

УДК 517.9

Разработка параллельного алгоритма на основе неявной схемы для метода Галёркина с разрывными базисными функциями для решения уравнений диффузионного типа

© Р. В. Жалнин¹, Н. А. Кузьмин², В. Ф. Масыгин³

Аннотация. В статье представлен параллельный численный алгоритм на основе неявной схемы для метода Галёркина с разрывными базисными функциями для решения уравнений диффузионного типа на треугольных сетках. Для применения метода Галёркина с разрывными базисными функциями исходное уравнение параболического типа преобразуется к системе дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка. Для этого вводятся вспомогательные переменные, представляющие собой компоненты градиента искомой функции. Для хранения разреженных матриц и векторов в работе используется формат CSR. Полученная система решается численно с помощью параллельного алгоритма, основанного на библиотеке Nvidia AmgX. Численное исследование проводится на примере решения двумерных тестовых параболических начально-краевых задач. Приведенные численные результаты показывают эффективность применения предложенного алгоритма для решения параболических задач.

Ключевые слова: параболические уравнения, метод Галёркина с разрывными базисными функциями, неявная схема, Nvidia AmgX

1. Введение

При численном решении многих задач математической физики (например, задач теплообмена, газовой динамики и гидродинамики) необходимо учитывать процессы теплопроводности и диффузионные процессы, а значит, на определенном этапе возникает необходимость в решении уравнений диффузионного типа. Такие уравнения часто встречаются на практике и описывают распространение растворяемого вещества вследствие диффузии, перераспределение температуры тела в результате теплопроводности и другие процессы [1].

¹Жалнин Руслан Викторович, заведующий кафедрой прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, ФГБОУ ВО Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68/1), кандидат физико-математических наук, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1103-3321>, zhrv@mrsu.ru

²Кузьмин Никита Александрович, студент факультета математики и информационных технологий, ФГБОУ ВО Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68/1), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-5723-1545>, h0las@outlook.com

³Масыгин Виктор Федорович, старший научный сотрудник, ФГБОУ ВО Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (430005, Россия, Республика Мордовия, г. Саранск, ул. Большевикская, д. 68/1), кандидат физико-математических наук, ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6738-8183>, vmasyagin@gmail.com

Как правило, данные задачи рассматриваются в областях сложной геометрической формы, и их решение требуется находить с высоким порядком точности. Для того, чтобы при математическом моделировании учесть сложную структуру рассматриваемой области и как можно ближе приблизиться к ней, необходимо использовать неструктурированные сетки. Таким образом, для решения задач подобного типа нужен численный метод, который бы обладал высоким порядком точности и при этом справлялся с неструктурированными сетками. Одним из таких методов является широко известный метод Галеркина с разрывными базисными функциями. Данный метод обладает целым рядом конкурентных достоинств: характеризуется высоким порядком точности получаемого решения, слабо зависит от вида используемой расчетной сетки, что позволяет работать с неструктурированными сеточными структурами, и при этом обладает компактным вычислительным шаблоном. Это означает, что при произвольном порядке точности на каждом шаге вычислений данному методу требуются значения из текущей ячейки сетки и ее соседей по ребру. При всех перечисленных достоинствах метод Галеркина с разрывными базисными функциями требует существенных вычислительных затрат, что при использовании явных схем приводит к значительным временным затратам расчета. Одним из перспективных направлений исследований является разработка эффективных неявных алгоритмов для разрывного метода Галеркина на неструктурированных сетках. Однако данный подход, несмотря на снятие существенных ограничений с шага по времени, требует значительных ресурсов для работы со СЛАУ огромных размерностей, поэтому встает вопрос о максимально эффективном использовании всех возможностей вычислительной техники [2].

