

УДК 519.61, 519.63, 519.688

Об эффективном численном решении начально-краевых задач*

Я.Л. Гурьева, В.П. Ильин

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,
просп. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

E-mails: yana@lapasrv.sccc.ru (Гурьева Я.Л.), ilin@sscc.ru (Ильин В.П.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 19, 2026.

Гурьева Я.Л., Ильин В.П. Об эффективном численном решении начально-краевых задач // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2026. — Т. 29, № 4. — С. 357–371.

Рассматриваются вопросы построения эффективных методов решения многомерных начально-краевых задач, обеспечивающих необходимую точность численных результатов при минимальных по возможности затратах ресурсов суперкомпьютеров. Исследуются линейные самосопряжённые уравнения параболического типа, аппроксимируемые с помощью неявных схем Кранка–Николсона со вторым порядком по пространству и времени. Для решения систем сеточных алгебраических уравнений на каждом временном шаге применяются итерационные дефляционные алгоритмы сопряжённых направлений с расширением пространств Крылова путём использования полученных результатов с предыдущих временных шагов. Рассматривается комбинирование предложенных подходов с методами типа предиктор–корректор. Эффективность данных вычислительных технологий демонстрируется результатами экспериментальных расчётов на модельном примере. Обсуждаются вопросы машинного обучения и проблемы высокопроизводительного математического моделирования с автоматизацией построения алгоритмов на основе анализа свойств задачи.

DOI: 10.15372/SJNM20260402

EDN: HQOHSE

Ключевые слова: нестационарная краевая задача, неявные сеточные аппроксимации, дефляционные методы сопряжённых направлений, сходимость итераций, численный эксперимент.

Gurieva Y.L., Ilin V.P. On an efficient numerical solution of initial boundary value problems // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2026. — Vol. 29, № 4. — P. 357–371.

This paper examines the development of efficient methods for solving multidimensional initial boundary value problems ensuring the required accuracy of numerical results while minimizing the use of supercomputer resources. Linear self-adjoint parabolic equations approximated by implicit second-order Crank–Nicolson schemes in space and time are studied. Iterative deflation algorithms in conjugate directions with an extension of the Krylov spaces by using results obtained at previous time steps are used to solve systems of algebraic grid equations at each time step. A combination of these approaches with predictor–corrector methods is considered. The efficiency of these computational technologies is demonstrated by the results of experimental calculations using a representative series of model examples. Machine learning and high-performance mathematical modeling with automated algorithm construction based on analysis of the problem are discussed.

Keywords: unsteady boundary value problem, implicit grid approximations, deflation conjugate direction methods, iteration convergence, numerical experiment.

*Исследования выполнены в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект FWNM-2025-0001).

1. Введение

Численное решение нестационарных многомерных краевых задач — одна из самых сложных и ресурсоёмких проблем вычислительной математики и предсказательного моделирования, так как именно соотношения пространственных и временных зависимостей определяют свойства процессов и явлений реального мира. Разнообразные динамические режимы, в том числе высокочастотного или взрывного характера, предъявляют высокие требования к методологиям суперкомпьютерных исследований эволюции окружающей действительности [1].

Сеточные аппроксимации исходных уравнений в частных производных после дискретизации по пространственным переменным приводят к системам обыкновенных дифференциальных уравнений высокого порядка (с числом неизвестных функций от времени до 10^9 и выше), для которых существует хорошо развитая теория построения устойчивых методов высокого порядка точности [2], являющихся перспективной основой для многомерных задач. Мы рассматриваем параметризованные вычислительные схемы, которые в частных случаях дают неявный метод Кранка–Николсон со вторым порядком по времени и пространству, а также явный и неявный методы Эйлера первого порядка точности по времени. Отметим, что для явных методов условие устойчивости Куранта в задачах диффузионного типа при достаточно малых шагах пространственной сетки требует слишком большого количества временных шагов, поэтому целью данной работы является разработка и исследование итерационных алгоритмов для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами больших порядков, которые возникают при аппроксимации Кранка–Николсон. Для случая симметричных положительно-определённых систем показано, что схема Кранка–Николсон является абсолютно устойчивой в евклидовой метрике и имеет порядок точности $O(\tau^2 + h^2)$, где τ , h — характерные шаги сетки по времени и пространству (обобщение теоремы Лакса).

Поскольку в практических задачах числа обусловленности СЛАУ относительно невелики и составляют $O(\tau/h^2)$, мы для их решения используем итерационные процессы в подпространствах Крылова, а именно разработаны дефляционные методы сопряжённых направлений, основанные на расширении крыловских подпространств путём привлечения численных результатов, полученных на предыдущих временных шагах. Кроме того, для улучшения начальных итерационных приближений используются методы типа предиктор–корректор. Предложенные подходы экспериментально исследуются на представительной серии модельных задач. Приведённые результаты свидетельствуют о возможности конструирования практически безытерационных неявных алгоритмов для решения многомерных начально-краевых задач.

Настоящая работа построена следующим образом. В пункте 2 описываются свойства рассматриваемых начально-краевых задач и их дискретные формулировки. Пункт 3 посвящён изложению итерационных методов сопряжённых направлений дефляционного типа, использующих расширения пространств Крылова. Он содержит анализ результатов экспериментального исследования разработанных алгоритмов на представительной серии методических примеров. В заключении обсуждаются вопросы обобщения предлагаемых подходов и технологии их развития для машинного обучения и математического моделирования.

2. Особенности постановки рассматриваемых начально-краевых задач

Целью данной работы является разработка и исследование достаточно универсальных и эффективных численных методов для решения многомерных начально-краевых задач. Их рассмотрение мы представим на линейной задаче параболического типа [1]

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mu \nabla u) + f(t, \vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega, \quad t \in (0, T), \\ \ell u|_{\vec{r} \in \Gamma} &= g(\vec{r}), \quad u|_{t=0} = u^0(\vec{r}), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mu(\vec{r})$ — кусочно-гладкая функция, характеризующая материальные свойства среды, ℓ — оператор краевых условий на границе Γ ограниченной расчётной области Ω . В дальнейшем для простоты изложения будем полагать $g(\vec{r}) = 0$. Численное решение для (1) будем искать на сетке с характерными шагами τ, h по пространству и времени. Предполагается, что все исходные данные удовлетворяют условиям, обеспечивающим гладкость искомой функции $u(t, \vec{r})$, необходимую для сходимости приближённых решений к точному при $\tau, h \rightarrow 0$.

