}{2}} \\ & I_{2x} & & \Theta_2\Theta^{-1}_{\frac{N_t-1}{2}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & I_{2x} & \Theta_{\frac{N_t-1}{2}-1}\Theta^{-1}_{\frac{N_t-1}{2}} \\ & & & I_{2x} \end{bmatrix}, \widetilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \\ & & & & \Theta_{\frac{N_t-1}{2}} \end{bmatrix}.$$

此外，$\Theta_{\underline{N_t-1}}$是可对角化的，因为它具有互不相同的特征值，因此 $\widetilde{D} = V_\theta D_\theta V_\theta^{-1}$。由此可得系统$\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R} = \widetilde{V}V_\theta\left(I_{xt-1} + D_\theta\right)V_\theta^{-1}\widetilde{V}^{-1}$。引理得证。□

我们将预处理残差记为 $\mathbf{r}^k_{g,\ \alpha} = \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathbf{f}_2 - \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\mathbf{v}^k$，经过第 k 次迭代后。

定理4.7. 将 GMRES方法应用于预条件系统 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\mathbf{v} = \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathbf{f}_2$。则残差满足误差估计 $\| \mathbf{r}^k_{g,\ \alpha} \| \leqslant \kappa_0 \left(\frac{\alpha+\alpha^2}{1-\alpha-\alpha^2}\right)^k \| \mathbf{r}^0_{g,\ \alpha} \|$，其中$\kappa_0 = \| \widetilde{V}V_\theta \| \| (\widetilde{V}V_\theta)^{-1} \|$。

证明。由引理 4.6，我们得到预条件系统的可对角化性。于是，对于预处理GMRES残差有 $\| \mathbf{r}^k_{g,\alpha} \| \leqslant \kappa_0 \min_{p\in P_k(0)} \max_{1\leqslant i\leqslant N_x} |p(\lambda_i)| \| \mathbf{r}^0_{g,\alpha} \|$，其中 P_k 是次数不超过 k 的多项式集合。然后利用 [27, 第6.11] 节和引理4.5，我们得到所需结果。□

在这种情形下同样可以借助Elman的估计建立与一阶情形类似的收敛结果。然而，由于二阶表述中所涉矩阵表达式的复杂性，我们将该结果陈述为猜想，而不给出完整证明。

定理4.8。设GMRES应用于 $\mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\mathbf{u} = \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathbf{f}_2$。则经过 k 次迭代后，残差$\mathbf{r}^k_{g,\alpha} = \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathbf{f}_2 - \mathcal{R}_\alpha^{-1}\mathcal{R}\mathbf{u}^k$ 满足 $\| \mathbf{r}^k_{g,\alpha} \| \leqslant (4(\alpha+\alpha^2)(1-\alpha-\alpha^2))^{k/2} \| \mathbf{r}^0_{g,\alpha} \|$.

5. Exp-ParaDiag Formulation for $\mathcal{O}((\Delta t)^s)$ Scheme for $3 \leqslant s \leqslant 6$

我们将 Exp-ParaDiag公式扩展到最高六阶的 BDF 格式 [28]，并通过数值实验研究预处理GMRES 的收敛性。原则上，GMRES 的收敛性可以沿用先前的分析，但分析过程会变得愈发复杂。不过，定点收敛性的分析思路与定理 4.1 类似。首先，我们定义几个单位矩阵 $I_{t-j} \in \mathbb{R}^{N_t-j \times N_t-j}$，分别对应 $j=2$、3、4、5。此外，我们定义循环矩阵

C_2、 C_3、 C_4 和 C_5, 它们分别由以下首列向量生成:

$$C_2 : [0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0,\ \ldots,\ 0]^\top,$$
$$C_3 : [0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0,\ \ldots,\ 0]^\top,$$
$$C_4 : [0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0,\ \ldots,\ 0]^\top,$$
$$C_5 : [0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0,\ \ldots,\ 0]^\top.$$

相应的 α-循环矩阵记为 C_j^α, 它们以适用于 $j = 2$ 的循环矩阵 C_j（3、4、5）为基础, 并将其修改为 C_j, 具体为 $C_2(1, N_t - 4) = C_2(2, N_t - 3) = C_2(3, N_t - 2) = \alpha$, $C_3(1, N_t - 6) = C_3(2, N_t - 5) = C_3(3, N_t - 4) = C_3(4, N_t - 3) = \alpha$,$C_3(1, N_t - 8) = C_3(2, N_t - 7) = C_3(3, N_t - 6) = C_3(4, N_t - 5) = C_3(5, N_t - 4) = \alpha$和 $C_4(1, N_t - 10) = C_4(2, N_t - 9) = C_4(3, N_t - 8) = C_4(4, N_t - 7) = C_4(5, N_t - 6) = C_4(6, N_t - 5) = \alpha_\circ$ 我们首先介绍采用 BDF3 方法作为 GMRES 预条件子的 Exp-ParaDiag 公式。(1.1) 的三阶精度指数积分器为

$$\mathbf{u}_n = \frac{18}{11}A\mathbf{u}_{n-1} - \frac{9}{11}A^2\mathbf{u}_{n-2} + \frac{2}{11}A^3\mathbf{u}_{n-3}, \text{for } n \geqslant 3. \tag{5.1}$$

利用 (5.1), 可得以下时空系统

$$\mathcal{R}_3\mathbf{v}_3 = \mathbf{f}_3, \text{where } \mathcal{R}_3 := I_{t-2} \otimes I_x - \frac{18}{11}C_0 \otimes A + \frac{9}{11}C_1 \otimes A^2 - \frac{2}{11}C_2 \otimes A^3, \tag{5.2}$$

其中 $\mathbf{v}_3 = (\mathbf{u}_3, \mathbf{u}_4, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-2)}$, $\mathbf{f}_3 = (\frac{18}{11}A\mathbf{u}_2 - \frac{9}{11}A^2\mathbf{u}_1 + \frac{2}{11}A^3\mathbf{u}_0, -\frac{9}{11}A^2\mathbf{u}_2 + \frac{2}{11}A^3\mathbf{u}_1, \frac{2}{11}A^3\mathbf{u}_2, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$。使用 GMRES 求解 (5.2) 的预条件子为 $\mathcal{R}_3^\alpha$:= $I_{t-2} \otimes I_x - \frac{18}{11}C_0^\alpha \otimes A + \frac{9}{11}C_1^\alpha \otimes A^2 - \frac{2}{11}C_2^\alpha \otimes A^3$。(1.1) 的四阶精度指数积分器为

$$\mathbf{u}_n = \frac{48}{25}A\mathbf{u}_{n-1} - \frac{36}{25}A^2\mathbf{u}_{n-2} + \frac{16}{25}A^3\mathbf{u}_{n-3} - \frac{3}{25}A^4\mathbf{u}_{n-4}, \text{for } n \geqslant 4. \tag{5.3}$$

利用 (5.3), 可得以下时空系统

$$\mathcal{R}_4\mathbf{v}_4 = \mathbf{f}_4, \text{where } \mathcal{R}_4 := I_{t-3} \otimes I_x - \frac{48}{25}C_0 \otimes A + \frac{36}{25}C_1 \otimes A^2 - \frac{16}{25}C_2 \otimes A^3 + \frac{3}{25}C_3 \otimes A^4, \tag{5.4}$$

其中 $\mathbf{v}_4 = (\mathbf{u}_4, \mathbf{u}_5, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-3)}$, $\mathbf{f}_4 = (\frac{48}{25}A\mathbf{u}_3 - \frac{36}{25}A^2\mathbf{u}_2 + \frac{16}{25}A^3\mathbf{u}_1 - \frac{3}{25}A^4\mathbf{u}_0, -\frac{36}{25}A^2\mathbf{u}_3 + \frac{16}{25}A^3\mathbf{u}_2 - \frac{3}{25}A^4\mathbf{u}_1, \frac{16}{25}A^3\mathbf{u}_3 - \frac{3}{25}A^4\mathbf{u}_2, -\frac{3}{25}A^4\mathbf{u}_3, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$。通过 GMRES 求解 (5.4) 的预条件子为 $\mathcal{R}_4^\alpha$: $= I_{t-3} \otimes I_x - \frac{48}{25}C_0^\alpha \otimes A + \frac{36}{25}C_1^\alpha \otimes A^2 - \frac{16}{25}C_2^\alpha \otimes A^3 + \frac{3}{25}C_3^\alpha \otimes A^4$。(1.1) 的五阶精度指数积分器为

$$\mathbf{u}_n = \frac{300}{137}A\mathbf{u}_{n-1} - \frac{300}{137}A^2\mathbf{u}_{n-2} + \frac{200}{137}A^3\mathbf{u}_{n-3} - \frac{75}{137}A^4\mathbf{u}_{n-4} + \frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_{n-5}, \text{for } n \geqslant 5. \tag{5.5}$$

利用 (5.5), 我们得到以下时空系统

$$\mathcal{R}_5\mathbf{v}_5 = \mathbf{f}_5, \text{where } \mathcal{R}_5 := I_{t-4} \otimes I_x - \frac{300}{137}C_0 \otimes A + \frac{300}{137}C_1 \otimes A^2 - \frac{200}{137}C_2 \otimes A^3 + \frac{75}{137}C_3 \otimes A^4 - \frac{12}{137}C_4 \otimes A^5, \tag{5.6}$$

其中 $\mathbf{v}_5 = (\mathbf{u}_5, \mathbf{u}_6, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-4)}$, $\mathbf{f}_5 = (\frac{300}{137}A\mathbf{u}_4 - \frac{300}{137}A^2\mathbf{u}_3 + \frac{200}{137}A^3\mathbf{u}_2 - \frac{75}{137}A^4\mathbf{u}_1 + \frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_0, -\frac{300}{137}A^2\mathbf{u}_4 + \frac{200}{137}A^3\mathbf{u}_3 - \frac{75}{137}A^4\mathbf{u}_2 + \frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_1, \frac{200}{137}A^3\mathbf{u}_4 - \frac{75}{137}A^4\mathbf{u}_3 + \frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_2, -\frac{75}{137}A^4\mathbf{u}_4 +$