Данная работа посвящена разработке неявной схемы разрывного метода Галёркина для решения уравнений диффузионного типа на треугольных сетках. Численный алгоритм решения при таком подходе сводится к решению одной системы линейных уравнений на каждом слое по времени. Для параллельного исполнения этой операции на сегодняшний день разработано много эффективных решений для различных архитектур параллельного программирования. Однако стоит отметить, что неявная схема, при всех её достоинствах, имеет значительную сложность в реализации. Это связано с тем, что такая схема требует существенно более сложного численного алгоритма, эффективного подхода при работе с памятью и особого внимания к матричным структурам, возникающим при выполнении расчётов.

В настоящий момент все более популярными становятся параллельные вычисления на устройствах GPU. Несмотря на то что перенос алгоритмов на архитектуру графических процессоров, существенно отличающуюся от архитектуры центральных процессоров, представляет собой достаточно сложную задачу, GPU все чаще используются в вычислительной механике, задачах газовой динамики и в вычислительной математике в целом [3]. Благодаря своей архитектуре, основанной на большом числе вычислительных ядер, и новому подходу к организации вычислений, применение GPU в вычислениях является очень востребованным. Организация таких вычислений требует мощной, гибкой и при этом простой по своей логике технологии, которая бы дала возможность использовать все возможности GPU в уже существующих алгоритмах. В данной работе для этих целей будем использовать библиотеку NVidia AMGX, написанную на языке CUDA C.

При решении систем с большой разреженной матрицей важно учитывать такое понятие как обусловленность матрицы, которое является одним из решающих признаков при исследовании задачи на устойчивость. В библиотеке AMGX, помимо стандартных алгоритмов решения систем линейных уравнений, реализованы ещё и необходимые преобуславливающие алгоритмы, которые позволяют получать решение в таких случаях,

где стандартные алгоритмы решения не дают. Библиотека предоставляет реализацию семейства классических многосеточных (AMG) [4–5] методов, которые являются хорошим выбором для более сложных линейных систем. Библиотека позволяет использовать многосеточные методы в качестве предобуславливающих для семейства итерационных методов Крылова [6–7]. К этому семейству относится метод гибких обобщенных минимальных невязок (FGMRES). Данный метод может использоваться для решения несимметричных и даже неопределенных линейных систем, и именно он используется в данной работе.

К достоинствам библиотеки также можно отнести поддержку параллелизма как на уровне нескольких графических процессоров, так и на уровне нескольких вычислительных кластеров, что обеспечивается посредством поддержки технологии MPI. Также библиотека AMGX предоставляет гибкую систему конфигурации, и благодаря этому появляется возможность создавать иерархию решающих алгоритмов с произвольной глубиной, в которой внешний решающий алгоритм будет использовать внутренние в качестве предобработчиков и предобуславливателей, которые сами могут быть обработаны другими методами. Такой подход позволяет пользователю быстро экспериментировать с различными схемами [8].

В настоящий момент библиотека находит всё более широкое применение в современном промышленном и научном численном анализе. В частности, AMGX является составляющей коммерческого вычислительного программного обеспечения ANSYS Fluent [9]. Показателем актуальности и эффективности библиотеки является и тот факт, что на данный момент она используется в качестве стандарта для сравнения эффективности и скорости работы новых численных алгоритмов для решения систем линейных уравнений, наряду с такими мощными средствами как библиотека HYPRE [9–10].

2. Неявная схема разрывного метода Галёркина для решения уравнений диффузионного типа

Рассматривается следующая параболическая начально-краевая задача [11]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div} Q &= 0, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T, \\ u(x, y, t) &= 0, \quad (x, y) \in \partial D, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y), \quad (x, y) \in D, \end{aligned} \quad (2.1)$$

где D – область двумерного пространства с границей ∂D ; u – определяемая величина; $Q = \nabla u$ – поток; $u_0(x, y)$ – заранее заданная функция.

Согласно разрывному методу Галёркина для решения уравнений второго порядка, уравнения параболического типа записываются в виде системы уравнений первого порядка, и затем полученная система решается на каждом временном слое относительно введенных вспомогательных переменных и определяемой функции [11].