Отметим, что после пространственной аппроксимации задачи (1) с учётом краевых условий (методами конечных разностей, конечных элементов или разрывными алгоритмами Галёркина различных порядков) мы приходим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), для которых имеется хорошо развитая теория методов численного интегрирования высокой точности с многообразными свойствами устойчивости (см. [2] и цитируемую там литературу).

Мы ограничимся рассмотрением одношаговых вычислительных схем вида

$$u^{n+1} - u^n = \tau [M(\theta u^{n+1} + (1 - \theta)u^n) + \theta f^{n+1} + (1 - \theta)f^n], \quad (2)$$

где значения $\theta = 0, 1, 0.5$ соответствуют явному и неявному методам Эйлера, а также алгоритму Кранка–Николсон. Разреженная матрица M , порождаемая аппроксимацией дифференциального “пространственного” оператора, предполагается симметричной отрицательно-определённой. Здесь u^n — решение задачи (2), а $f^n = f(t_n, r_i)$ — соответствующая вектор-функция в момент времени $t = t_n$, где r_i — координаты i -го сеточного узла.

Как следует из (2), на каждом временном шаге требуется решить СЛАУ

$$\begin{aligned} Au^{n+1} &= \bar{f}^n, \quad \bar{f}^n, u^{n+1} \in \mathbb{R}^N, \quad A \in \mathbb{R}^{N,N}, \\ A &= I - \tau\theta M, \quad \bar{f}^n = u^n + \tau[(1 - \theta)Mu^n + \theta f^{n+1} + (1 - \theta)f^n], \end{aligned} \quad (3)$$

где N — общее число расчётных узлов пространственной сетки. В дальнейшем матрицу A будем считать стилтесовой, т.е. неразложимой симметричной положительно-определённой матрицей с диагональным преобладанием и неположительными внедиагональными элементами.

Заметим, что явные схемы являются условно устойчивыми, для которых выполняется соотношение

$$\|I + \tau M\| \leq 1, \quad (4)$$

а схема Кранка–Николсон абсолютно устойчива в евклидовой метрике, порождаемой скалярным произведением $(u, u) = \|u\|_2^2$. Отметим, что в работах различных авторов

исследовались варианты явных схем с ослаблением условия устойчивости, см., например, [3] и цитируемую там литературу.

Нетрудно показать, что ошибка точного сеточного решения $z^n = (u)^n - u^n$, где $(u)^n$ — вектор значений решения задачи (1) в узлах пространственной сетки при $t = t_n$, а u^n — решение СЛАУ (3), удовлетворяет сеточному уравнению

$$\left(I - \frac{\tau}{2}M\right)z^{n+1} = \left(I + \frac{\tau}{2}M\right)z^n + \tau\psi^n, \quad \psi^n = \psi_\tau^n + \psi_h^n. \quad (5)$$

Здесь $\psi_\tau^n = O(\tau^2)$, $\psi_h^n = O(h^m)$ суть погрешности аппроксимации по времени и пространству, где для простоты считаем $m = 1$ или $m = 2$ для равномерной или неравномерной сеток соответственно.

Можно показать, что если на каждом n -м временном шаге СЛАУ (3) решается с достаточно хорошей точностью, когда $r^{n+1} = \bar{f}^{n+1} - Au_\varepsilon^{n+1} = O(\varepsilon)$, $\varepsilon \ll 1$, то результирующая вычислительная ошибка $z_\varepsilon^n = (u)^n - u_\varepsilon^n$ удовлетворяет соотношениям

$$\left(I - \frac{\tau}{2}M\right)z_\varepsilon^{n+1} = \left(I + \frac{\tau}{2}M\right)z_\varepsilon^n + \tau\psi_\varepsilon^n, \quad \psi_\varepsilon^n = \psi^n + O(\varepsilon). \quad (6)$$

Отсюда следует оценка $\|z^{n+1}\| \leq \|(I - \frac{\tau}{2}M)^{-1}\| \|I + \frac{\tau}{2}M\| \|z^n\| + \tau\|\psi^n\|$. В работе [14] показано, что, поскольку аппроксимационная и итеративная погрешности входят в оценку ошибки аддитивным образом, схема Кранка–Николсон (2) сходится в евклидовой метрике, т. е. $\|z_\varepsilon^n\| = O(\tau^2 + h^2 + \varepsilon)$.

Исходя из оценок погрешностей аппроксимации схемы Кранка–Николсон, целесообразный выбор шагов сетки по времени составляет $\tau = O(h^{m/2})$. А поскольку элементы матрицы M в (3) имеют порядок $O(h^{-2})$, то СЛАУ (3) является, как правило, хорошо обусловленной. Поэтому для её решения мы будем применять итерационные методы в подпространствах Крылова без применения предобуславливающих матриц, реализация которых, как правило, существенно увеличивает ресурсоёмкость каждого шага. Мы рассмотрим алгоритмы сопряжённых направлений, общая форма которых имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} r^0 &= \bar{f} - Au^0, \quad p^0 = r^0, \\ k = 0, 1, \dots: \quad \rho_k &= (A^\gamma p^k, p^k), \quad u^{k+1} = u^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = \sigma_k / \rho_k, \\ r^{k+1} &= r^k - \alpha_k A p^k, \quad \sigma_k = (A^{\gamma-1} r^k, r^k), \quad p^{k+1} = r^{k+1} + \beta_k p^k, \quad \beta_k = \sigma_{k+1} / \sigma_k, \\ \gamma = 2: \quad A p^{k+1} &= A r^{k+1} + \beta_k A p^k, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\gamma = 1$ соответствует методу сопряжённых градиентов, а $\gamma = 2$ — методу сопряжённых невязок в формулировках Хестенеса–Штифеля, см. [4–6] и цитируемые там работы. Отметим, что в последней строке (7) при $\gamma = 2$ вычисление векторов $A p^k$ делается во избежание повторного умножения векторов на матрицу A на каждой итерации.