$\frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_3, \frac{12}{137}A^5\mathbf{u}_4, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$。使用 GMRES 求解 (5.6) 的预条件子为$\mathcal{R}_5^\alpha$:
$= I_{t-4} \otimes I_x - \frac{300}{137}C_0^\alpha \otimes A + \frac{300}{137}C_1^\alpha \otimes A^2 - \frac{200}{137}C_2^\alpha \otimes A^3 + \frac{75}{137}C_3^\alpha \otimes A^4 - \frac{12}{137}C_4^\alpha \otimes A^5$。式 (1.1) 的六阶精度指数积分法为

$$\mathbf{u}_n = \frac{360}{147}A\mathbf{u}_{n-1} - \frac{450}{147}A^2\mathbf{u}_{n-2} + \frac{400}{147}A^3\mathbf{u}_{n-3} - \frac{225}{147}A^4\mathbf{u}_{n-4} + \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_{n-5} - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_{n-6}, \text{for } n \geqslant 6. \tag{5.7}$$

利用 (5.7)，可得如下时空系统

$$\mathcal{R}_6\mathbf{v}_6 = \mathbf{f}_6, \text{where } \mathcal{R}_6 := I_{t-5} \otimes I_x - \frac{360}{147}C_0 \otimes A + \frac{450}{147}C_1 \otimes A^2 - \frac{400}{147}C_2 \otimes A^3 + \frac{225}{147}C_3 \otimes A^4 - \frac{72}{147}C_4 \otimes A^5 + \frac{10}{147}C_5 \otimes A^6, \tag{5.8}$$

其中 $\mathbf{v}_6 = (\mathbf{u}_6, \mathbf{u}_7, \cdots, \mathbf{u}_{N_t})^\top \in \mathbb{R}^{N_x(N_t-5)}$, $\mathbf{f}_6 = (\frac{360}{147}A\mathbf{u}_5 - \frac{450}{147}A^2\mathbf{u}_4 + \frac{400}{147}A^3\mathbf{u}_3 - \frac{225}{147}A^4\mathbf{u}_2 + \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_1 - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_0, -\frac{450}{147}A^2\mathbf{u}_5 + \frac{400}{147}A^3\mathbf{u}_4 - \frac{225}{147}A^4\mathbf{u}_3 + \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_2 - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_1, \frac{400}{147}A^3\mathbf{u}_5 - \frac{225}{147}A^4\mathbf{u}_4 + \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_3 - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_2, -\frac{225}{147}A^4\mathbf{u}_5 + \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_4 - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_3, \frac{72}{147}A^5\mathbf{u}_5 - \frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_4, -\frac{10}{147}A^6\mathbf{u}_5, \mathbf{0}, \cdots, 0)^\top$。利用 GMRES 求解 (5.8) 的预条件子为 $\mathcal{R}_6^\alpha := I_{t-5} \otimes I_x - \frac{360}{147}C_0^\alpha \otimes A + \frac{450}{147}C_1^\alpha \otimes A^2 - \frac{400}{147}C_2^\alpha \otimes A^3 + \frac{225}{147}C_3^\alpha \otimes A^4 - \frac{72}{147}C_4^\alpha \otimes A^5 + \frac{10}{147}C_5^\alpha \otimes A^6$。

6. Formulation and Convergence in the Nonlinear Setting

现在，我们将指数并行对角化框架扩展到非线性问题。为此，我们采用积分因子技术进行时间离散（也可以使用基于指数时间差分的方法），并基于这些离散化技术构建我们的方法。对于（1.1），基于积分因子方法的时间一阶精度指数积分法为

$$\mathbf{u}_n = e^{\Delta t\mathcal{L}_h}\mathbf{u}_{n-1} + \Delta t\mathcal{N}(\mathbf{u}_n). \tag{6.1}$$

相应的Exp-ParaDiag公式为:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_n^k = e^{\Delta t\mathcal{L}_h}\mathbf{u}_{n-1}^k + \Delta t\mathcal{N}(\mathbf{u}_n^k)\ , n = 1, 2, \cdots, N_t, \\ \mathbf{u}_0^k = \alpha\mathbf{u}_{N_t}^k - \alpha\mathbf{u}_{N_t}^{k-1} + \mathbf{u}_0. \end{cases} \tag{6.2}$$

现在，我们针对（6.2） formulates usual three-step solution procedure。汇集所有时空点，可得到如下用于 $\mathcal{U}^k$ （6.2）的时空非线性方程

$$\Psi_1(\mathcal{U}^k) = (I_t \otimes I_x)\mathcal{U}^k - (C_0^\alpha \otimes A)\mathcal{U}^k - \Delta t\mathcal{N}_0(\mathcal{U}^k) - \mathbf{b}^{k-1}, \tag{6.3}$$

其中， $\mathcal{N}_0(\mathcal{U}^k) := \left(\mathcal{N}(\mathbf{u}_1^k),\ \mathcal{N}(\mathbf{u}_2^k),\ \cdots,\ \mathcal{N}(\mathbf{u}_n^k)\right)^\top$是非线性时空向量。用于求解（6.3）的非精确牛顿法为：对于 $m = 1$、2、 $\cdots$，计算以下内容

$$\Psi_1'(\mathcal{U}_m^k)\mathcal{U}_{m+1}^k = -\Delta t\,\text{blkdiag}\left(\mathcal{N}'(\mathbf{u}_1^k), \cdots, \mathcal{N}'(\mathbf{u}_n^k)\right)\mathcal{U}_m^k + \Delta t\mathcal{N}_0(\mathcal{U}_m^k) + \mathbf{b}^{k-1} := \mathbf{res}_m, \tag{6.4}$$

其中 $\mathbf{b}^{k-1}$如前所述，非精确雅可比近似取为 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \left(\frac{1}{N_t}\sum_{n=1}^{N_t}\mathcal{N}'(\mathbf{u}_n^k)\right)$ [11, 13]，以构建 $\Psi_1'(\mathcal{U}_m^k) = (I_t \otimes I_x) - (C_0^\alpha \otimes A) - \Delta t\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}_m^k)$。然后

求解 (6.4) 需要以下三个步骤，具体如下：

$$\begin{cases} \text{Step-(a)}: & S_p = (\mathbb{F} \otimes I_x)\left[(\Gamma_\alpha \otimes I_x)\,\mathbf{res}_m\right], \\ \text{Step-(b)}: & S_{q,n} = \left(I_x - \lambda_{0,n}A - \Delta t\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}_m^k)\right)^{-1} S_{p,n}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots, N_t, \\ \text{Step-(c)}: & \mathbf{s}^k = \left(\Gamma_\alpha^{-1} \otimes I_x\right)(\mathbb{F}^* \otimes I_x)\, S_{q,n}. \end{cases} \tag{6.5}$$

在近似时空雅可比矩阵的背景下，我们提出将时空非线性项近似为 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}_m^k) := I_t \otimes \mathbf{diag}\,(\mathcal{N}'(\mathfrak{u}_0))$，如式（6.5）所示。相关数值实验见第7节。

现在我们展示并行时间方法（6.2）的收敛性质。令 $\mathfrak{e}_n^k := \mathfrak{u}_n^k - \mathfrak{u}_n$ 表示并行时间方法每次迭代的误差。

引理6.1。对于 $\mathfrak{x}, \mathfrak{y} \in \mathbb{R}^d$，有 $\langle e^{\Delta t\mathcal{L}_h}\mathfrak{x}, \mathfrak{y}\rangle \leqslant \| e^{\Delta t\mathcal{L}_h} \| \langle \mathfrak{x}, \mathfrak{y}\rangle < \langle \mathfrak{x}, \mathfrak{y}\rangle$。

定理6.2。 对应于式（6.2）的第 $\mathfrak{e}_n^k$ 次迭代的误差满足估计 te

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N_t} \| \mathfrak{e}_n^k \| \leqslant \left(\frac{|\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}}}{1-|\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}}}\right)^k \| \mathfrak{e}_0^0 \|. \tag{6.6}$$

证明。一阶精度格式（6.1）的误差方程形式如下

$$\mathfrak{e}_n^k = e^{\Delta t\mathcal{L}_h}\mathfrak{e}_{n-1}^k + \Delta t\left(\mathcal{N}(\mathbf{u}_n^k) - \mathcal{N}(\mathbf{u})\right). \tag{6.7}$$

对 $\mathfrak{e}_n^k$ 取内积，并应用单侧利普希茨条件（1.3），再利用引理6.1，可得

$$\langle \mathfrak{e}_n^k, \mathfrak{e}_n^k\rangle \leqslant \langle \mathfrak{e}_{n-1}^k, \mathfrak{e}_n^k\rangle - \Delta tM \| \mathfrak{e}_n^k \|^2. \tag{6.8}$$

由（6.1）可得

$$\langle \mathfrak{e}_n^k - \mathfrak{e}_{n-1}^k, \mathfrak{e}_n^k\rangle \leqslant -\Delta tM \| \mathfrak{e}_n^k \|^2. \tag{6.9}$$

在（6.9）中使用恒等式$(\mathfrak{a}-\mathfrak{b})\mathfrak{a} \geqslant \frac{\mathfrak{a}^2}{2} - \frac{\mathfrak{b}^2}{2}$，可得

$$\frac{\| \mathfrak{e}_n^k \|^2 - \| \mathfrak{e}_{n-1}^k \|^2}{2} \leqslant -\Delta tM \| \mathfrak{e}_n^k \|^2. \tag{6.10}$$

由方程（6.10）可得

$$\| \mathfrak{e}_n^k \|^2 \leqslant \frac{1}{1+2\Delta tM} \| \mathfrak{e}_{n-1}^k \|^2 \leqslant \left(e^{-\frac{2\Delta tM}{1+2\Delta tM}}\right)^{N_t} \| \mathfrak{e}_0^k \|^2 = e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}} \| \mathfrak{e}_0^k \|^2. \tag{6.11}$$

