

ИНСТРУМЕНТАРИЙ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОГО РАСЧЁТА ПРОЦЕССОВ МАССООБМЕНА В ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Р.Н. Голых¹, А.Р. Барсуков¹, С.Г. Ильясов², Г.Т. Суханов², Г.В. Пышнограй³,
Л.Ф. Комарова³, А.Н. Блазнов¹, А.Г. Овчаренко¹

¹ Бийский технологический институт (филиал) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Бийск

² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск

³ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул

Предложен подход к реализации метода конечных элементов (МКЭ) для решения многопараметрических и многоитерационных краевых задач. Для создания подхода проанализированы издержки алгоритма МКЭ, имеющиеся в стандартном программном пакете на примере FreeFEM++. Исследованы возможности снижения затрат на производительность за счет устранения дублирования промежуточных данных и, тем самым, уменьшения количества операций копирования, выделения и освобождения памяти. Разработан способ индексации и модифицированный алгоритм решения конечно-элементных задач. Результаты расчетов с использованием разработанного алгоритма были сопоставлены с аналитическим решением (относительное отклонение от аналитического решения составило менее 10^{-4}). С помощью разработанной библиотеки достигнуто ускорение до 3-х раз и более без использования новых вычислительных ядер. Полученные результаты по ускорению расчётов могут быть применены при численном моделировании процессов массообмена в химико-технологических системах, где требуется многократное решение сопряжённых нестационарных задач переноса вещества.

Ключевые слова: индексация, алгоритм, метод конечных элементов, ускорение, FreeFEM++, краевая задача, массообмен.

ВВЕДЕНИЕ

Моделирование процессов массообмена является крайней важной задачей при разработке и оптимизации современных химико-технологических процессов, поскольку именно перенос вещества между фазами зачастую ограничивает скорость реакций, энергоэффективность и масштабируемость технологий. Точные численные модели позволяют исследовать распределения концентраций, локальные потоки, влияние гидродинамики, межфазной поверхности.

В этом контексте становится актуальным высокоскоростной конечно-элементный расчёт, так как реальные процессы массообмена протекают в нестационарных, многомасштабных и часто нелинейных условиях.

Краевые задачи, возникающие в современных приложениях, отличаются следующими особенностями

– многопараметрические задачи, требующие множественного набора исходных данных [1–2];

– многоитерационные задачи, где количество итераций может достигать нескольких тысяч из-за нелинейностей в исходных уравнениях или сингулярности решения [3].

Если задача многопараметрическая, то необходимо выполнять вычисления с множественным набором исходных данных. Линейные задачи с множественным набором исходных данных возникают при обработке изображений высокоскоростной съемки границы раздела оптически прозрачных сред (например, «газ-жидкость»), когда необходимо обработать более 200 000 кадров на одну секунду протекания реального процесса [1, 2] или при моделировании/обработке экспериментальных данных в ходе исследования химических и технологических процессов в условиях многофакторного физического воздействия, особенно когда входные параметры имеют несколько степеней свободы. Многоитерационная задача может возникнуть в механике твердого тела с трещинами, когда решение имеет сингулярность [3], или в нелинейных уравнениях. Наиболее очевидным способом повышения производительности при решении таких задач является распараллеливание наборов исходных данных без декомпозиции элементарной задачи. Нет сомнений в том, что параллельная декомпозиция элементарной задачи приведёт к снижению удельной производительности вычислений (количества операций, выполняемых в единицу времени на 1 вычислительное ядро) из-за затрат, возникающих при передаче данных между

ядрами. Результирующее снижение может достигать 2 раз и более. Когда необходимо решить большое количество линейных задач, удовлетворяющих условию $\frac{N_{cores}^2 T_{max}}{N_{tasks} T_{avg}} \ll 1$ (N_{cores} – количество