Данные алгоритмы минимизируют на каждой итерации функционал

$$\Phi_\gamma(r^k) = (A^{\gamma-2} r^k, r^k) \quad (8)$$

в подпространствах Крылова

$$\mathcal{K}_k(r^0, A) = \text{Span}(r^0, A r^0, \dots, A^{k-1} r^0). \quad (9)$$

Кроме того, эти методы обладают следующими ортогональными свойствами:

$$(A^\gamma p^k, p^l) = \rho_k \delta_{k,l}, \quad (A^{\gamma-1} r^k, r^l) = \sigma_k \delta_{k,l}, \quad (p^k, A^{\gamma-1} r^l) = 0 \quad \text{при } k < l, \quad (10)$$

где $\delta_{k,l}$ — символ Кронекера. Точнее говоря, именно эти условия и обеспечивают вариационные свойства оптимальности итерационных процессов (7). Практическим критерием окончания итераций является выполнение условия

$$(r^k, r^k) \leq \varepsilon^2(\bar{f}, \bar{f}), \quad \varepsilon \ll 1, \quad (11)$$

для достижения которого достаточно выполнить число итераций

$$n(\varepsilon) \leq \frac{1}{2} \sqrt{\kappa} \ln \frac{2}{\varepsilon}, \quad \kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}. \quad (12)$$

Здесь $\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ — число обусловленности матрицы A , а $\lambda_{\max}$ и $\lambda_{\min}$ — её максимальное и минимальное собственные числа.

Оценка (12) справедлива для любого начального приближения в (7), однако очевидно, что при выборе достаточно хорошего u^0 можно сократить количество итераций. В этом плане численное интегрирование нестационарных задач с достаточно гладкой зависимостью решения от времени позволяет учесть, что его значения на соседних шагах являются близкими. Это свойство используется, в частности, в схемах типа предиктор–корректор.

Пусть после пространственной аппроксимации задачи (1) мы получаем систему ОДУ

$$\frac{du^h}{dt} = Mu^h + f^h, \quad u^h, f^h \in \mathcal{R}^N. \quad (13)$$

Интегрируя это векторное уравнение на интервале $[t_n, t_{n+1}]$ и применяя к правой части простейшую формулу прямоугольников, получаем прогностическое значение $\hat{u}^{n+1}$ искомого решения:

$$\hat{u}^{n+1} = u^n + \tau (Mu^n + f^n). \quad (14)$$

Здесь и далее верхний индекс “ h ” для краткости опускаем. Принимая этот вектор за начальное приближение, его можно итерационным образом откорректировать, применяя более точную формулу трапеций для численного интегрирования:

$$u^{n+1,0} = \hat{u}^{n+1}, \\ k = 1, 2, \dots, k_n: \quad u^{n+1,k+1} = u^n + \frac{\tau}{2} \left[M(u^n + u^{n+1,k}) + f^n + f^{n+1} \right]. \quad (15)$$

Заметим, что метод предиктор–корректор можно реализовать не с помощью формул (13), (14), а несколько более точной формулы центральных прямоугольников:

$$u^{n+1/2} = u^n + \frac{\tau}{2} (Mu^n + f^n), \\ u^{n+1} = u^n + \tau \left(Mu^{n+1/2} + f^{n+1/2} \right), \quad f^{n+1/2} = f(t_n + 0.5\tau, r_i), \quad (16)$$

где r_i — координаты сеточного узла с номером i . При этом естественно формулу Кранка–Николсона (2) при $\theta = 1/2$ использовать в несколько другой модификации:

$$u^{n+1} = u^n + \tau \left(\frac{1}{2} M(u^{n+1} + u^n) + f^{n+1/2} \right), \quad (17)$$

которая является более точной.

Заметим, что если при реализации $n + 1$ -го шага нам известны предыдущие векторы $u^{n-1}, \dots, u^{n-m}$, то для вычисления прогностической величины можно сделать экстраполяцию по времени t . Например, в линейном случае можно положить

$$u^{n+1} = u^n + v_1^n, \quad v_1^n = u^n - u^{n-1}. \quad (18)$$

При $n = 0$ неизвестное значение u^{-1} можно вычислить по явной схеме Эйлера с “обратным” временем:

$$u^{-1} = u^0 - \tau(Mu^0 - f^0). \quad (19)$$

Очевидно, что в данном варианте результат будет совпадать с применением предиктора (14) при $n = 0$.

3. Дефляционные методы сопряжённых направлений

Традиционные аппроксимационные принципы методов предиктор–корректор мы будем применять только для вычисления начального итерационного приближения (которое будем обозначать в дальнейшем через $\hat{u}^{n+1,0}$) при реализации неявных схем Кранка–Николсон. Другой эффективный алгоритм оптимизации начального вектора — это дефляционный подход, впервые предложенный Р.А. Николайдесом [7] и впоследствии развитый другими авторами для многократного решения СЛАУ с различными последовательно определяемыми правыми частями, см., например, [8–13]. В работах [14, 15] он был применён также для ускорения неявных схем при решении начально-краевых задач.

Пусть при нахождении вектора u^{n+1} из СЛАУ (2) нам уже известен вектор $\hat{u}^{n+1}$, а также некоторые линейно-независимые векторы $v_1, \dots, v_m$, с помощью которых мы хотим расширить подпространства Крылова (9) и ускорить итерационный процесс сопряжённых направлений (7). В частности, эти дефляционные векторы определяем как

$$v_1 = u^n - u^{n-1}, \quad \dots, \quad v_m = u^n - u^{n-m}, \quad (20)$$

где $u^{n-1}, \dots, u^{n-m}$ — рассчитанные на предыдущих временных шагах решения сеточной начально-краевой задачи (2). Начальные приближения ищем в виде линейной комбинации

$$u^{n+1,0} = \hat{u}^{n+1,0} + c_1 v_1 + \dots + c_m v_m = u^n + Vc, \quad (21)$$

где вектор $\hat{u}^{n+1,0}$ есть аппроксимационное прогностическое приближение, полученное с помощью метода предиктор–корректор, а вектор $c = \{c_k\}$ будем искать по условию минимизации невязки

$$r^{n+1,0} = \bar{f}^n - Au^{n+1,0} = \hat{r}^{n+1,0} - AVc, \quad \hat{r}^{n+1,0} = \bar{f}^n - A\hat{u}^{n+1,0}, \quad (22)$$