From 与（6.2）相对应的误差方程$_2$ 并利用（6.11），我们得到

$$\| \mathfrak{e}_0^k \| \leqslant |\alpha| \| \mathfrak{e}_{N_t}^k \| + |\alpha| \| \mathfrak{e}_{N_t}^{k-1} \| \leqslant |\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}} \| \mathfrak{e}_0^k \| + |\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}} \| \mathfrak{e}_0^{k-1} \|, \tag{6.12}$$

which yields

$$\| \mathfrak{e}_0^k \| \leqslant \frac{|\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}}}{1-|\alpha|e^{-\frac{2TM}{1+2\Delta tM}}} \| \mathfrak{e}_0^{k-1} \|. \tag{6.13}$$

现在将 (6.13) 代入 (6.11)，即可得到 (6.6) 中所需的估计。 □

7. Numerical Illustration

本节展示所提出的 Exp-ParaDiag 方法应用于线性和非线性时变偏微分方程时的数值结果。PinT 迭代以零为初值，并持续进行，直至参考顺序解 u 与第 k 次迭代得到的 Exp-ParaDiag 解 u^k 之间的 $L^\infty(0,T;\, L^2(\Omega))$ 范数误差降至容差 10^{-10} 以下。所展示的数值结果是在一台配备 4.2 GHz 处理器和 64 GB 内存的台式电脑上获得的，代码使用 MATLAB 2025 实现。

7.1. 线性设置下的实验。我们首先讨论基于式 (2.11) 中极小极大问题对自由参数 α 的选择。表 1 给出了不同 a、 c 和 T 组合所对应的最优值 α_{opt}。可以

Table 1. 根据式 (2.11) 得到的 α 最优值

$(N_x,\ T)$	α_{opt}：优化后的 α			
	$(a,\ c) = (1,\ 0)$	$(a,\ c) = (10^{-3}\ 0)$	$(a,\ c) = (10^{-3}\ 0.1)$	$(a,\ c) = (10^{-5}\ 2)$
(32, 0.5)	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125
(64, 2)	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125
(128, 8)	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125
(256, 20)	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125	0.0001953125

观察到， α_{opt} 与参数 a、 c、 N_x 和 T 无关。表 1 中的 α_{opt} 值支持选择较小的 α，这与该领域研究人员的常见选择一致。对于一维计算，我们考虑区域 $\Omega = (-1,\ 1)$ 上的初始条件$u_0(x) = e^{-30x^2}$。对于二维计算，初始条件为 $u_0(x,\ y) = e^{-20[(x-1/2)^2+(y-1/2)^2]}$，定义在区域 $\Omega = (0,\ 1) \times (0,\ 1)$ 上。除非另有说明，整个过程中区域和初始条件均保持不变。

7.1.1. 使用 $\mathcal{O}(\Delta t)$ 方案进行 Exp-ParaDiag 实验。在图1的前两幅图中，我们展示了根据定理 2.1 得出的理论误差收缩与数值误差收缩的比较，其中 $T = 1$、 $\Delta t = h = 1/128$, 和 $\alpha_{\text{opt}} = 0.0001953125$。结果表明，离散误差界是紧的。接下来，我们展示一项实验，使用

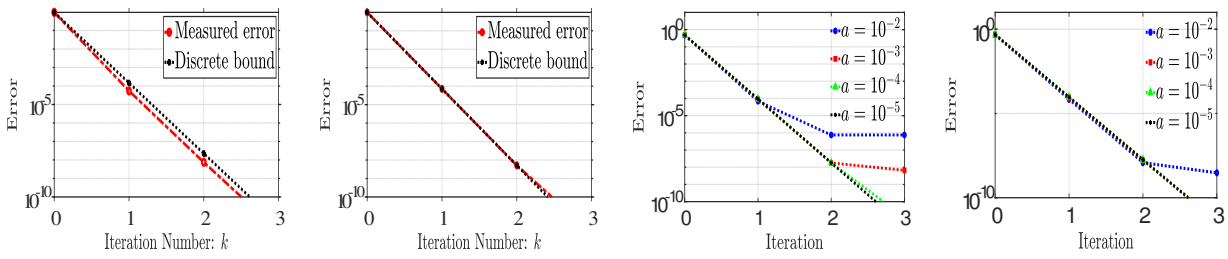

Figure 1. 第一： $(a,\ c) = (0.1,\ 0)$ 的误差比较；第二： $(a,\ c) = (10^{-5},\ 1)$ 的误差比较；第三：二阶精度的 Pad´e 逼近；第四：三阶精度的 Pad´e 逼近。

在 Exp-ParaDiag 中对 A进行 Pad´e 逼近，并在参考解中使用精确的 A 。为了逼近矩阵指数 A =exp$(\Delta t\mathcal{L}_h)$，我们采用 Pad´e 逼近，这种方法具有良好的稳定性和精度特性。具体而言，我们考虑如下 Pad´e 逼近:

$$\exp(\Delta t\mathcal{L}_h) \approx \left(I + \tfrac{1}{2}\Delta t\mathcal{L}_h\right)\left(I - \tfrac{1}{2}\Delta t\mathcal{L}_h\right)^{-1} + \mathcal{O}((\Delta t\mathcal{L}_h)^3),$$

其精度达到二阶，而另一种形式的近似为,

$$\exp(\Delta t\mathcal{L}_h) \approx \left(I + \tfrac{2}{3}\Delta t\mathcal{L}_h + \tfrac{1}{6}(\Delta t\mathcal{L}_h)^2\right)\left(I - \tfrac{1}{3}\Delta t\mathcal{L}_h\right)^{-1} + \mathcal{O}((\Delta t\mathcal{L}_h)^4),$$

其精度达到三阶。在图1的最后两幅图中，我们展示了使用二阶和三阶精度的 Pad´e 近似A时 Exp-ParaDiag 的收敛行为，其中扩散系数 a各不相同， $c = 0$ 取自 (1.2)，且参数 T =2、 $\Delta t = h = 1/128,$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$保持不变。随着参数 a 减小，范数 $\|\Delta t\mathcal{L}_h\|$也随之减小，从而实现更高的收敛精度。此外，更高阶的 Pad´e 近似能够改善收敛效果，尤其是在 a取值较大时。在第一

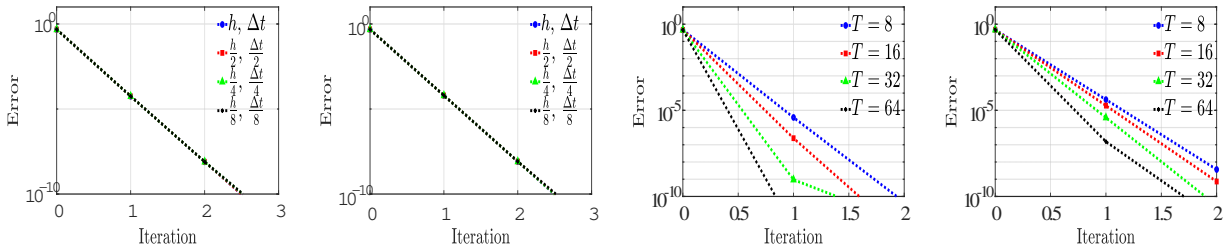

FIGURE 2. 第一： $(a、\ c) = (0.01、\ 0.1)$和 $T = 4$的网格加密；第二： $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$和 $T = 4$的网格加密；第三： $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$的长时间模拟；第四： $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$的长时间模拟。

图2的两幅图中，我们展示了所提方法的网格无关性。初始网格设为 $h = \Delta t = 1/32$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，Exp-ParaDiag方法在不同扩散系数和时间窗口长度下对网格加密保持不敏感。在图2的最后两幅图中，我们展示了Exp-ParaDiag方法在大时间窗口和不同扩散系数下的收敛行为，使用 $\Delta t = h = 1/128$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，该方法收敛迅速。可以看到，在 $T = 64$的情形下，我们求解1, 048, 576个未知量，并在一次迭代内收敛。在图3的前两幅图中，我们给出了不同初始猜测下的收敛行为，包括多项式函数、低频和高频正弦模态以及指数函数，使用 $\Delta t = h = 1/128, \alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 和 $T = 4$。该方法对所有初始猜测的选择以及各种扩散系数均表现良好。在图3的最后两幅图中，我们展示了 $Q_\alpha^{-1}Q$ 的谱，并与定理3.1和引理3.4给出的理论界一并对照，针对不同扩散系数，取 $N_x = 63、\ N_t = 30、\ \alpha = \alpha_{\text{opt}}$和 $T = 0.3$。结果表明，理论界紧密刻画了该谱。在图4的前两幅图中，我们绘制了预处理GMRES在不同时间窗口长度及 a的不同取值下的收敛情况，其中 $h = 1/128, \Delta t = 0.01,$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明收敛迅速，该方法实际上起到了直接求解器的作用。在图4的最后两幅图中，我们

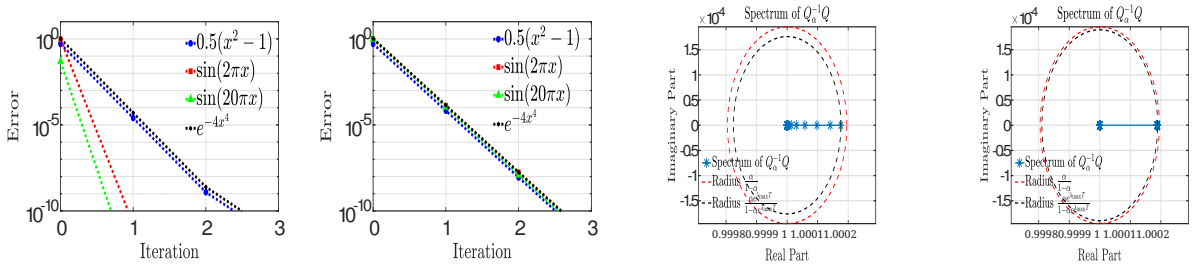

FIGURE 3. 第一： $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$的收敛；第二：$(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$的收敛；第三： $Q_\alpha^{-1}Q$ 的谱及其界限，适用于 $(a\,c)$ =(0.1、 0.1)；第四： $Q_\alpha^{-1}Q$ 的谱及其界限，适用于 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$。