вычислительных узлов, T_{max} – максимальное время для решения одной задачи на одном ядре, N_{tasks} – общее количество задач, T_{avg} – среднее время для решения одной задачи), распараллеливание по наборам исходных данных, поскольку нет затрат, связанных с передачей данных между ядрами – это лучший способ повысить производительность вычислений, при условии, что нет декомпозиции отдельной задачи (с одним набором входных данных). Однако даже высокоэффективное распараллеливание оказывается недостаточным при решении реальных задач. Поэтому необходимо проанализировать затраты на производительность решения одной краевой задачи на отдельном вычислительном ядре.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Анализ издержек производительности при решении краевых задач был проведен на примере программного комплекса FreeFEM++ [4–6], который представляет собой программное обеспечение для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных на основе метода конечных элементов. FreeFEM++ способен описывать задачи в соответствии с их вариационными формулировками, обеспечивая доступ к векторам и матрицам, возникающим в ходе численного решения вариационной задачи. Пакет оснащен автоматическим генератором сетки на основе метода Вороного-Делоне, адаптацией анизотропной сетки на основе метрик. Он имеет высокоуровневый язык программирования с набором функций аналитической алгебры и на конечных элементах, что делает его быстрым и удобным для пользователя. В одной программе для FreeFEM++ может использоваться несколько конечно-элементных сеток с автоматической интерполяцией данных на разных сетках и возможным хранением интерполированных матриц.

Для разработки модификации алгоритма был проанализирован код для FreeFEM++, предназначенный для решения простейшей многопараметрической задачи Дирихле для уравнения Лапласа.

Анализ исходного кода FreeFEM++ позволил выявить следующие издержки, возникающие даже при решении такой простейшей задачи:

- выделение и освобождение памяти при построении матрицы СЛАУ на каждой итерации;
- преобразование индексов узлов и конечных элементов в элементы матрицы системы на каждой итерации;

–расчёт элементов матрицы СЛАУ на каждой итерации;

–копирование результатов решения СЛАУ в массив значений узлов искомой функции p на каждой итерации.

Однако решение многопараметрической задачи на каждой итерации требует изменения лишь столбца правых частей уравнения в зависимости от граничных условий. При этом оказывается достаточным построить массивы, связывающие индексы (по отдельности внутренних $v(i)$ и граничных узлов сетки $b(j)$) с индексами элементов матрицы и коэффициентов $Cb(j)$ в выражениях для столбца правых частей, лишь перед началом первой итерации, как показано на рис. 1.

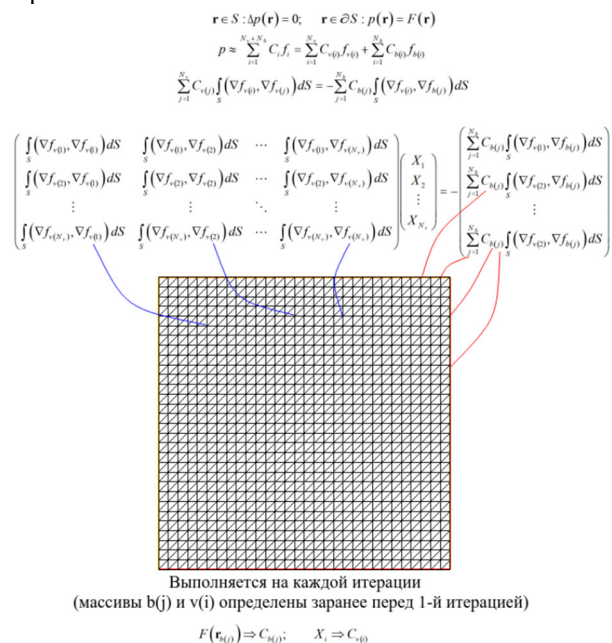


Рис. 1. Схематичное изображение индексации внутренних и граничных узлов сетки для построения СЛАУ (синие линии - связь индексов столбцов матрицы и компонент вектора решений с внутренними узлами, красные линии - связь коэффициентов столбца правых частей с граничными узлами)

С использованием указанных массивов проводится построение столбца правых частей в зависимости от граничных условий без изменения матрицы системы на каждой итерации. Отсюда возникает очевидная экономия времени расчётов за счёт индексации, используемой на протяжении всех итераций, и отсутствия операций выделения освобождения памяти на каждой итерации.

Кроме того, используя итерационный решатель для систем линейных уравнений с разреженными матрицами, операции выделения и освобождения памяти для целочисленных индексов матрицы системы осуществляются единожды в предложенной модификации.