в подпространстве $\mathcal{K}_m = \text{Span}(v_1, \dots, v_m)$. Требуя $A^{\gamma-1}$ -ортогональность начальной невязки векторам из этого подпространства, после умножения (22) слева на $V^\top A^{\gamma-1}$ получаем

$$V^\top A^{\gamma-1} r^{n+1,0} = V^\top A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0} - V^\top A^\gamma Vc = 0. \quad (23)$$

Отсюда получаем формулу

$$c = A_\gamma^{-1} V^\top A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}, \quad A_\gamma = V^\top A^\gamma V \in \mathbb{R}^{m,m}, \quad (24)$$

после подстановки которой в (21), (22) получаем

$$\begin{aligned} u^{n+1,0} &= \hat{u}^{n+1,0} + H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}, \quad H_\gamma = V A_\gamma^{-1} V^\top, \\ r^{n+1,0} &= \hat{r}^{n+1,0} - A H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}. \end{aligned} \quad (25)$$

Из (25) нетрудно вывести формулу для следующего функционала невязки:

$$\begin{aligned} \Phi_\gamma = (A^{\gamma-2} r^{n+1,0}, r^{n+1,0}) &= (A^{\gamma-2} \hat{r}^{n+1,0}, \hat{r}^{n+1,0}) - 2 (\hat{r}^{n+1,0}, A^{\gamma-1} H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}) + \\ &+ (A^\gamma H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0/2}, H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}). \end{aligned} \quad (26)$$

В силу определения матрицы H_γ и справедливости равенства $H_\gamma A^\gamma H_\gamma = H_\gamma$ можно утверждать, что функционал (26) для определённого в (24) вектора c достигает своего минимума:

$$\Phi_\gamma(r^n) = (A^{\gamma-2} \hat{r}^{n+1,0}, \hat{r}^{n+1,0}) - (\hat{r}^{n+1,0}, A^{\gamma-1} H_\gamma A^{\gamma-1} \hat{r}^{n+1,0}). \quad (27)$$

Матрицы H_γ являются малоранговыми аппроксимациями матрицы $A^{-\gamma}$. Если среди столбцов матрицы V имеются линейно зависимые, то в (25) вместо A_γ^{-1} нужно брать псевдообратную матрицу A_γ^+ .

Чтобы полностью определить стартовые условия для дефляционного метода сопряжённых направлений (DCD) с использованием дополнительных базисных векторов v_k из (21), необходимо также задать начальный вектор направлений $p^{n+1,0}$. По аналогии с условием (10) для “классического” метода сопряжённых градиентов потребуем выполнения свойства ортогональности $V^\top A^\gamma p^{n+1,0} = 0$, которое обеспечивается применением следующей формулы:

$$p^{n+1,0} = P_\gamma r^{n+1,0}, \quad P_\gamma = I - H_\gamma A^\gamma. \quad (28)$$

Формулы (24)–(28) в совокупности с (7) при $\gamma = 1, 2$ определяют “нулевой” вариант алгоритмов дефляционных направлений (DCD0). Для сохранения ортогональных и вариационных свойств на всех итерациях достаточно в (7) изменить способ вычисления направляющих векторов:

$$p^{n+1,k+1} = P_\gamma r^{n+1,k+1} + \beta_k p^{n+1,k}, \quad A p^{n+1,k+1} = A P_\gamma r^{n+1,k+1} + \beta_k A p^{n+1,k}. \quad (29)$$

Для сформированных таким образом “основных” дефляционных методов (DCDn) на каждой итерации кроме условий (10) будут выполняться также следующие свойства ортогональности:

$$V^\top A^{\gamma-1} r^{n+1,k} = 0, \quad V^\top A^\gamma p^{n+1,k} = 0, \quad k = 0, 1, \dots. \quad (30)$$

При этом функционал невязки (8) достигает своего минимального значения в расширенном подпространстве Крылова

$$\mathcal{K}_m = \text{Span}(v_1, \dots, v_m, r^{n+1,0} A r^{n+1,0}, \dots, A^{k-1} r^{n+1,0}).$$

4. Экспериментальное сравнение алгоритмов

В данном пункте приводится сравнительный анализ предлагаемых алгоритмов с точки зрения их математической эффективности, т. е. обеспечения необходимой точности численного решения при минимальной по возможности ресурсоёмкости вычислений, которая включает затрачиваемый объём оперативной памяти и общее количество арифметических действий.

Уровень производительности соответствующих программных реализаций, естественно, имеет главное практическое значение для математического моделирования реальных процессов и явлений, и так как приведённые ниже примеры расчётов определяются маленькими размерностями пространственно-временных сеток, то данные вопросы, включающие масштабируемое распараллеливание алгоритмов и их отображение на конкретную архитектуру суперкомпьютера, требуют специальных исследований.

Итак, объектом нашего исследования являются методы решения СЛАУ при реализации схемы Кранка–Николсон, которая рассматривается в двух небольших модификациях, основанных на применении формул трапеций или центральных прямоугольников. Мы будем сравнивать характеристики вычислительных сеансов с применением методов сопряжённых направлений без предобуславливания при следующих вариациях расчётов:

- задание аппроксимационных начальных приближений $\hat{u}^{n+1,0}$;
- проведение начальной дефляционной коррекции с оптимизацией $r^{n+1,0}$;
- дефляционная коррекция направляющих векторов по условиям их A^γ -ортогонализации на каждой итерации;
- сравнение методов сопряжённых градиентов (CG) и сопряжённых невязок (CR), в том числе с разными параметрами заданной точности ε .