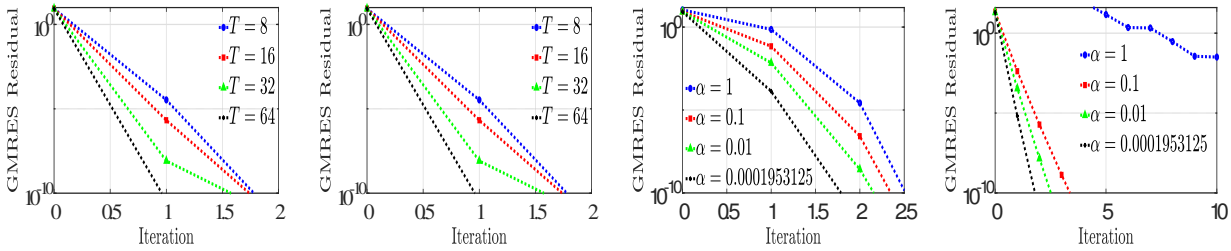

FIGURE 4. 第一：不同 T在 $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$下的收敛；第二：不同 T在 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$下的收敛；第三：不同 α在 $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$下的收敛；第四：不同 α在 $(a、\ c)$ =(0.00001、 0)下的收敛。

展示了预条件GMRES方法在 α取不同值时的收敛情况，其中扩散系数 a 和反应项 c变化，使用 $h = 1/128$, $\Delta t = 0.01$, 和$T = 4$。显然， $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 是自由参数α最有效的选择。相比之下，在纯扩散情形中设置 $\alpha = 1$ 会导致收敛显著变慢。图 5的第一幅图和第二幅图说明了网格无关性，其针对的是

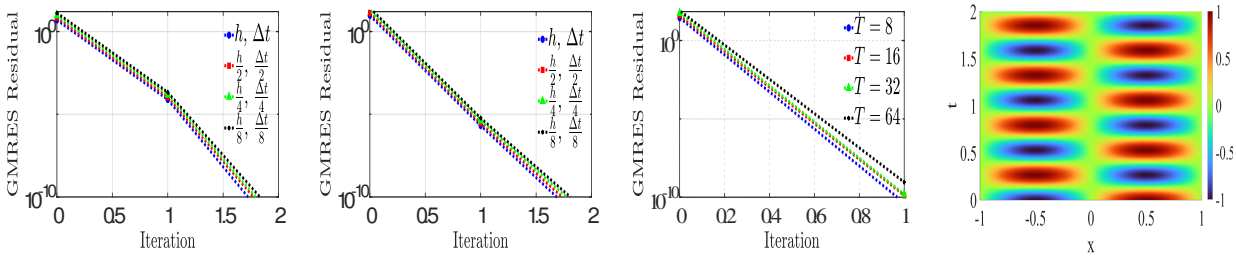

FIGURE 5. 第一：使用 $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$ 时的网格无关性；第二：使用 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$ 时的网格无关性；第三：不同 T 下的收敛性；第四：薛定谔方程解的实部。

不同 a 取值下的预条件GMRES方法，其中 $T = 4$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。从具有 $(h$ 的粗网格开始，$\Delta t) = (1/32, 1/32)$, 我们观察到迭代次数

在连续网格加密下保持不变，这证实了该方法对于离散化参数的稳健性。

接下来，我们通过在（1.2）中设定 $a = \mathrm{i}$ 和 $c = 2\mathrm{i}$，考虑线性薛定谔方程（SE），其中 $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$。我们在这一纯振荡的复值设定下，结合初始条件 $u_0 = \sin(\pi x)$，研究所提出方法的收敛行为。在图 5 的第三幅图中，我们展示了针对不同时间窗口长度、使用 $h = 1/128,\ \Delta t = 0.01,$ and $\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$ 时，应用于 SE 的预处理GMRES 的收敛性。结果表明，所提出的方法仅需一次迭代即可收敛。在最右侧的图中，我们展示了 $h = 1/128,\ \Delta t = 0.01,\ T = 2,$ and$\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$ 时 SE 的解的实部。

7.1.2. $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$ 格式的实验。本节研究使用 BDF2 格式构造的 Exp-ParaDiag方法的收敛行为，分别考察其作为不动点迭代和 GMRES 预条件子的情形。图 6 最左侧的图展示了自由参数 α 取不同值时的误差曲线，针对 $h = \frac{1}{128}$、 $\Delta t = 0.01$ 和 $T = 2$，其中包括最优选择 $\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$。显然，当 Exp-ParaDiag方法用作不动点迭代时，α 取值越小，其收敛性越好。在第二幅图中，我们展示了 $h = \frac{1}{128}$、 $\Delta t = 0.01$ 和 $\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$ 时，针对不同时间窗口大小的 Exp-ParaDiag方法作为不动点迭代的收敛性。我们观察到，收敛性与时间窗口大小无关。在第三幅图和

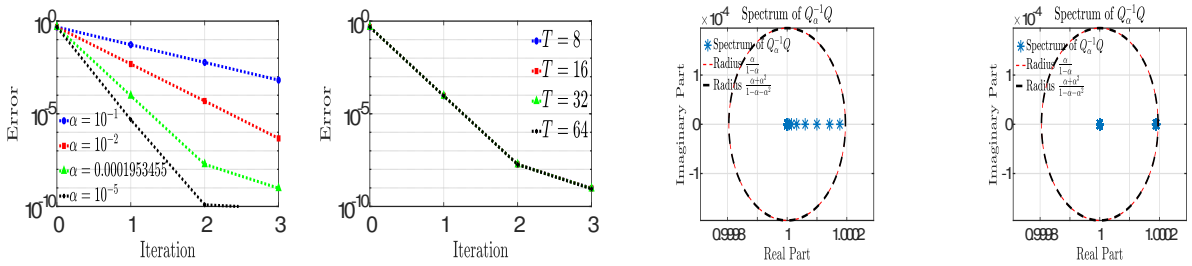

FIGURE 6. 第一：不同 α 在 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0)$条件下的收敛性；第二：不同 T 在 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0)$条件下的收敛性；第三： $Q_\alpha^{-1}Q$的谱及其在 $(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$条件下的界；第四：$Q_\alpha^{-1}Q$ 的谱及其在$(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$条件下的界。

在图6的第四幅图中，我们展示了预条件系统的谱，从而验证了定理 4.1和引理4.5。在图7的前两幅图中，我们展示了 $h = \frac{1}{128}$、 $\Delta t = 0.01$和 $\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$条件下预处理GMRES的收敛性。结果表明，收敛速度非常快，并且与时间窗口大小无关。在图7的最后两幅图中，我们通过设置 $T = 4$和 $\alpha = \alpha_{\mathrm{opt}}$展示了预处理GMRES的网格无关性。网格初始化为 $(h、\ \Delta t) = (1/32, 1/32)$。显然，收敛性与网格参数无关。在图8的前两幅图中，我们展示了不同 α取值、 $\Delta t = h = \frac{1}{128}$ 和 $T = 4$条件下预条件GMRES方法的GMRES残差。结果表明，收敛速度很快，并且随着 α 减小而进一步加快。

接下来，我们考虑双调和热方程 $u_t = -10^{-5}\Delta^2 u$ 及其边界条件$u = 0$ 和 $\Delta u = 0$，以及初始条件 $u_0 = \sin(2\pi x)e^{-15x^2}$。我们应用基于 BDF2 的 Exp-ParaDiag

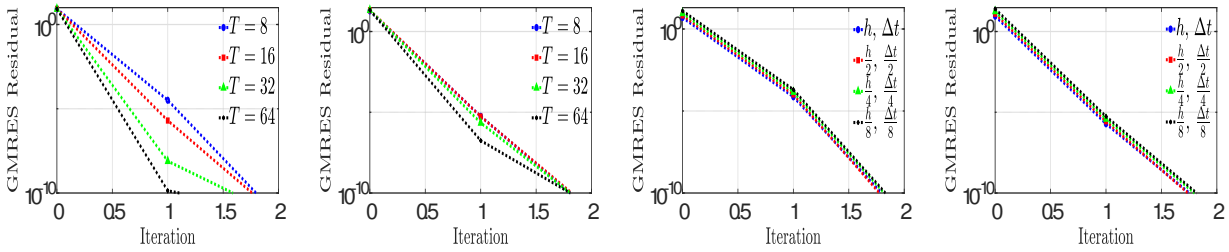

FIGURE 7. 第一：不同 T 下的收敛性，取 $(a、c) = (0.1、0.1)$；第二：不同 T 下的收敛性，取 $(a、c) = (0.00001、0.1)$；第三：$(a、c) = (0.1、0.1)$ 的网格无关性；第四：$(a、c) = (0.00001、0.1)$ 的网格无关性。

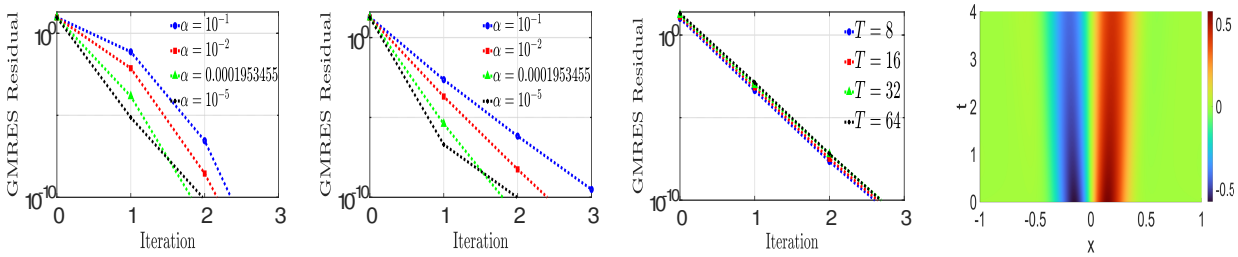

FIGURE 8. 第一：不同 α 下的收敛性，取 $(a、c) = (0.1、0.1)$；第二：不同 α 下的收敛性，取 $(a、c) = (0.00001、0.1)$；第三：T 的网格无关性；第四：截至 $T = 4$ 的解剖面。