Аналогичные подходы применяются для решения рекуррентных задач, требующих множества итераций.

Таким образом, кратко описана предложенная модификация алгоритма конечно-элементного решения многопараметрических и многоитерационных краевых задач, а сам модифицированный алгоритм реализован в виде программной библиотеки.

Сравнение времён расчёта приводилось на примере задач с расчётными областями, возникающими в практических приложениях:

– расчётная область, содержащая бесконечно-дифференцируемое включение (включение с бесконечно-дифференцируемой границей). На практике подобные расчётные области возникают в случаях, когда жидкость содержит возмущённый газовый пузырьёк;

– расчётная область, содержащая кусочно-гладкое включение (включение с кусочно-гладкой границей). Такие включения возникают в практических задачах, когда твёрдое тело содержит трещины и/или жёсткие включения.

Параметры, задаваемые в уравнениях, равнялись $A = 1$; $q = 100$; $\nu = 0,1$. Для каждой из расчётных областей задавались тестовые граничные условия Дирихле:

$$w_x = \frac{x-0,5}{\sqrt{(x-0,5)^2 + (y-0,5)^2}}$$

$$w_y = \frac{y-0,5}{\sqrt{(x-0,5)^2 + (y-0,5)^2}}$$

$$p = 0$$

Результаты расчётов, свидетельствующие о сходимости численного метода для данных расчётных областей, представлены на рис. 2 с результатами расчётов и рисунке с зависимостями разности норм

$$\frac{\|w_x^{(n+1)} - w_x^{(n)}\|}{\|w_x^{(n+1)}\|}$$

от номера итерации.

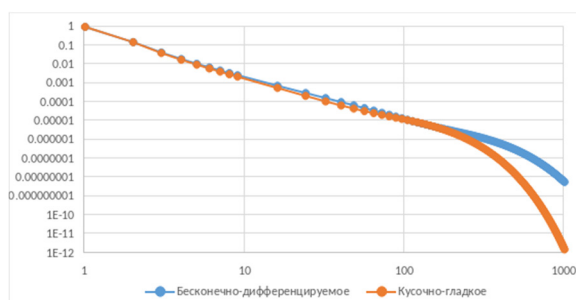


Рис. 2. Зависимости $\frac{\|w_x^{(n+1)} - w_x^{(n)}\|}{\|w_x^{(n+1)}\|}$ от n для областей с различными типами включений.

Далее проведено сравнение времён расчётов для различных типов включений с помощью программы, разработанной на языке C, и с помощью FreeFEM++.

Расчёты были проведены при фиксированном количестве итераций 1000, при котором различие относительных норм значения функции между соседними итерациями не превышает 10^{-8} .

На рис. 3 приведены зависимости степени ускорения (1000 итераций), определяемой как $\frac{T_{FF}}{T_C}$

(T_{FF} – время расчётов с помощью FreeFEM++, T_C – время расчётов с помощью разработанной программы на языке C) от количества элементов сетки для областей с бесконечно-дифференцируемым и кусочно-гладким включением. Для количества элементов 36 706 в области с кусочно-гладким включением время расчётов с помощью FreeFEM++ составляет 168 с.

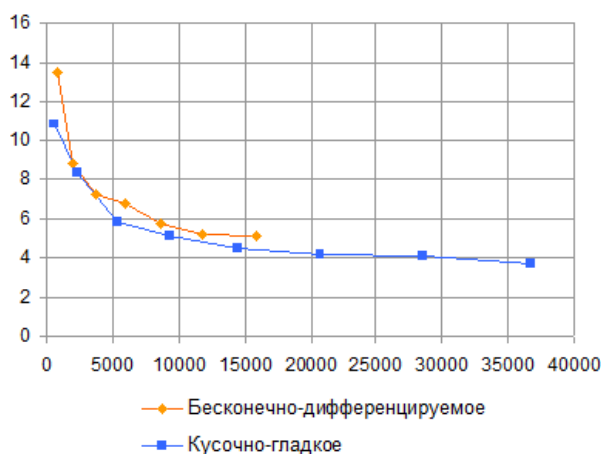


Рис. 3. Зависимости $\frac{\|w_x^{(n+1)} - w_x^{(n)}\|}{\|w_x^{(n+1)}\|}$ от n для областей с различными типами включений