Расчёты проводились для двух модельных задач Дирихле с решением уравнения Пуассона ($\mu = 1$ в (1)) в единичном квадрате $\Omega = [0, 1]^2$ при задании граничных и начальных данных в соответствии с искомыми решениями:

$$u_{\text{exact}} = x^2 * (1 - x)^2 * y^2 * (1 - y)^2 * v_l(t) + 1, \quad t \in [0, 1], \quad l = 1, 2, \quad (31)$$

$$v_1(t) = \exp 8t, \quad v_2(t) = \sin 2\pi t,$$

одно из которых имеет экспоненциальный рост со временем, а другое — синусоидальное представление. Вычисления осуществлялись на квадратных сетках с числом узлов по пространству $N = 127^2, 255^2, 511^2$ и количеством временных шагов $K = 32, 64, 128, 256, 512$. Эксперименты выполнялись в однопоточном режиме на компьютере со следующими характеристиками: CPU Intel Xeon E5-2630v4, 2.2 ГГц, 10 ядер, RAM 128 ГБайт. Все вычисления проводились со стандартной двойной точностью.

В таблице 1 приведены величины соотношения τ/h^2 для различного количества шагов по времени и трёх сеток, на которых проводились вычислительные эксперименты.

Таблица 1. Величина соотношения τ/h^2 в зависимости от величины шагов пространственной и временной сеток

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	32	64	128	256	512
255	128	256	512	1024	2048
511	512	1024	2048	4096	8192

В табл. 2–6 отражены результаты, полученные при значениях $\varepsilon = 10^{-5}$, см. (11). В каждой клетке приведены сверху вниз три числа: ошибка численного решения δ , суммарное число итераций по всем временным шагам Σ и общее время счёта задачи в секундах. Величина δ определялась как относительная погрешность конечного итерационного решения u^{k_n} в равномерной сеточной норме: $\delta = \|u - u^{k_n}\|_\infty / \|u\|_\infty$. На текущем временном шаге полагалось $\Sigma_n = 0$, если начальная скорректированная невязка $r^{n+1,0}$ уже оказывалась малой и удовлетворяла критерию (11), т. е. итерации в этом случае не проводились. Время счёта приводится только для сравнения различных алгоритмических версий. Разработанные программы являются исследовательскими; их коды не подвергались оптимизации для достижения высокой производительности.

В табл. 2, 3 приведены результаты расчётов для точного решения с функцией $v_1(t)$ при использовании “классических” методов CG и CR с выбором $u^{n+1,0} = u^n$ без применения алгоритмов предиктор–корректор и дефляции.

Таблица 2. “Классический” метод CG

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.12 \cdot 10^{-3}$ 8983 116.8	$0.54 \cdot 10^{-4}$ 7381 90.2	$0.23 \cdot 10^{-3}$ 5754 67.5	$0.14 \cdot 10^{-2}$ 4049 46.2	$0.58 \cdot 10^{-2}$ 2644 29.2
255	$0.18 \cdot 10^{-4}$ 15972 863.9	$0.53 \cdot 10^{-4}$ 12877 668.2	$0.34 \cdot 10^{-3}$ 10226 514.1	$0.15 \cdot 10^{-2}$ 7738 390.4	$0.59 \cdot 10^{-2}$ 5700 286.4
511	$0.26 \cdot 10^{-4}$ 26902 6121.7	$0.77 \cdot 10^{-4}$ 21827 4701.4	$0.36 \cdot 10^{-3}$ 17028 3544.2	$0.15 \cdot 10^{-2}$ 12354 2625.2	$0.60 \cdot 10^{-2}$ 8146 1666.3

Таблица 3. “Классический” метод CR

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.13 \cdot 10^{-3}$ 7762 134.0	$0.61 \cdot 10^{-4}$ 6287 90.5	$0.22 \cdot 10^{-2}$ 4847 67.3	$0.14 \cdot 10^{-2}$ 3464 47.5	$0.58 \cdot 10^{-2}$ 2252 30.0
255	$0.35 \cdot 10^{-4}$ 12952 865.0	$0.59 \cdot 10^{-4}$ 10164 654.4	$0.31 \cdot 10^{-3}$ 7801 500.2	$0.15 \cdot 10^{-2}$ 5711 358.2	$0.60 \cdot 10^{-2}$ 3768 236.9
511	$0.13 \cdot 10^{-3}$ 20420 5363.5	$0.16 \cdot 10^{-3}$ 15705 4175.6	$0.33 \cdot 10^{-3}$ 12045 3227.6	$0.14 \cdot 10^{-2}$ 8882 2507.7	$0.61 \cdot 10^{-2}$ 6101 1752.3

Табл. 4, 5 демонстрируют аналогичные результаты для дефляционного метода сопряжённых градиентов и дефляционного метода сопряжённых направлений (DCG0, DCR0 соответственно) с дефляционной коррекцией только начальной невязки $r^{n+1,0}$ без коррекции направляющих векторов на итерациях.

Табл. 6, 7 содержат аналогичные данные для “полных” дефляционных алгоритмов DCGn и DCRn (дефляционный метод сопряжённых градиентов и дефляционный метод сопряжённых направлений с коррекцией направляющих векторов на каждой итерации).

Последняя табл. 8 приведена для случая точного решения (31) с синусоидальной зависимостью $v_2(t)$ от времени и “полного” дефляционного алгоритма DCGn. Данные для DCRn в этом случае получаются аналогичными.

Таблица 4. Дефляционная коррекция только начальной невязки и метод DCG0

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$0.64 \cdot 10^{-4}$	$0.23 \cdot 10^{-3}$	$0.14 \cdot 10^{-2}$	$0.58 \cdot 10^{-2}$
	378	222	169	85	115
	40.0	19.6	10.6	5.41	3.6
255	$0.51 \cdot 10^{-4}$	$0.58 \cdot 10^{-4}$	$0.34 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	344	258	121	67	226
	153.9	81.5	40.6	21.2	20.8
511	$0.78 \cdot 10^{-4}$	$0.88 \cdot 10^{-4}$	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	254	175	86	39	272
	607.0	317.7	159.4	82.5	105.0

Таблица 5. Дефляционная коррекция только начальной невязки и метод DCR0

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$0.54 \cdot 10^{-4}$	$0.23 \cdot 10^{-3}$	$0.14 \cdot 10^{-2}$	$0.58 \cdot 10^{-2}$
	364	242	146	79	52
	42.4	22.1	11.6	6.0	3.2
255	$0.52 \cdot 10^{-4}$	$0.67 \cdot 10^{-4}$	$0.34 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	289	158	75	45	69
	165.1	81.2	43.0	22.4	14.6
511	$0.49 \cdot 10^{-4}$	$0.96 \cdot 10^{-4}$	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.61 \cdot 10^{-2}$
	202	101	50	25	20
	638.7	327.9	167.3	90.5	47.5