方法求解该方程。在图 8 的第三幅图中，我们展示了所提出方法在不同 T 取值下的收敛情况，使用 $h = \frac{1}{128}$、$\Delta t = 0.05$和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，收敛速度快且与时间窗口大小无关。最右侧的图展示了双调和热方程在$h = \Delta t = \frac{1}{128}$、$\alpha = \alpha_{\text{opt}}$和 $T = 4$条件下的解剖面。

7.1.3. 二维实验。本节介绍 Exp-ParaDiag 方法在二维情况下的数值实验，其中该方法既用作不动点迭代，也用作 GMRES 的预条件子，分别应用于一阶和二阶时间步进格式。在图 9 的前两幅图中，我们展示了将 Exp-ParaDiag 方法用作不动点迭代时，在不同 T 取值下改变 a、并取 $h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.05$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 时的误差曲线。可以观察到，收敛速度很快，且与时间窗口大小无关。与一维情形相同，在二维情形下，扩散系数越大，该方法的收敛速度也越快。因此，我们展示较低扩散系数下的结果，以说明该方法的性能。第三幅图展示了在不同 α 取值下，Exp-ParaDiag 方法的收敛行为，其中 $h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.05$ 和 $T = 4$。可以观察到，较小的 α 值会带来更快的收敛。具体而言，α 越接近 α_{opt}，迭代次数方面的收敛效果越好。图 9 最右侧的图展示了 Exp-ParaDiag 方法在网格加密下的收敛行为。我们从一个非常粗的网格开始，$(h、\Delta t) = (1/10, 1/10),$，其中 $T = 4$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，收敛与网格加密无关。

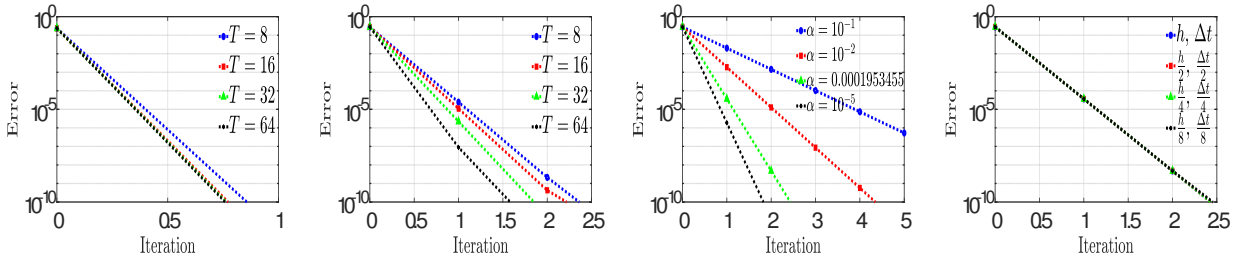

FIGURE 9. 首先：$(a、c) = (0.1、0.1)$下 Exp-ParaDiag 的收敛；其次：$(a、c) = (0.00001、0)$下 Exp-ParaDiag 的收敛；第三：不同 α 下，$(a、c) = (0.00001、0.1)$时的收敛；第四：$(a、c) =(0.00001、0.1)$下的网格无关性。

接下来，我们介绍一阶精度格式下预处理 GMRES 的收敛情况。图 10 的前两幅图展示了在不同 T 取值下改变 a、并取 $h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.5$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 时的误差曲线。可以观察到，收敛速度很快，且与时间窗口大小无关。第三幅图展示了

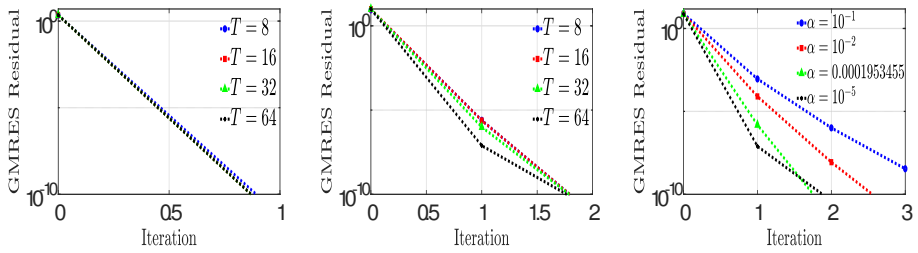

FIGURE 10. 预处理GMRES的收敛；首先：不同 T 下，$(a、c) = (0.1、0.1)$时的结果；其次：不同 T下，$(a、c) = (0.00001、0)$时的结果；第三：不同 α 下，$(a、c) = (0.00001、0.1)$时的结果。

不同 α选择下的收敛行为，其中$h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.05$和 $T = 4$。我们观察到，这与不动点情形下的模式相似。

现在，我们考察基于 BDF2 格式的预条件GMRES方法的收敛行为。图 11 中的前两幅图展示了不同时间范围 T和不同 a取值下的误差曲线，参数设为 $h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.5$和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，收敛不受时间窗口长度的影响。第三幅图展示了不同 α取值下的收敛行为，其中$h = \frac{1}{40}$、$\Delta t = 0.05$和 $T = 4$。我们观察到，较小的 α 值通常会带来更快的收敛。特别是，当 α 取接近最优值 α_{opt}时，性能最佳。

现在我们转而关注薛定谔方程（SE），令 (1.2) 中的 $a = \mathrm{i}$ 和 $c = 200\mathrm{i}$，即可得到该方程。为评估基于 BDF2 格式的预处理GMRES方法的收敛特性，我们将其应用于初始条件为$u_0(x、y) = \exp\left(-\frac{(x-0.5)^2+(y-0.5)^2}{2\mu^2}\right)\exp(-5\mathrm{i}(x-0.5))$ 的 SE，其中 $\mu = 0.05$。我们固定 $h = \frac{1}{40}$ 和 $\Delta t = 0.05$。在图 12 的第一幅图中，我们展示了该方法的收敛行为

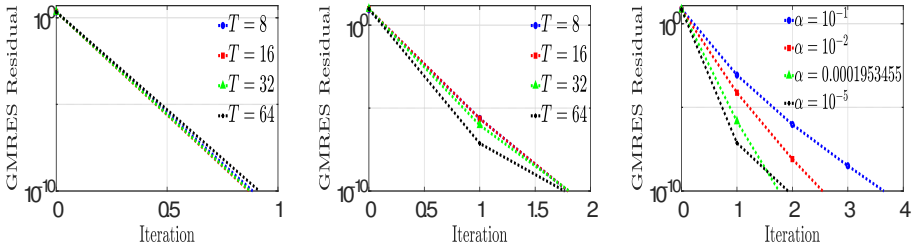

FIGURE 11. 预处理GMRES的收敛；第一：对于不同的 T，其中$(a、\ c) = (0.1、\ 0.1)$；第二：对于不同的 T，其中 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0)$；第三：对于不同的 α，其中 $(a、\ c) = (0.00001、\ 0.1)$。

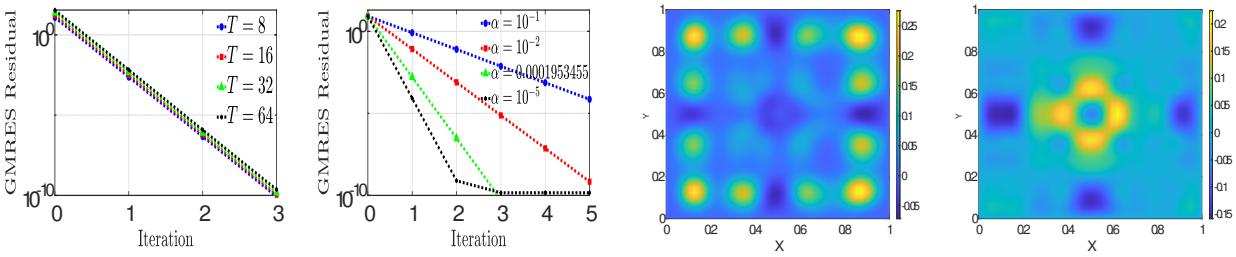

FIGURE 12. 预处理GMRES的收敛；第一：对于不同的 T；第二：对于不同的 α；第三：$T = 1$处薛定谔方程的解；第四：$T = 4$处薛定谔方程的解。

在使用 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 时，针对不同时间窗口长度的表现。结果表明，无论窗口大小如何，该方法始终只需三次迭代即可收敛。在第二幅图中，我们考察 α 的不同取值对收敛的影响。与前述情况一样，α 的取值越小，收敛越快。在图 12 的第三幅和第四幅图中，我们分别展示了使用 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 时，$T = 1$ 和 $T = 4$ 对应的 SE 解的实部。

在表 2 中，我们报告了预处理GMRES和BiCGStab方法应用于纯扩散方程时的 CPU 时间（以秒为单位）。该方程基于一阶和二阶格式构建，其中 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 和 $\Delta t = 0.01$。BiCGStab表现出与GMRES相似的收敛行为，因为预条件系统的谱聚集在1附近，这是BiCGStab的理想情形。由于两种方法都能达到相当的精度，我们重点比较计算时间；在这方面，BiCGStab通过减少收敛所需时间展现出明显优势。

7.1.4. 对流扩散方程实验。本节研究周期边界条件下对流占主导时对流扩散方程（ ADE）的收敛行为，具体考虑方程 $u_t = a\Delta u - 2\nabla u$。图13的前两幅图展示了 Exp-ParaDiag 方法应用于 ADE 时的收敛行为，其中使用了 $h = \Delta t = 1/128$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$，并考察不同时间窗口大小的情况。测试参数从中等扩散逐渐过渡到低扩散，即进入对流主导区域。我们观察到，即使对流占据