Чтобы применить метод Галёркина, область решения $D \cup \partial D$ покрывается треугольной сеткой T_h . Каждый из треугольников $T_k \in T_h$ имеет ненулевую площадь и пересекается с другими не более чем по образующим их вершинам или рёбрам. В каждом из треугольников определяется центр и середины сторон. В треугольнике T_k центр определим как:

$$x_c^k = \frac{x_1^k + x_2^k + x_3^k}{3}, \quad y_c^k = \frac{y_1^k + y_2^k + y_3^k}{3}, \quad (2.2)$$

где $(x_1^k, y_1^k), (x_2^k, y_2^k), (x_3^k, y_3^k)$ – координаты вершин соответствующего треугольника.

Для аппроксимации первого уравнения из (2.1) необходимо его привести к системе дифференциальных уравнений в частных производных 1-го порядка [12]. Для этого отдельно рассматриваются потоковые переменные [13]. Тогда первое уравнение в исходной системе (2.1) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y}, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T, \\ q_x &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T, \\ q_y &= \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Решение системы (2.3) находится с использованием разрывного метода Галёркина. Для этого на каждом треугольнике $T_k \in T_h$ вводится система линейных базисных функций $\{\phi_i^k\} \in P^1(T^k), i = \overline{0, 2}$, $\phi_0^k = 1, \phi_1^k = \frac{x - x_c^k}{\Delta x^k}, \phi_2^k = \frac{y - y_c^k}{\Delta y^k}$, где (x_c^k, y_c^k) – центр соответствующего треугольника T_k ; $\Delta x^k, \Delta y^k$ – проекции ячейки на соответствующие координатные оси.

Приближенное решение u^k в разрывном методе Галеркина ищется в каждом треугольнике в виде разложение по соответствующему базису [13]:

$$u^k = u_0^k + u_1^k \frac{x - x_c^k}{\Delta x^k} + u_2^k \frac{y - y_c^k}{\Delta y^k}, \quad (2.4)$$

где $u_i^k = u_i^k(t); \phi_i^k = \phi_i^k(x, y) \in T_k; i = \overline{0, 2}$.

Приближенные решения q_x^k, q_y^k будем искать в каждой ячейке T_k в виде разложения по соответствующему базису:

$$q_x^k = q_{x0}^k + q_{x1}^k \frac{x - x_c^k}{\Delta x^k} + q_{x2}^k \frac{y - y_c^k}{\Delta y^k}, \quad (2.5)$$

$$q_y^k = q_{y0}^k + q_{y1}^k \frac{x - x_c^k}{\Delta x^k} + q_{y2}^k \frac{y - y_c^k}{\Delta y^k}, \quad (2.6)$$

где $q_{xi}^k = q_{xi}^k(t); q_{yi}^k = q_{yi}^k(t); \phi_i^k = \phi_i^k(x, y) \in T_k; i = \overline{0, 2}$.

Первое уравнение из (2.3) умножается на пробную базисную функцию $\phi_i^k, i = \overline{0, 2}$, и далее произведение интегрируется по треугольнику $T_k, k = \overline{1, N}$, где N – число треугольников в сетке. Точное решение u заменяется приближенным решением u^k [13]. Аналогично находится решение для вспомогательных переменных q_x, q_y . Таким образом получается следующая система для вычисления коэффициентов разложения u^k, q_x^k, q_y^k на каждом шаге по времени.

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^2 \frac{\partial u_i^k}{\partial t} \int_{T_k} \phi_i^k \phi_m^k ds &= \oint_{\partial T_k} n_x \widehat{q}_x^{n+1} \phi_m^k dl + \oint_{\partial T_k} n_y \widehat{q}_y^{n+1} \phi_m^k dl - \\ &- \int_{T_k} q_x^{k, n+1} \frac{\partial \phi_m^k}{\partial x} ds - \int_{T_k} q_y^{k, n+1} \frac{\partial \phi_m^k}{\partial y} ds, \quad m = \overline{0, 2}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\sum_{i=0}^2 q_{xi}^{k,n+1} \int_{T_k} \phi_i^k \phi_m^k ds = \oint_{\partial T_k} n_x \hat{u}^{n+1} \phi_m^k dl - \int_{T_k} q_x^{k,n+1} \frac{\partial \phi_m^k}{\partial x} ds, \quad m = \overline{0,2}, \quad (2.8)$$