Согласно представленным зависимостям, достигнутая степень ускорения составляет не менее 3-х раз для областей с включениями, возникающими в практических задачах. При количестве конечных элементов менее 1000 степень ускорения достигает 10 раз.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен подход к повышению производительности решения многопараметрических и многоитерационных краевых задач, который характеризуется следующими особенностями:

- снижение затрат на производительность за счет устранения дублирования промежуточных данных на каждой итерации и, тем самым, сокращения количества операций копирования, выделения и освобождения памяти;
- индексация вершин, сегментов и конечных элементов сетки;
- предварительный расчет параметров сетки (интегралы по конечным элементам от скалярных

произведений базисных функций, либо их производных, а также от одночленов, входящих в результаты этих скалярных произведений).

На основании предложенного подхода разработана и протестирована библиотека на языке С для решения краевых задач методом конечных элементов. Результаты расчетов с использованием разработанной библиотеки были сопоставлены с аналитическим решением, и относительное отклонение от аналитического решения составило менее 10^{-4} . По сравнению со стандартным программным пакетом FreeFEM++ для решения краевых задач в областях с включениями было достигнуто как минимум в 3 раза. При количестве конечных элементов менее 1000 степень ускорения достигает 10 раз для областей с кусочно-гладким и бесконечно-дифференцируемым включением.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-12-00278, <https://rscf.ru/project/23-12-00278/>.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Голых, Р.Н. Влияние ультразвукового кавитационного воздействия на межфазную поверхность «газ-жидкость» при принудительной аэрации [Текст] / Р.Н. Голых, Ж.-Б. Карра, В.Н. Хмельёв, И.А. Маняхин, В.Д. Минаков, Д.В. Генне, А.Р. Барсуков // Прикладная механика и техническая физика. – 2024.
2. Zerwas, A., Avila, K., Paiva, J., Guardani, R., Achelis, L., and Fritsching, U., “High-speed Video Image Analysis of Liquid Metal Atomization Process,” *Atomization and Sprays*, vol. 34, 2024.
3. Liebold, F., Assadzadeh, H.A., Mosig, O., Curbach, M., Mechtcherine, V., and Maas, H.G., “Crack Propagation Velocity Determination by High-speed Camera Image Sequence Processing,” *Materials*, vol. 13, 2020.
4. Sadaka, G., “FreeFem++, a tool to solve PDEs numerically,” *arXiv:1205.1293v1*, 2012.
5. Nasibullayev, I.Sh., “Application of free software FreeFem++/Gmsh and FreeCAD/CalculiX for simulation of static elasticity problems,” *Multiphase Systems*, vol. 15, no. 3–4, pp. 183–200, 2020.
6. Hecht, F., “FreeFem++, a finite element PDE solver,” *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering. ECCOMAS 2004*, pp. 24–28; 8, 2004.

Голых Роман Николаевич – доктор технических наук, профессор кафедры методов и средств измерений и автоматизации, Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО АлтГТУ, тел. (3854)432570, e-mail: grn@bti.secna.ru.

Барсуков Александр Романович – старший преподаватель кафедры методов и средств измерений и автоматизации, Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО АлтГТУ, тел. (3854)432570, e-mail: barsukov.ar@bti.secna.ru.

Ильясов Сергей Гаврилович – доктор химических наук, главный научный сотрудник ИПХЭТ СО РАН, e-mail: ipcet@mail.ru

Суханов Геннадий Тимофеевич – доктор химических наук, главный научный сотрудник ИПХЭТ СО РАН, e-mail: ipcet@mail.ru

Пышиноград Григорий Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор АлтГТУ

Комарова Лариса Фёдоровна – доктор технических наук, профессор АлтГТУ

Блазнов Алексей Николаевич – доктор технических наук, профессор Бийского технологического института (филиал) ФГБОУ ВО АлтГТУ, e-mail: blaznov74@mail.ru