Таблица 6. Дефляционная коррекция начальной невязки и метод DCGn

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$0.64 \cdot 10^{-4}$	$0.23 \cdot 10^{-3}$	$0.14 \cdot 10^{-2}$	$0.58 \cdot 10^{-2}$
	378	222	169	85	115
	38.9	20.2	11.3	5.7	4.2
255	$0.51 \cdot 10^{-4}$	$0.58 \cdot 10^{-4}$	$0.34 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	344	258	121	67	218
	154.8	85.2	41.9	22.1	28.4
511	$0.78 \cdot 10^{-4}$	$0.88 \cdot 10^{-4}$	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	254	175	86	39	267
	605.4	324.4	165.4	85.2	140.4

Таблица 7. Дефляционная коррекция начальной невязки и метод DCRn

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$0.57 \cdot 10^{-4}$	$0.23 \cdot 10^{-3}$	$0.14 \cdot 10^{-2}$	$0.58 \cdot 10^{-2}$
	364	242	148	78	52
	42.4	22.8	12.3	6.4	3.6
255	$0.52 \cdot 10^{-4}$	$0.67 \cdot 10^{-4}$	$0.35 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.60 \cdot 10^{-2}$
	289	158	75	45	69
	162.0	86.0	43.2	23.0	17.6
511	$0.49 \cdot 10^{-4}$	$0.96 \cdot 10^{-4}$	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$0.15 \cdot 10^{-2}$	$0.61 \cdot 10^{-2}$
	202	101	50	25	20
	634.8	326.9	168.7	86.3	48.2

Таблица 8. Дефляционная коррекция начальной невязки и метод DCGn для точного решения с $v_2(t)$

$N \backslash K$	512	256	128	64	32
127	$0.56 \cdot 10^{-3}$ 0 27.0	$0.84 \cdot 10^{-3}$ 0 13.8	$0.65 \cdot 10^{-3}$ 0 7.0	$0.27 \cdot 10^{-3}$ 0 3.5	$0.75 \cdot 10^{-3}$ 0 1.8
255	$0.18 \cdot 10^{-2}$ 0 113.3	$0.99 \cdot 10^{-3}$ 0 57.1	$0.23 \cdot 10^{-2}$ 0 28.2	$0.12 \cdot 10^{-3}$ 0 14.6	$0.20 \cdot 10^{-2}$ 0 7.6
511	$0.40 \cdot 10^{-2}$ 0 485.8	$0.38 \cdot 10^{-2}$ 0 241.2	$0.20 \cdot 10^{-3}$ 0 121.8	$0.35 \cdot 10^{-2}$ 0 62.7	$0.35 \cdot 10^{-3}$ 0 32.7

По результатам проведённых вычислительных экспериментов на серии методических задач можно сделать следующие выводы:

- “классические” методы сопряжённых направлений имеют существенное преимущество (в разы или более) по производительности перед явными схемами, но значительно (на порядок и более) уступают итерационным методам с дефляцией крыловских подпространств;
- алгоритмы в подпространствах Крылова без применения предобуславливателей с критерием останова $\varepsilon = 10^{-5}$ дают достаточную точность решения (десятые или сотые доли процента) и обеспечивают экономичность расчётов;
- сравнение алгоритмов DCG и DCR показывает их практически одинаковую эффективность. Некоторое методическое преимущество алгоритма сопряжённых невязок заключается в монотонном убывании вычисляемого функционала в отличие от DCG;
- в проведённых нами экспериментах использование предварительного уточнения начального итерационного приближения путём применения разных вариантов метода предиктор–корректор даёт слабый эффект в сравнении с дефляционным подходом;
- в дефляционных методах сопряжённых направлений значительный вклад в ускорение итераций вносит именно начальная коррекция невязки в дефляционном подпространстве;
- число итераций в тестовых примерах существенно различается и подчинено характеру зависимости решения от времени (экспоненциальный рост или синусоидальная зависимость).

5. Заключительные замечания и перспективы кардинального повышения производительности моделирования нестационарных процессов

Приведённые результаты предварительных экспериментальных исследований предлагаемых подходов свидетельствуют о принципиальной возможности построения практически безытерационных абсолютно устойчивых неявных схем для достаточно точного численного решения многомерных начально-краевых задач. Разные способы выбора базисных векторов для расширения крыловских подпространств, использование методов сопряжённых градиентов или сопряжённых невязок в комбинации с алгоритмами

предиктор–корректор в совокупности дают многообразие алгебро-аппроксимационных подходов для решения широкого класса прикладных проблем. Мы ограничились схемой Кранка–Николсон для двумерного уравнения тепломассопереноса, но рассмотренные приёмы являются универсальными и могут быть использованы для решения систем Навье–Стокса, Ламе, Максвелла и других, в том числе с использованием алгоритмов повышенных порядков точности.

При усложнении блочных матричных структур повышение эффективности алгоритмов может быть достигнуто путём интегрирования описанных дефляционных принципов с предобусловленными методами неполной факторизации.

И, наконец, в задачах с несимметричными матрицами дефляционные приёмы вместо сопряжённых направлений должны основываться на других методах крыловского типа, например, GMRES.

Вопросы обеспечения высокой производительности и технологий распараллеливания алгоритмов с их отображением на архитектуру ЭВМ, естественно, актуализируются по мере развития новых суперкомпьютерных платформ. В рассматриваемых нами случаях эти проблемы, во-первых, традиционно решаются при численном интегрировании нестационарных задач и итерационном решении СЛАУ. Во-вторых, они требуют дополнительных ресурсов, связанных с появлением дефляционных матриц V . Однако, к счастью, дополнительные операции легко распараллеливаются и не требуют большой памяти [13, 20], так что данное направление развития математического моделирования представляется безальтернативно перспективным.