$$\sum_{i=0}^2 q_{yi}^{k,n+1} \int_{T_k} \phi_i^k \phi_m^k ds = \oint_{\partial T_k} n_y \hat{u}^{n+1} \phi_m^k dl - \int_{T_k} u^{k,n+1} \frac{\partial \phi_m^k}{\partial y} ds, \quad m = \overline{0,2}. \quad (2.9)$$

Величину $\frac{\partial u_i^k}{\partial t}$ из (2.7) можно аппроксимировать с помощью частной производной величины u по переменной t методом Эйлера:

$$\frac{\partial u_i^k}{\partial t} = \frac{u_i^{k,n+1} - u_i^{k,n}}{\tau}, \quad (2.10)$$

где τ – шаг по времени.

Потоковые величины \hat{u}^{n+1} , \hat{q}_x^{n+1} , \hat{q}_y^{n+1} на границе соответствующих элементов будут определены далее.

Вычисления будут организованы таким образом, что из систем (2.7)–(2.9) будет составлена одна общая система линейных алгебраических уравнений, коэффициенты которой будут постоянны на каждом временном слое. При этом столбец правой части СЛАУ будет рассчитываться на каждом временном слое. На каждом шаге по времени n решается система и вычисляются значения $u^{k,n}$, $q_x^{k,n}$, $q_y^{k,n}$.

Работа с разреженной матрицей организована таким образом, что на процессоре в отдельной функции заполняется статичная матрица системы. Элементы статичной матрицы хранятся в формате CSR. В этом формате данные передаются на вход методам библиотеки Nvidia AmgX. Аналогичным образом организована работа и с вектором правой части, с тем лишь различием, что он будет пересчитываться и передаваться библиотеке на каждом шаге по времени.

3. Нахождение численных потоков на границах элементов

Для нахождения потоковых величин для начала условимся, что на каждом ребре задана нормаль. Если относительно треугольника нормаль является внешней, то для данного ребра ячейка считается внутренней, в противном случае будем считать ячейку внешней.

3.1. Метод полусуммы

В системе (2.7) на границе между элементами необходимо вычислять потоковые значения \hat{q}_x^{n+1} и \hat{q}_y^{n+1} .

Первый способ предполагает вычислять их как среднее арифметическое [13]:

$$\hat{q}_x^{n+1}(q_x^{-,n+1}, q_x^{+,n+1}) = \frac{q_x^{+,n+1} + q_x^{-,n+1}}{2},$$

$$\hat{q}_y^{n+1}(q_y^{-,n+1}, q_y^{+,n+1}) = \frac{q_y^{+,n+1} + q_y^{-,n+1}}{2},$$

где $q_x^{-,n+1}$, $q_y^{-,n+1}$ вычисляются на ребре по значениям из внутренней ячейки, в то время как величины, обозначенные через $q_x^{+,n+1}$, $q_y^{+,n+1}$ вычисляются по значениям из внешней ячейки. Для граничных ребер значения \hat{q}_x^{n+1} и \hat{q}_y^{n+1} берутся значения из внутренней ячейки.

В системах (2.8 – 2.9) потоковые значения величины \widehat{u}^{n+1} вычисляются следующим образом: на граничных ребрах определим значения исходя из граничных условий, т. е. $\widehat{u}^{n+1} = 0$; на внутренних – полусумму значений величины в соседних ячейках сетки:
$$\widehat{u}^{n+1} = \frac{u^{+,n+1} + u^{-,n+1}}{2}.$$

3.2. Метод переменных потоков

Рассмотрим вычисление потоковых величин с помощью метода переменных потоков [14–15].