Овчаренко Александр Григорьевич – доктор технических наук, профессор Бийского технологического института (филиал) ФГБОУ ВО АлтГТУ

TOOLS FOR ACCELERATION OF FINITE ELEMENT CALCULATIONS OF MASS TRANSFER PROCESSES IN CHEMICAL ENGINEERING

R.N. Golykh¹, A.R. Barsukov¹, S.G. Ilyasov², G.T. Sukhanov², G.V. Pyshnograd³,
L.F. Komarova³, A.N. Blaznov¹, A.G. Ovcharenko¹

¹ Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, Biysk

² IPCET SB RAS, Biysk

³ Polzunov Altay State Technical University, Biysk

An approach to implementing the finite element method (FEM) for solving multiparameter and multi-iteration boundary value problems is proposed. To develop this approach, the costs of the FEM algorithm available in the standard software package were analyzed using FreeFEM++ as an example. Possibilities of reducing performance costs by eliminating duplication of intermediate data, thereby reducing the number of copying, allocation, and deallocation operations of memory, were investigated. An indexing method and a modified algorithm for solving finite element problems were developed. The calculation results using the developed algorithm were compared with the analytical solution (the relative deviation from the analytical solution was less than 10–4). Using the developed library, an acceleration of up to 3 times or more was achieved without the use of new computing cores. The obtained results in accelerating the calculations can be applied in the numerical modeling of mass transfer processes in chemical engineering systems, where multiple solutions of conjugate non-stationary mass transfer problems are required.

Index terms: indexing, algorithm, finite element method, acceleration, FreeFEM++, boundary value problem, mass transfer.

REFERENCES

1. Golykh, R.N., J.-B. Carrat, V.N. Khmelev, I.A. Manyakhin, V.D. Minakov, D.V. Genne, and A.R. Barsukov, "Influence of ultrasonic cavitation on interphase surface 'gas-liquid' at forced aeration," *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2024. (In Russ.)
2. Zerwas, A., K. Avila, J. Paiva, R. Guardani, L. Achelis, and U. Fritsching, "High-speed video image analysis of liquid metal atomization process," *Atomization and Sprays*, vol. 34, 2024.
3. Liebold, F., H.A. Assadzadeh, O. Mosig, M. Curbach, V. Mechtcherine, and H.G. Maas, "Crack propagation velocity determination by high-speed camera image sequence processing," *Materials*, vol. 13, 2020.
4. Sadaka, G., "FreeFem++, a tool to solve PDEs numerically," *arXiv:1205.1293v1*, 2012.
5. Nasibullayev, I.Sh., "Application of free software FreeFem++/Gmsh and FreeCAD/CalculiX for simulation of static elasticity problems," *Multiphase Systems*, vol. 15, no. 3–4, pp. 183–200, 2020.
6. Hecht, F., "FreeFem++, a finite element PDE solver," *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering. ECCOMAS 2004*, pp. 24–28: 8, 2004.

Golykh Roman Nikolaevich – Doctor of Technical Sciences, professor at the chair of methods and means of measuring and automation, Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, (3854)432570, e-mail: gm@bti.secna.ru.

Barsukov Aleksandr Romanovich – senior lecturer at the chair of methods and means of measuring and automation, Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, (3854)432570, e-mail: barsukov.ar@bti.secna.ru.

Ilyasov Sergey Gavrilovich – Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher at IPHET SB RAS, e-mail: ipcet@mail.ru

Sukhanov Gennady Timofeevich – Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher at IPHET SB RAS, e-mail: ipcet@mail.ru

Pyshnograd Grigory Vladimirovich – Doctor of Physico-mathematical Sciences, Professor of AltSTU

Komarova Larisa Fedorovna – Doctor of Technical Sciences, Professor at AltSTU

Blaznov Alexey Nikolaevich – Doctor of Technical Sciences, Professor at the Biysk Institute of Technology (branch) of the AltSTU Federal State Budgetary Educational Institution, e-mail: blaznov74@mail.ru

Ovcharenko Alexander Grigoryevich – Doctor of Technical Sciences, Professor at the Biysk Institute of Technology (branch) of the AltSTU Federal State Budgetary Educational Institution