Относительно новая проблема, возникшая в последние десятилетия, — это методология массового решения практических задач с реальными данными и принятия решений по результатам расчётов. Такая работа требует многообразной профессиональной подготовки и осуществляющий её коллектив должен включать специалистов, обладающих широкими знаниями по физико-математическим моделям, по вычислительным методам и технологиям, по архитектурным особенностям суперкомпьютера, по системному и прикладному программному обеспечению, а также по практическим потребностям той отрасли, где всё это применяется. Именно переход на промышленные рельсы должен сделать прогностическое моделирование качественно новой производительной силой.

Естественный путь к решению возникающих проблем заключается в переходе на принципы машинного обучения как орудия искусственного интеллекта в данной наукоёмкой области. Переход от индивидуального творчества к интегрированному инфраструктурному окружению потребует создания инструментальной экосистемы и её кадрового обеспечения. Одним из главных средств здесь должна быть база активных знаний (см. [20]), включающая онтологии для своих предметных областей, иерархии физико-математических моделей, библиотеки вычислительных методов и технологий, инструменты для автоматизации построения алгоритмов и их распараллеливания на конкретных суперкомпьютерных архитектурах, архивы расчётных данных для типовых примеров, методы оптимизации для решения обратных задач и принятия решений по результатам вычислительных сеансов. Основная концепция такой методологии состоит в глубоком изучении проблемы с проведением массовых расчётов и накопления знаний, а после периода такого машинного обучения начинается оперативная расчётно-аналитическая деятельность.

Приведённый набросок крупномасштабного экспериментального исследования в рамках рассматриваемой нами задачи обретает следующие конкретные детали:

- определение параметров решаемой начально-краевой задачи с предварительным анализом свойств искомого решения в зависимости от типа граничных и начальных

условий, характера коэффициентов и геометрии расчётной области;

- конкретизация целей расчёта, набора тестовых примеров и учёт содержания опыта предыдущих работ в данной области;
- генерация структурированных или неструктурированных сеток, адаптированных к особенностям задачи и имеющих структуру данных для эффективной последующей реализации вычислительных методов;
- аппроксимация исходных дифференциальных уравнений в классической, обобщённой или смешанной постановках;
- решение результирующих сеточных систем алгебраических уравнений;
- реализация методов оптимизации для решения обратных задач;
- планирование машинных экспериментов и принятие решений по анализу полученных результатов.

Каждая из этих стадий моделирования представляет собой содержательную интеллектуальную проблему. Непременным условием их успешного решения является высокая производительность расчётов, достижение которой также требует глубокого изучения и машинного обучения, т. е., как это ни парадоксально звучит, формализации и интеллектуализации математической деятельности.

Литература

1. **Ильин В.П.** Математическое моделирование. Часть 1. Непрерывные и дискретные модели. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017.
2. **Ильин В.П.** Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. — Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2017.
3. **Лаевский Ю.М., Банушкина П.В.** Составные явные схемы // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2000. — Т. 3, № 2. — С. 165–180.
4. **Ильин В.П.** Итерационные предобусловленные методы в подпространствах Крылова: тенденции XXI века // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2021. — Т. 61, № 11. — С. 1786–1813. — <https://doi.org/10.31857/S0044466921110090>.
5. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed. — Philadelphia: SIAM, 2003.
6. **Olshanskii M.A., Tyrtshnikov E.E.** Iterative Methods for Linear Systems Theory and Applications. — Philadelphia: SIAM, 2014. — <https://doi.org/10.1137/1.9781611973464>.
7. **Nicolaidis R.A.** Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems // SIAM J. Numer. Anal. — 1987. — Vol. 24. — P. 355–365. — <https://doi.org/10.1137/0724027>.
8. **Saad Y., Yeung M., Erhel J., Guyomarc'h F.** A deflated version of the conjugate gradient algorithm // SIAM J. Sci. Comput. — 2000. — Vol. 21, № 5. — P. 1909–1926. — <https://doi.org/10.1137/S1064829598339761>.
9. **Kolotilina L.Yu.** Twofold deflation preconditioning of linear algebraic systems. I. Theory // J. Math. Sci. — 1998. — Vol. 89, № 6. — P. 1652–1689. — <https://doi.org/10.1007/BF02355371>.
10. **Mansfield L.** On the use of deflation to improve the convergence of conjugate gradient iteration // Commun. Appl. Numer. Methods. — 1988. — Vol. 4. — P. 151–156. — <https://doi.org/10.1002/cnm.1630040202>.
11. **Neytcheva M.** Deflation Techniques — Historical Development and Advances. — Department of Information Technology Uppsala University, 2019. — <https://www.maths.tcd.ie/~ksoodha/beyonddiscrete2019/wp-content/uploads/2019/06/Neytcheva2.pdf>.

12. **Гурьева Я.Л., Ильин В.П.** О методах сопряжённых направлений для многократного решения СЛАУ // Записки научных семинаров ПОМИ. — 2020. — Т. 496. — С. 26–42.
13. **Gurieva Y.L., Il'in V.P.** Conjugate direction methods for parallel deflation // Parallel Computational Technologies. Proc. 15th Intern. Conf., PCT 2021, Volgograd, Russia, March 30 – April 1, 2021 / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2021. — P. 194–207. — (CCIS; 1437). — https://doi.org/10.1007/978-3-030-81691-9_14.
14. **Il'in V.P.** High-performance computation of initial boundary value problems // Parallel Computational Technologies. Proc. 12th Intern. Conf., PCT 2018, Rostov-on-Don, Russia, April 2–6, 2018 / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2018. — P. 186–199. — (CCIS; 910). — https://doi.org/10.1007/978-3-319-99673-8_14.
15. **Gladkikh V.S., Il'in V.P., Pekhterev M.S.** Comparative analysis of parallel methods for solving SLAEs in three-dimensional initial-boundary value problems // Parallel Computational Technologies. 16th Intern. Conf., PCT 2022, Dubna, Russia, March 29–31, 2022 / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2022. — P. 59–72. — (CCIS; 1618). — https://doi.org/10.1007/978-3-031-11623-0_5.
16. **Ильин В.П.** Вызовы машинного обучения и математическое моделирование // Вестник Российской академии наук. — 2025. — № 3. — С. 15–24. — <https://doi.org/10.7868/S3034520025030021>.
17. **Weinan E.** Machine learning and computational mathematics // Commun. Comput. Phys. — 2020 — Vol. 28. — P. 1639–1670. — <https://doi.org/10.48550/arXiv.2009.14596>.
18. **Dongarra J., Grigori L., Higham N.J.** Numerical algorithms for high performance computational science // Phil. Trans. R. Soc. A — 2020. — Vol. 378, iss. 2166. — Article № 20190066. — <https://doi.org/10.1098/rsta.2019.0066>.
19. **Фанасков В.С., Оселедец И.В.** Спектральные нейронные операторы // Докл. РАН. Математика, информатика, процессы управления. — 2023. — Т. 514, № 2. — P. 72–79. — <https://doi.org/10.31857/S2686954323601422>.
20. **Il'in V.P.** Parallel intelligent computing in algebraic problems // Parallel Computational Technologies. Proc. 15th Intern. Conf., PCT 2021, Volgograd, Russia, March 30 – April 1, 2021 / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2021. — P. 108–117. — (CCIS; 1437). — https://doi.org/10.1007/978-3-030-81691-9_8.