В этом методе потоковая величина на ребре определяется значением из внешней ячейки, а значение искомой величины – из внутренней ячейки:

$$\begin{aligned}\widehat{u} &= u^-, \\ \widehat{q} &= q^+.\end{aligned}$$

В случае, когда потоковая величина определяется на граничном ребре, для \widehat{u} значение – исходя из граничного условия, а для \widehat{q} определяется значением во внутренней ячейке.

4. Алгоритм работы программы

Для демонстрации логики работы программы ниже представлен псевдокод.

```
Data: config.json, NX, NY,  $T_{max}$ ,  $\tau$ 
Result: *.vtk
ИнициализацияСетки(NX, NY);
ИнициализацияСтруктурДанныхНаПроцессоре();
ЗаданиеНачальныхУсловий();
ИнициализацияАМГХ(config.json);
РасчётСтатичнойМатрицыНаПроцессоре();
РасчётПравойЧастиНаПроцессоре();
КопированиеДанныхНаАМГХ();
step ← 0;
t ← 0;
while t <  $T_{max}$  do
    step ← step + 1;
    t ← t +  $\tau$ ;
    РешениеСистемыНаАМГХ();
    КопированиеРешенияНаПроцессор();
    РасчётПравойЧастиНаПроцессоре();
    КопированиеПравойЧастиНаАМГХ();
    if step mod SAVE_STEP == 0 then
        | ВыводVTK(*.vtk);
    end
end
```

Листинг 4.1. Основной алгоритм программы

Основной алгоритм работы программы включает в себя генерацию или загрузку уже существующей сетки, инициализацию библиотеки AMGX, выделение памяти и заполнение необходимых структур на процессоре и графическом устройстве, заполнение матрицы коэффициентов и правой части системы, обмен данными между процессором и графическим устройством. В свою очередь, шаг с расчётом статичной матрицы на процессоре включает в себя расчёт матрицы жесткости и матриц, полученных при расчёте интегралов по области и границе ячеек сеточной структуры. На каждом шаге выполнения алгоритма на графическом процессоре с помощью библиотеки AMGX решается система линейных алгебраических уравнений, соответствующая текущему слою по времени. После этого решение копируется на центральный процессор, происходит перерасчет правой части системы, после чего итерация повторяется.

5. Численный эксперимент

В качестве первой тестовой задачи была выбрана следующая начально-краевая задача:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\nabla u) &= 0, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T, \\ u(x, y, t) &= 0, \quad (x, y) \in \partial D, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y), \quad (x, y) \in D, \end{aligned} \quad (5.1)$$

где D – область двумерного пространства с границей ∂D ; u – определяемая величина; $u_0(x, y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$; $T = 0,2$; $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq 1$.

Были произведены вычисления на двух вариантах сеток: структурированной и неструктурированной. В первом случае соблюдается условие устойчивости решения для явной схемы, во втором это условие нарушается. В обоих случаях в качестве метода аппроксимации потоковых величин были выбраны метод полусуммы и метод переменных направлений. Результаты представлены ниже в таблицах 5.1 – 5.4.

Таблица 5.1. Структурированная сетка, $N = 32$, $t = 0.0001$, вычисление потоков методом полусуммы

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	0.0367712975	0.0251843555
0.05	0.0289862012	0.0153121561
0.10	0.0169462427	0.0074206413
0.15	0.0089552638	0.0033855313
0.20	0.0038157489	0.0014852004

Таблица 5.2. Структурированная сетка, $N = 32$, $t = 0.0001$,
вычисление потоков методом переменных потоков

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	0.1093203225	0.0212839243
0.05	0.1870973733	0.0157270182
0.10	0.1942025693	0.0086913082
0.15	0.1593426925	0.0042473021
0.20	0.1144607499	0.0016471690

Таблица 5.3. Неструктурированная сетка, $N = 38$, $t = 0.01$,
вычисление потоков методом полусуммы

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	расходится	0.0121641983
0.05	расходится	0.0040143752
0.10	расходится	0.0043248552
0.15	расходится	0.0028194743
0.20	расходится	0.0015354149