TABLE 2. 使用 BDF1 和 BDF2 的预处理GMRES CPU 时间比较（括号内为预处理 BiCGStab 的 CPU 时间）

N_x	N_t	DoF	BDF1		BDF2	
			$a = 10^{-1}$	$a = 10^{-5}$	$a = 10^{-1}$	$a = 10^{-5}$
361	400	144400	0.78(0.55)	0.77(0.55)	0.83(0.59)	0.85(0.58)
	800	288800	0.90(0.51)	1.32(0.91)	1.01(0.54)	1.43(0.96)
	1600	577600	1.61(0.86)	2.37(1.63)	1.76(0.91)	2.59(1.71)
	3200	1155200	3.02(1.52)	4.47(3.03)	3.24(1.66)	4.96(3.22)
	6400	2310400	5.82(2.96)	8.69(5.86)	6.29(3.32)	9.65(6.34)
	12800	4620800	11.41(5.87)	23.19(17.37)	12.92(7.09)	26.06(20.35)
1521	400	608400	30.01(18.96)	30.06(20.24)	32.58(20.31)	32.80(24.41)
	800	1216800	40.31(20.61)	61.73(40.01)	42.85(22.36)	67.18(44.13)
	1600	2433600	86.53(40.00)	130.30(84.65)	88.57(42.74)	141.52(90.69)
	3200	4867200	173.74(88.67)	266.68(175.75)	182.89(89.77)	279.31(187.02)
	6400	9734400	352.91(173.26)	534.92(357.87)	369.05(184.30)	563.47(377.44)
	12800	19468800	706.38(352.36)	1428.76(1054.26)	747.21(374.03)	1510.21(1126.19)

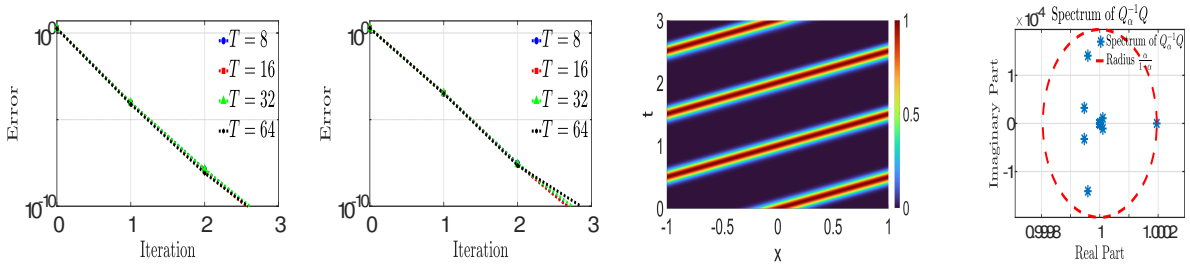

FIGURE 13. 第一：Exp-ParaDiag 与 $a = 0.1$ 的收敛；第二：Exp-ParaDiag 与 $a = 0.00001$ 的收敛；第三：采用 $a = 0.00001$、$h = \Delta t = 1/128$ 和 $T = 3$ 求解 ADE；第四：预条件系统与$a = 0.1$的谱。

绝对主导地位，该方法仍表现出快速收敛。第三幅图展示了使用 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ 的 Exp-ParaDiag 方法计算得到的 ADE 解剖面，时间范围截至 $T = 3$。图13最右侧和图14最左侧的图展示了周期边界条件下、不同扩散系数对应的 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 的谱，所用参数为 $N_t = 30$、$N_x = 65$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。如注 3.7 所述，量 $\frac{\alpha}{1-\alpha}$ 显然构成谱分布的上界。图14的第二幅和第三幅图展示了预处理GMRES方法在不同时间窗口大小和扩散系数下的收敛行为，其中使用了 $h = 1/128, \Delta t = 0.01$ 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。结果表明，该方法收敛迅速，且不受时间窗口大小影响。这一表现与图13中的谱分析一致：如注 3.7 所述，预条件系统 $\mathcal{Q}_\alpha^{-1}\mathcal{Q}$ 的谱严格受限于 $\frac{\alpha}{1-\alpha}$。特征值聚集在这一界限内，解释了 GMRES 在不同参数下能够快速且稳健收敛的原因

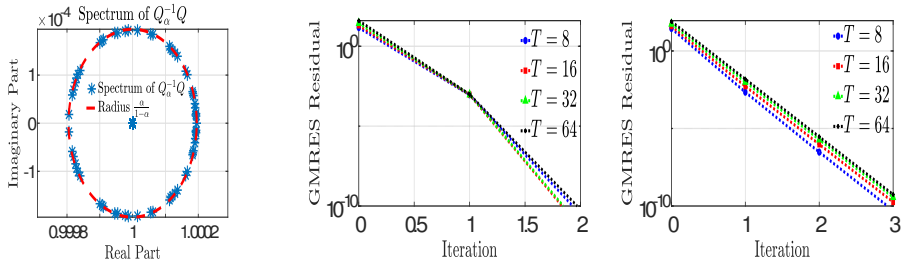

FIGURE 14. 第一幅：预条件系统的谱，其中 $a = 0.00001$；第二幅：Exp-ParaDiag 的收敛情况，其中 $a = 0.1$；第三幅：Exp-ParaDiag 的收敛情况，其中 $a = 0.00001$。

设置。对于采用二阶至六阶 BDF 格式的 Exp-ParaDiag 方法，也观察到了类似的收敛行为；为简洁起见，省略具体细节。

7.1.5. $\mathcal{O}((\Delta t)^s)$ 格式的实验，针对 $3 \leqslant s \leqslant 6$。本节介绍基于第三至第六阶 BDF 格式的 Exp-ParaDiag 方法的数值实验。该方法在第5节中提出，并应用于一维空间中式 (1.2) 的纯扩散情形（$c = 0$）。所有实验中，我们固定 $\Delta t = 0.05$、 $h = 1/128$, 和 $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$。我们考察该方法在不同时间窗口长度和扩散系数下的性能。图15的前两幅图展示了基于 BDF3 格式的 Exp-ParaDiag 方法的收敛行为，最后两幅图则展示了 BDF4 格式下的收敛情况。在所有情形下，该方法均表现出快速收敛。图16的前两幅图展示了

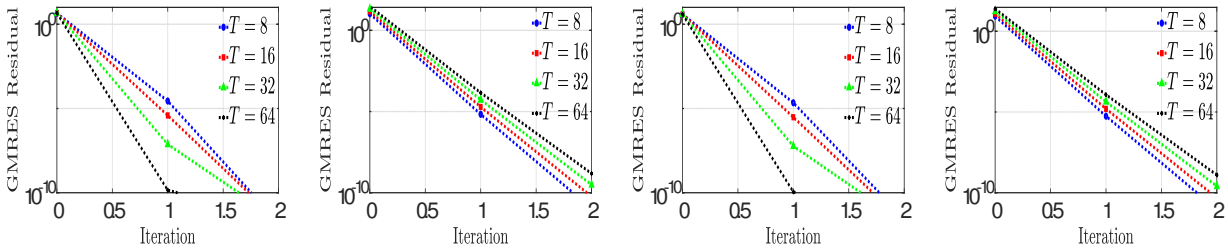

FIGURE 15. 第一：采用 $a = 0.1$的 BDF3 Exp-ParaDiag；第二：采用 $a = 0.00001$的 BDF3 Exp-ParaDiag；第三：采用 $a = 0.1$的 BDF4 Exp-ParaDiag；第四：采用 $a = 0.00001$的 BDF4 Exp-ParaDiag。

采用五阶后向微分公式格式实现的 Exp-ParaDiag方法的收敛趋势，而最后两幅图展示的是采用六阶后向微分公式格式得到的结果。在所有情况下，该方法都能高效、快速地收敛。所提出的采用高阶BDF格式的 Exp-ParaDiag方法具有网格无关性。二维情况下也观察到了类似的收敛模式，因此这里省略细节（因为收敛图相似）。

7.2. 非线性情形中的实验。本节展示 Exp-ParaDiag方法应用于若干非线性偏微分方程时的一些数值结果。我们首先讨论

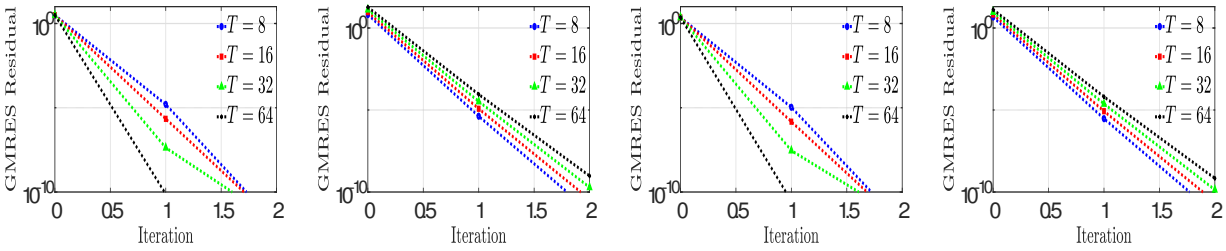

FIGURE 16. 第一：采用 $a = 0.1$ 的 BDF5 Exp-ParaDiag；第二：采用 $a = 0.00001$ 的 BDF5 Exp-ParaDiag；第三：采用 $a = 0.1$ 的 BDF6 Exp-ParaDiag；第四：采用 $a = 0.00001$ 的 BDF6 Exp-ParaDiag。

艾伦-卡恩方程，其中我们选取源项 $s_f(x,t)$，使精确解为$u(x,t) = 0.5e^{-t}\cos(2\pi x)$。方程如下：

$$\begin{cases} u_t = \epsilon^2 \Delta u - (u^3 - u) + s_f(x,t), \text{in } \Omega = (0,1), \text{ and } \epsilon = 0.01, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \text{ on } \partial\Omega, \text{and } u(x,0) = 0.5\cos(2\pi x) \text{ for } x \in \Omega. \end{cases} \tag{7.1}$$