Поступила в редакцию 24 апреля 2026 г.

После исправления 12 мая 2026 г.

Принята к печати 30 июня 2026 г.

Литература в транслитерации

1. **Il'in V.P.** Matematicheskoe modelirovanie. Chast 1. Nepreryvnye i diskretnye modeli. — Novosibirsk: Izd-vo SO RAN, 2017.
2. **Il'in V.P.** Metody resheniya obyknovennykh differentsialnykh uravnenii. — Novosibirsk: IPC NGU, 2017.
3. **Laevskii Yu.M., Banushkina P.V.** Sostavnye yavnye skhemy // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2000. — Т. 3, № 2. — С. 165–180.
4. **Il'in V.P.** Iteratsionnye predobuslovlennyye metody v podprostranstvakh Krylova: tendentsii KHKH veka // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2021. — Т. 61, № 11. — С. 1786–1813. — <https://doi.org/10.31857/S0044466921110090>.
5. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed. — Philadelphia: SIAM, 2003.
6. **Olshanskii M.A., Tyrtshnikov E.E.** Iterative Methods for Linear Systems Theory and Applications. — Philadelphia: SIAM, 2014. — <https://doi.org/10.1137/1.9781611973464>.

7. **Nicolaides R.A.** Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems // *SIAM J. Numer. Anal.* — 1987. — Vol. 24. — P. 355–365. — <https://doi.org/10.1137/0724027>.
8. **Saad Y., Yeung M., Erhel J., Guyomarc'h F.** A deflated version of the conjugate gradient algorithm // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2000. — Vol. 21, № 5. — P. 1909–1926. — <https://doi.org/10.1137/S1064829598339761>.
9. **Kolotilina L.Yu.** Twofold deflation preconditioning of linear algebraic systems. I. Theory // *J. Math. Sci.* — 1998. — Vol. 89, № 6. — P. 1652–1689. — <https://doi.org/10.1007/BF02355371>.
10. **Mansfield L.** On the use of deflation to improve the convergence of conjugate gradient iteration // *Commun. Appl. Numer. Methods.* — 1988. — Vol. 4. — P. 151–156. — <https://doi.org/10.1002/cnm.1630040202>.
11. **Neytcheva M.** Deflation Techniques — Historical Development and Advances. — Department of Information Technology Uppsala University, 2019. — <https://www.maths.tcd.ie/~ksoodha/beyonddiscrete2019/wp-content/uploads/2019/06/Neytcheva2.pdf>.
12. **Gureva Ya.L., Il'in V.P.** O metodakh sopryazhyonnykh napravlenii dlya mnogokratnogo resheniya SLAU // *Zapiski nauchnykh seminarov POMI.* — 2020. — T. 496. — S. 26–42.
13. **Gurieva Y.L., Il'in V.P.** Conjugate direction methods for parallel deflation // *Parallel Computational Technologies. Proc. 15th Intern. Conf., PCT 2021, Volgograd, Russia, March 30 – April 1, 2021* / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2021. — P. 194–207. — (CCIS; 1437). — https://doi.org/10.1007/978-3-030-81691-9_14.
14. **Il'in V.P.** High-performance computation of initial boundary value problems // *Parallel Computational Technologies. Proc. 12th Intern. Conf., PCT 2018, Rostov-on-Don, Russia, April 2–6, 2018* / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2018. — P. 186–199. — (CCIS; 910). — https://doi.org/10.1007/978-3-319-99673-8_14.
15. **Gladkikh V.S., Il'in V.P., Pekhterev M.S.** Comparative analysis of parallel methods for solving SLAEs in three-dimensional initial-boundary value problems // *Parallel Computational Technologies. 16th Intern. Conf., PCT 2022, Dubna, Russia, March 29–31, 2022* / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2022. — P. 59–72. — (CCIS; 1618). — https://doi.org/10.1007/978-3-031-11623-0_5.
16. **Il'in V.P.** Vyzovy mashinnogo obucheniya i matematicheskoe modelirovanie // *Vestnik Rossiiskoi akademii nauk.* — 2025. — № 3. — С. 15–24. — <https://doi.org/10.7868/S3034520025030021>.
17. **Weinan E.** Machine learning and computational mathematics // *Commun. Comput. Phys.* — 2020 — Vol. 28. — P. 1639–1670. — <https://doi.org/10.48550/arXiv.2009.14596>.
18. **Dongarra J., Grigori L., Higham N.J.** Numerical algorithms for high performance computational science // *Phil. Trans. R. Soc. A* — 2020. — Vol. 378, iss. 2166. — Article № 20190066. — <https://doi.org/10.1098/rsta.2019.0066>.
19. **Fanaskov V.S., Oseledec I.V.** Spektralnye neironnye operatory // *Dokl. RAN. Matematika, informatika, processy upravleniya.* — 2023. — T. 514, № 2. — P. 72–79. — <https://doi.org/10.31857/S2686954323601422>.
20. **Il'in V.P.** Parallel intelligent computing in algebraic problems // *Parallel Computational Technologies. Proc. 15th Intern. Conf., PCT 2021, Volgograd, Russia, March 30 – April 1, 2021* / L. Sokolinsky, M. Zymbler. — Springer, 2021. — P. 108–117. — (CCIS; 1437). — https://doi.org/10.1007/978-3-030-81691-9_8.