Таблица 5.4. Неструктурированная сетка, $N = 38$, $t = 0.01$,
вычисление потоков методом переменных потоков

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	расходится	0.0108102692
0.05	расходится	0.0047485251
0.10	расходится	0.0038959187
0.15	расходится	0.0023667227
0.20	расходится	0.0012464113

В качестве второй тестовой задачи была выбрана задача с разрывным коэффициентом теплопроводности:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(K \nabla u) &= 0, \quad (x, y) \in D, \quad 0 < t \leq T, \\
 u(x, y, t) &= 0, \quad (x, y) \in \partial D, \\
 u(x, y, 0) &= u_0(x, y), \quad (x, y) \in D,
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

где D – область двумерного пространства с границей ∂D ; u – определяемая величина; $u_0(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)$; $T = 0,2$; $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq y \leq 1$; K – коэффициент теплопроводности.

Коэффициент теплопроводности K определяется своими координатами внутри расчётной области следующим образом:

$$K(x, y) = \begin{cases} 3, & \text{если } 0.25 \leq x \leq 0.75, 0.25 \leq y \leq 0.75, \\ 1 & \text{– в противном случае.} \end{cases}$$

Поскольку эта задача не имеет точного решения, в данной работе проводится сравнение явной и неявной схем с конечно-разностной неявной схемой на подробной сетке. Решение задачи рассматривалось на структурированной сетке из 32 ячеек с шагом по времени, равным 0.0001 и 0.01. Результаты расчётов представлены в таблицах 5.5 – 5.8.

Таблица 5.5. Структурированная сетка, $N = 32$, $t = 0.0001$,
вычисление потоков методом полусуммы

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	0.1445232078	0.1459002157
0.05	0.0785507949	0.0788258979
0.10	0.0301633319	0.0308140417
0.15	0.0104866618	0.0108624378
0.20	0.0044613386	0.0046017249

Таблица 5.6. Структурированная сетка, $N = 32$, $t = 0.0001$,
вычисление потоков методом переменных потоков

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	0.1679411631	0.1374027738
0.05	0.1299189154	0.0760682724
0.10	0.0615927804	0.0301344246
0.15	0.0206975411	0.0107390802
0.20	0.0074884107	0.0045729096

Таблица 5.7. Результаты для структурированной сетки, $N = 32$,
 $t = 0.01$, вычисление потоков методом полусуммы

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	расходится	0.1290872118
0.05	расходится	0.0749038288
0.10	расходится	0.0325960242
0.15	расходится	0.0126442897
0.20	расходится	0.0057173853

Таблица 5.8. Результаты для структурированной сетки, $N = 32$,
 $t = 0.01$, вычисление потоков методом переменных потоков

Шаг по времени	Явная схема, L2	Неявная схема, L2
0.01	расходится	0.1189084461
0.05	расходится	0.0720197914
0.10	расходится	0.0315816221
0.15	расходится	0.0123754942
0.20	расходится	0.0046131613