在图17中，我们绘出了 $T = 0.1$处使用（6.5）进行第一次迭代后的精确解、Exp-ParaDiag 解和逐点误差。最右侧的图显示了使用（6.5）中的 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \text{diag}(\mathcal{N}'(\mathbf{u}_0))$ 计算的第二次迭代后的逐点误差。接下来，

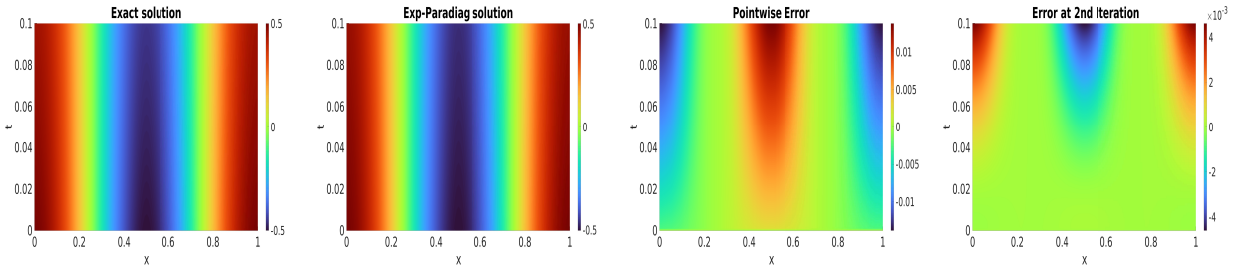

FIGURE 17. 采用 $h = 1/128, \alpha = 0.005$ 和 $N_t = 100$ 时，$T = 0.1$ 处的解与误差比较。第一：精确解；第二：Exp-ParaDiag 解；第三：第一次迭代后的逐点误差；第四：对于 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \text{diag}(\mathcal{N}'(\mathbf{u}_0))$，使用（6.5）进行第二次迭代后的逐点误差。

我们考虑以下非线性反应扩散方程：

$$\begin{cases} u_t = \Delta u - u^p, \text{in } \Omega = (0,1), \text{ and } p > 1, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \text{ on } \partial\Omega, \text{and } u(x,0) = 0.1\cos(2\pi x) \text{ for } x \in \Omega. \end{cases} \tag{7.2}$$

图18中的前两幅图展示了 Exp-ParaDiag 在不同雅可比矩阵近似和不同非线性程度下的收敛情况。我们观察到，随着 p 增大，收敛性有所改善，这主要是因为对于 $u_0 \in (-1, 1)$，非线性项的贡献会随着 p增大而减小。此外，即使使用初始解来近似雅可比矩阵，Exp-ParaDiag 仍表现出良好的收敛性。

接下来，我们提出一种构造非线性格式 (6.1) 的 Exp-ParaDiag 的替代方法，即将非线性项视为在先前迭代中求得的值。具体步骤

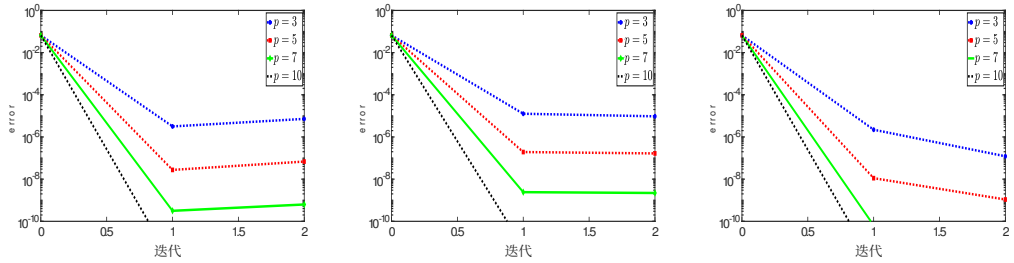

FIGURE 18. Exp-ParaDiag 对 (7.2) 的收敛性，其中 $h = 1/128$, $N_t = 500$,$\alpha = 0.005$, 以及 $T = 0.5$。左：格式 (6.5)；中：在初始解处的雅可比近似，即 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \text{diag}(\mathcal{N}'(\mathbf{u}_0))$ 在 (6.5) 中；右：格式 (7.3)。

如下：

$$\begin{cases} \mathbf{u}_n^k = e^{\Delta t \mathcal{L}_h} \mathbf{u}_{n-1}^k + \Delta t \mathcal{N}(\mathbf{u}_n^{k-1}) \, , n = 1, 2, \cdots, N_t, \\ \mathbf{u}_0^k = \alpha \mathbf{u}_{N_t}^k - \alpha \mathbf{u}_{N_t}^{k-1} + \mathbf{u}_0. \end{cases} \tag{7.3}$$

在这种情况下，整体系统的形式为

$$(I_t \otimes I_x)\mathcal{U}^k - (C_0^\alpha \otimes A)\mathcal{U}^k = \hat{\mathbf{r}}^{k-1} := \Delta t \, \text{diag}\left(\mathcal{N}(\mathbf{u}_1^{k-1}), \mathcal{N}(\mathbf{u}_2^{k-1}), \cdots, \mathcal{N}(\mathbf{u}_n^{k-1})\right) + \mathbf{b}^{k-1}. \tag{7.4}$$

然后，我们可以采用通常的三个步骤来求解 (7.4)。此时这显然易见，因此这里略去相关细节。将这一过程应用于 (7.2) 时的收敛情况如图18最右侧的图所示。接下来，我们在 (1.1) 中取 $\mathcal{N}(u) = -\exp(u)$ 和 $\mathcal{L} = a\Delta$，其边界条件和初始条件由 (7.2) 指定。基于这一考虑，我们继续应用过程 (7.3)。在图19最左侧的图中，我们

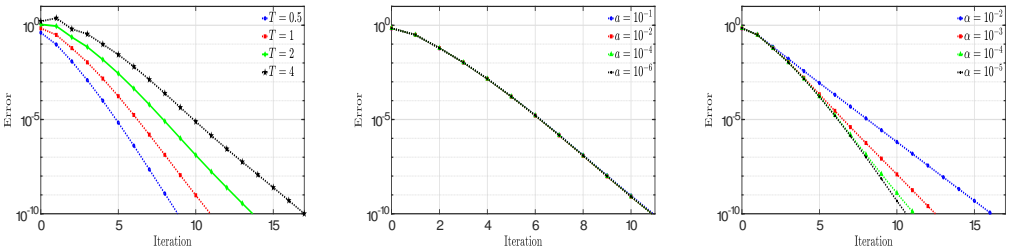

FIGURE 19. Exp-ParaDiag 的收敛性，取 $h = 1/256$ 和 $\Delta t = 10^{-3}$。左：不同的 T；中：不同的扩散系数 a；右：不同的 α。

展示了在不同时间窗口大小下，Exp-ParaDiag (7.4) 在 $a = 1$和 $\alpha = 0.00005$ 条件下的收敛情况。我们观察到其收敛性具有鲁棒性。中间的图展示了在 $T = 1$ 和 $\alpha = 0.00005$ 条件下，不同扩散系数对应的误差曲线，表明收敛性与 a 的选择无关。最右侧的图展示了在 $T = 1$ 和 $a = 0.01$ 条件下，自由参数 α 取不同值时的收敛情况。可以看出，收敛性始终保持一致。

接下来，我们考虑带有 $\mathcal{N}(u) = u - u^2$ 和 $\mathcal{L} = a\Delta$ 的 Fisher方程 (1.1)，其具有齐次狄利克雷边界条件和初始条件 $u(x, 0) = \text{sech}^2(10x)$，其中 $\Omega = (-1, 1)$。图20展示了牛顿法得到的解、Exp-Para Diag 近似，

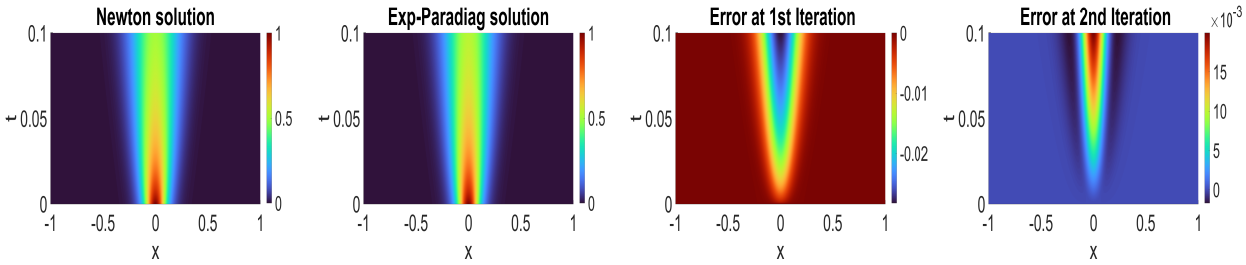

FIGURE 20. 在 $T = 0.1$ 时的解与误差比较，其中 $h = 1/128, \alpha$ =0.0005， $a = 0.1$ ，且 $N_t = 100$。第一幅：牛顿解；第二幅：Exp-ParaDiag 解；第三幅：第一次迭代后的误差；第四幅：第二次迭代后的误差，针对 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \text{diag}(\mathcal{N}'(\mathrm{u}_0))$ （见式 (6.5)）。

以及 (6.5) 经过第二次迭代后在 $T = 0.1$ 处的逐点误差。最右侧面板展示了使用 (6.5) 中的 $\bar{\mathcal{N}}(\mathcal{U}^k) := I_t \otimes \text{diag}(\mathcal{N}'(\mathrm{u}_0))$ 计算得到的第一次迭代后的逐点误差。现在，我们将 (7.3) 应用于 Fisher方程。图21展示了不同设置下 Exp-ParaDiag (7.4) 的收敛情况。左图表明，在 $a = 0.01$ 和 $\alpha = 0.0005$条件下，对于不同的时间窗口大小，均能稳健收敛。中图证实，对于 $T = 1$, $N_t = 1000$ 和$\alpha = 0.0005$，收敛不受 a变化的影响。右图显示，对于 $T = 1, N_t = 1000$ 和 $a = 0.1$，不同的 α 值下表现一致。