6. Заключение

Был разработан численный алгоритм неявной схемы разрывного метода Галеркина для решения двумерных уравнений диффузионного типа на треугольных сетках. Для решения СЛАУ использовались предобуславливатели и решатели из библиотеки Nvidia AmgX. Для верификации численного алгоритма была произведена серия расчётов на для тестовых задач. Результаты численных экспериментов показывают, что предложенная схема работает, и для нее нет ограничений на шаг по времени, актуальных для явной схемы. Однако стоит отметить, что на данный момент остаются вопросы, которые требуют дальнейшего исследования. В частности, подробного изучения требует вопрос о более эффективной работе с памятью средствами библиотеки Nvidia AmgX, о наиболее эффективном способе передачи данных в методы библиотеки и ряд других.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (№ 1.6958.2017/8.9), РНФ (проект 19-71-00131) и гранта Президента РФ для молодых российских ученых — кандидатов наук (МК-2007.2018.1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ладонкина М. Е., Милокова О. Ю., Тишкин В.Ф. Численный метод решения уравнений диффузионного типа на основе использования многосеточного метода // Вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50, № 8. С. 1367–1390.
2. Разрывный метод Галёркина на трёхмерных тетраэдральных сетках. Использование операторного метода программирования / М. М. Краснов [и др.] // Матем. моделирование. 2017. Т. 29, № 2. С. 3–22.
3. Богданов П. Б., Горобец А. В., Суков С. А. Адаптация и оптимизация базовых операций газодинамического алгоритма на неструктурированных сетках для расчетов на массивно-параллельных ускорителях // Вычисл. матем. и матем. физ. 2013. Т. 53, № 8. С. 1360–1373.
4. Parallel unsmoothed aggregation algebraic multigrid algorithms on GPUs / J. Brannick [et al.] // Numerical Solution of Partial Differential Equations: Theory, Algorithms, and Their Applications. Springer Proc. Math. Stat., 2013. Vol. 45. pp. 81–102.
5. De Sterck H., Yang U. M., Heys J. Reducing complexity in parallel algebraic multigrid preconditioners // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. 2006. Vol. 27, No. 4. pp. 1019–1039.

6. Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods / R. Barrett [et al.]. Philadelphia: SIAM, 1993. 117 p.
7. Saad Y. A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm // SIAM J. Sci. Comput. 1993. Vol. 14, No. 2. pp. 461–469.
8. Simoncini V., Szvld D. B. Flexible inner-outer Krylov subspace methods // SIAM J. Numer. Anal. 2003. Vol. 40, No. 6. pp. 2219–2239.
9. AmgX: a library for GPU accelerated algebraic multigrid and preconditioned iterative methods / M. Naumov [et al.] // SIAM J. Sci. Comput. 2015. Vol. 37, No. 5. pp. 602–626.
10. GPU-accelerated preconditioned GMRES method for two-dimensional Maxwell's equations / J. Gao [et al.] // International Journal of Computer Mathematics. 2017. Vol. 94, No. 10. pp. 2122–2144.
11. Применение разрывного метода Галёркина для решения параболических задач в анизотропных средах на треугольных сетках / Р. В. Жалнин [и др.] // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Матем. моделирование и программирование». 2016. Т. 9, № 3 С. 144–151.
12. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. М.: Мир, 1988. 352 с.
13. Bassi F. A., Rebay S. High-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier – Stokes equations // Journal of Computational Physics. 1997. Vol. 131, No. 2. pp. 267–279.
14. Cockburn B., Shu C.-W. The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems // SIAM J. Numer. Anal. 1998. Vol. 35, No. 6. pp. 2440–2463.
15. Wang H., Shu C.-W., Zhang Q. Local discontinuous Galerkin methods with implicit-explicit time-marching for multi-dimensional convection-diffusion problems // ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis. 2016. Vol. 50, No. 4. pp. 1083–1105.

Поступила 9.12.2019

MSC2020 35K51

Development of a parallel algorithm based on an implicit scheme for the discontinuous Galerkin method for solving diffusion type equations

© R. V. Zhalnin¹, N. A. Kuzmin², V. F. Masyagin³

Abstract. The paper presents a numerical parallel algorithm based on an implicit scheme for the Galerkin method with discontinuous basis functions for solving diffusion-type equations on triangular grids. To apply the Galerkin method with discontinuous basis functions, the initial equation of parabolic type is transformed to a system of partial differential equations of the first order. To do this, auxiliary variables are introduced, which are the components of the gradient of the desired function. To store sparse matrices and vectors, the CSR format is used in this study. The resulting system is solved numerically using a parallel algorithm based on the Nvidia AmgX library. A numerical study is carried out on the example of solving two-dimensional test parabolic initial-boundary value problems. The presented numerical results show the effectiveness of the proposed algorithm for solving parabolic problems.