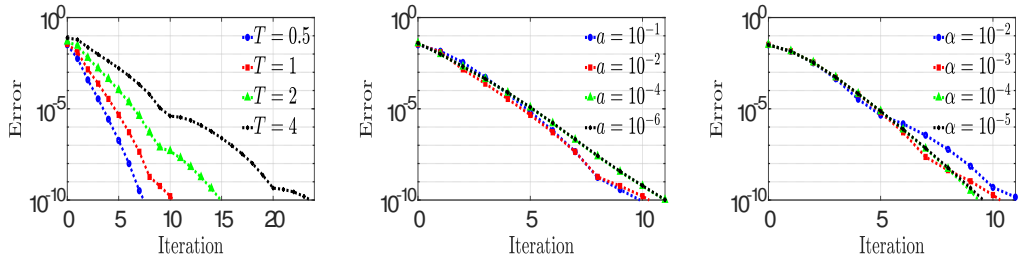

FIGURE 21. Exp-ParaDiag 的收敛性，其中 $h = 1/128$ 和 $\Delta t = 10^{-3}$。左：不同的 T；中：不同的扩散系数 a；右：不同的 α。

7.2.1. 二维实验。在二维情形下，我们考虑单位正方形上的 Allen–Cahn方程，其满足齐次狄利克雷边界条件，初始条件为 $u_0 = 0.1 \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)$。图22的前三幅图比较了采用式 (7.4) 得到的牛顿解与 Exp-ParaDiag 解，以及它们在时刻 $T = 0.5$的误差，参数为 $\epsilon = 0.01$ 和 $\alpha = 0.005$。最右侧的图展示了采用式 (7.4) 的 Exp-ParaDiag方法在不同 ϵ取值下的收敛性，其中 $T = 0.5$ 和 $\alpha = 0.005$。

8. CONCLUSION

在本研究中，我们提出了指数型 ParaDiag（Exp-ParaDiag）方法，这是一种新颖的时间并行积分框架，将指数积分器的高效性与 ParaDiag 范式相结合。通过将指数时间离散引入

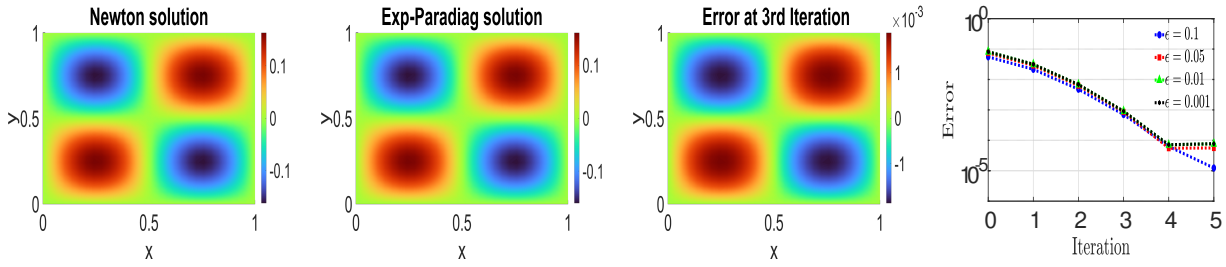

FIGURE 22. Exp-ParaDiag在 $h = 1/30$ 和 $\Delta t = 10^{-3}$ 下于 T =0.5处的收敛。第一：牛顿解；第二：Exp-ParaDiag解；第三：逐点误差；第四：不同 ϵ的收敛。

ParaDiag结构，所提出的方法为刚性和非刚性偏微分方程提供了一种可扩展且计算高效的求解器。

Exp-ParaDiag算法已从两个互补的视角进行了分析：作为不动点迭代，以及作为GMRES方法的预条件子。这种双重解释有助于全面理解其收敛性质与计算特性。此外，我们已通过高阶指数积分器扩展了该表述，以实现六阶时间精度。该方法亦已推广至非线性问题，并在适当假设下建立了其收敛性。大量数值实验证实了理论分析，并表明所提方法具有稳健性、可扩展性与高效性。

未来的研究将聚焦于通过矩阵指数的低秩近似与有理Krylov近似来提高该方法的计算效率，实现分布式并行计算框架，并将本工作扩展到具有时变系数的线性问题、波动方程以及空间分数阶情形。

ACKNOWLEDGMENT

作者谨向 IISER Thiruvananthapuram 数学学院提供的优良科研环境表示感谢。NC 感谢 SERB、印度科学技术部的资助（CRG/2022/006421）。

REFERENCES

[1] J. A. ACEBRON, J. R. HERRERO, AND J. MONTEIRO, *A highly parallel algorithm for computing the action of a matrix exponential on a vector based on a multilevel monte carlo method*, 《计算与应用数学》79（2020），第 3495–3515 页。[2] A. H. AL-MOHY AND N. J. HIGHAM, *Computing the action of the matrix exponential with an application to exponential integrators*, SIAM 科学计算杂志，（），第 – 页。[3] D. A. BINI, G. LATOUCHE, AND B. MEINI, *Numerical methods for structured Markov chains*, 美国牛津大学出版社，2005 年。[4] J. P. BOYD, *Chebyshev and Fourier spectral methods*, Courier Corporation，2001 年。[5] C. CANUTO, M. Y. HUSSAINI, A. QUARTERONI, A. THOMAS JR, ET AL., *Spectral methods in fluid dynamics*, 施普林格科学与商业媒体，2012 年。

[6] V. Dimitrov, V. Ariyarathna, D. F. Coelho, L. Rakai, A. Madanayake, and R. J. Cintra, *A parallel method for the computation of matrix exponential based on truncated neumann series*, 载于 2017 年 IEEE 第 24 届计算机算术研讨会（ARITH），IEEE，2017 年，第 35–42 页。[7] S. C. Eisenstat, H. C. Elman, and M. H. Schultz, *Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations* 20 1983 345 357 ，SIAM 数值分析杂志，（），第 – 页。[8] H. C. Elman, *Iterative methods for large, sparse, nonsymmetric systems of linear equations*，耶鲁大学，1982 年。[9] B. Fornberg and T. A. Driscoll, *A fast spectral algorithm for nonlinear wave equations with linear dispersion* 155 1999 456 467 ，《计算物理学杂志》，（），第 – 页。[10] M. J. Gander, *50 years of time parallel time integration*，载于《多重打靶与时间区域分解方法: MuS-TDD》，海德堡，2013年5月6日至8日，施普林格，2015 年，第 69–113 页。[11] M. J. Gander and L. Halpern, *Time parallelization for nonlinear problems based on diagonalization*，载于《科学与工程中的区域分解方法 XXIII》，施普林格，2017 年，第 163–170 页。[12] M. J. Gander and T. Lunet, *Time Parallel Time Integration*，工业与应用数学学会，2024年。[13] M. J. Gander and S. L. Wu, *Convergence analysis of a periodic-like waveform relaxation method for initial-value problems via the diagonalization technique* 143 2019 489 527 ，《数值数学》，（），第 – 页。[14] G. Garai and B. C. Mandal, *Diagonalization based parallel-in-time method for a class of fourth order time dependent pdes* 215 2024 21 42 ，《数学与计算机模拟》，（），第 – 页。[15] , *Integrating factor-based time integrators for the cahn–hilliard equation*，《应用科学中的数学方法》，（2024）。[16] S. Gaudreault and J. A. Pudykiewicz, *An efficient exponential time integration method for the numerical solution of the shallow water equations on the sphere* 322 2016 827 ，《计算物理学杂志》，（），第 – 848 页。[17] M. Hochbruck and C. Lubich, *On krylov subspace approximations to the matrix exponential operator*，SIAM 数值分析杂志，34（1997），第 1911–1925 页。[18] L. Ju, X. Li, and Z. Qiao, *Generalized sav-exponential integrator schemes for allen–cahn type gradient flows*，SIAM 数值分析杂志，60（2022），第 1905–1931 页。[19] S. J. Li, L. S. Luo, Z. J. Wang, and J. Ju, *An exponential time integrator scheme for steady and unsteady inviscid flows* 365 2018 206 225 ，《计算物理学杂志》，（），第 – 页。[20] X.-l. Lin and M. Ng, *An all-at-once preconditioner for evolutionary partial differential equations*，SIAM 科学计算杂志，43（2021），第 A2766–A2784 页。[21] P. Linz, *Analytical and numerical methods for Volterra equations*，SIAM，1985 年。[22] J. Liu and S.-L. Wu, *A fast block α-circulant preconditoner for all-at-once systems from wave equations*，SIAM 矩阵分析与应用杂志，41（2020），第 1912–1943 页。[23] Y. Maday and E. M. Rønquist, *Parallelization in time through tensor-product space–time solvers*，《法国科学院数学论丛》´，346（2008），第 113–118 页。[24] E. McDonald, J. Pestana, and A. Wathen, *Preconditioning and iterative solution of all-at-once systems for evolutionary partial differential equations* 40 2018 1012 ，SIAM 科学计算杂志，（），第 A – A1033 页。[25] C. Moler and C. Van Loan, *Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix twenty-five years later* 45 2003 3 49 ，SIAM 评论，（），第 – 页。[26] Y. Saad, *Analysis of some krylov subspace approximations to the matrix exponential operator*，SIAM 数值分析杂志，29（1992），第 209–228 页。[27] , *Iterative methods for sparse linear systems*，SIAM，2003 年。[28] E. Süli and D. F. Mayers, *An introduction to numerical analysis*，剑桥大学出版社，2003 年。[29] S.-L. Wu and T. Zhou, *Parallel implementation for the two-stage sdirk methods via diagonalization*，《计算物理学杂志》428（2021），第 110076 页。

Institute of Mathematics, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic
Email address: garai@math.cas.cz

School of Mathematics, Indian Institute of Science Education and Research Thiruvananthapu-ram, India*Email address*: nagaiah.chamakuri@iisertvm.ac.in