Key Words: parabolic equations, discontinuous Galerkin method, implicit scheme, Nvidia AmgX

REFERENCES

1. M. E. Ladonkina, O. Yu. Milyukova, V. F. Tishkin, “Numerical algorithm for solving diffusion-type equations on the basis of multigrid methods”, *Comput. Math. Math. Phys.*, **50**:8 (2010), 1367–1390 (In Russ.).
2. M. M. Krasnov, P. A. Kuchugov, M. E. Ladonkina, V. F. Tishkin, “Discontinuous Galerkin method on three-dimensional tetrahedral grids: Using the operator programming method”, *Math. Models Comput. Simul.*, **9**:5 (2017), 529–543.
3. P. B. Bogdanov, A. V. Gorobets, S. A. Sukov, “Adaptation and optimization of basic operations for an unstructured mesh CFD algorithm for computation on massively parallel accelerators”, *Comput. Math. Math. Phys.*, **53**:8 (2013), 1183–1194 (In Russ.).
4. J. Brannick, Y. Chen, X. Hu, L. Zikatanov, “Parallel unsmoothed aggregation algebraic multigrid algorithms on GPUs, in Numerical Solution of Partial Differential Equations: Theory, Algorithms, and Their Applications”, *Springer Proc. Math. Stat.*, **45** (2013), 81–102.
5. H. De Sterck, U. M. Yang, J. Heys, “Reducing complexity in parallel algebraic multigrid preconditioners”, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, **27**:4 (2006), 1019–1039.

¹**Ruslan V. Zhalnin**, Head of Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph.D. (Physics and Mathematics), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1103-3321>, zhrv@mrsu.ru

²**Nikita A. Kuzmin**, student, Faculty of Mathematics and Information Technology, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), h0las@outlook.com

³**Victor F. Masyagin**, Senior Researcher, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), Ph.D. (Physics and Mathematics), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6738-8183>, masyaginvf@mrsu.ru

6. R. Barrett, M. W. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. van der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM., Philadelphia, PA., 1993, 117 p.
7. Y. Saad, “A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm”, *SIAM J. Sci. Comput.*, **14**:2 (1993), 461–469.
8. V. Simoncini, D. B. Szyld, “Flexible inner-outer Krylov subspace methods”, *SIAM J. Numer. Anal.*, **40**:6 (2003), 2219–2239.
9. M. Naumov, M. Arsaev, J. Cohen, P. Castonguay, J. Eaton, J. Demouth, S. Layton, N. Markovskiy, I. Z. Reguly, N. Sakharnykh, V. Sellappan, R. Strzodka, “AmgX: A Library for GPU Accelerated Algebraic Multigrid and Preconditioned Iterative Methods”, *SIAM J. Sci. Comput.*, **37**:5 (2015), 602–626.
10. J. Gao, K. Wu, Y. Wang, P. Qi, G. He, “GPU-accelerated preconditioned GMRES method for two-dimensional Maxwell’s equations”, *International Journal of Computer Mathematics*, **94**:10 (2017), 1–24.
11. R. V. Zhalnin, M. E. Ladonkina, V. F. Masyagin, V. F. Tishkin, “Discontinuous finite-element Galerkin method for numerical solution of parabolic problems in anisotropic media on triangle grids”, *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, **9**:3 (2016), 144–151 (In Russ.).
12. C. Fletcher, *Chislennyye metody na osnove metoda Galerkina [Computational Galerkin methods]*, Mir, Moscow, 1988 (In Russ.), 352 p.
13. F. A. Bassi, S. Rebay, “High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier – Stokes Equations”, *Journal of Computational Physics*, **131**:2 (1997), 267–279 (In Russ.).
14. B. Cockburn, C.-W. Shu, “The local discontinuous Galerkin method for timedependent convection-diffusion systems”, *SIAM J. Numer. Anal.*, **35**:6 (1998), 2440–2463.
15. H. Wang, C.-W. Shu, Q. Zhang, “Local discontinuous Galerkin methods with implicit-explicit time-marching for multi-dimensional convection-diffusion problems”, *ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, **50**:4 (2016), 1083–1105.

Submitted 9.12.2019