



РОЗПАРАЛЕЛЮВАННЯ РОЗРАХУНКУ ТРИВИМІРНИХ ТЕМПЕРАТУРНИХ ПОЛІВ У НЕЛІНІЙНИХ АНІЗОТРОПНИХ СЕРЕДОВИЩАХ МЕТОДОМ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Наведено результати розроблення та комплексного дослідження гібридного паралельного алгоритму методу скінченних елементів (МСЕ) для моделювання тривимірних стаціонарних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах. Виявлено, що традиційні реалізації МСЕ, зокрема – мовою Python, мають обчислювальні обмеження ("вузькі місця") в разі застосування густих сіток через особливості інтерпретатора Python обмежувати одночасне виконання декількох потоків коду в одному процесі GIL (англ. *Global Interpreter Lock*) та через низьку швидкість оброблення операторів циклу. Встановлено, що обмежувачами обчислювальної продуктивності методу у стандартних алгоритмах є етапи формування локальних внесків (assembly) скінченних елементів та їх агрегації (aggregation) у глобальну матрицю жорсткості GSM (англ. *Global Stiffness Matrix*), які становлять основну частку витрат часу до моменту розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). З'ясовано, що застосування комбінованої моделі обчислень, яка поєднує JIT (англ. *Just-in-Time*) компіляцію Numba та багатопроцесорного оброблення даних засобами бібліотеки Joblib, дає змогу ефективно паралелізувати процес Assembly та пришвидшити генерування СЛАР. Оцінено вплив структури зберігання розріджених матриць на загальну тривалість розрахунку тривимірних температурних полів: доведено, що використання формату COO (англ. *Coordinate List*) усуває проблему "перегонів даних" (data race), даючи можливість кожному процесу генерувати внески в матрицю жорсткості та вектора нев'язок незалежно. Охарактеризовано закономірності масштабованості запропонованого алгоритму, який забезпечує значне пришвидшення етапу агрегації елементів матриці жорсткості (до 337 разів) завдяки заміні повільного поелементного додавання даних у розріджені матриці на ефективне групове об'єднання COO-масивів із подальшим швидким перетворенням у CSR-формат. Виявлено, що після оптимізації етапів формування матриці основне обчислювальне навантаження переходить на етап розв'язання СЛАР (Solver). Оцінено практичну значущість запропонованого програмного забезпечення, яке забезпечує зменшення тривалості генерування СЛАР порівняно з еталонним кодом до 5,93 разів. Наведено наукову новизну роботи, яка полягає в розробленні методики паралельного формування глобальної матриці жорсткості та вектора нев'язок МСЕ для моделювання тривимірних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах.

Ключові слова: паралельна реалізація МСЕ; лагранжевий тетраедр; компілятор Numba; бібліотека Joblib; розріджені матриці; COO формат.

Вступ / Introduction

Для сучасних завдань моделювання теплових процесів у тривимірних середовищах, зокрема – в нелінійних анізотропних матеріалах, характерні висока обчислювальна складність та значні вимоги до обчислювальних ресурсів. Особливо це проявляється в разі використання методу скінченних елементів (МСЕ), оскільки зі зростанням щільності сітки різко збільшується обсяг обчислень і тривалість їх виконання. Математичний опис таких процесів у безгістерезисних середовищах призводить до формування систем нелінійних диференціальних рівнянь. Традиційні послідовні алгоритми не здатні забезпечити прийнятну швидкість розрахунків. Тому важливим є завдання підвищення ефективності обчислень шляхом використання технологій їх розпара-

лелювання та оптимізації структури зберігання розріджених матриць.

Актуальність дослідження обґрунтована необхідністю підвищення продуктивності чисельного моделювання теплових процесів у тривимірних нелінійних анізотропних середовищах із використанням МСЕ. Це зумовлює потребу розроблення ефективних гібридних паралельних алгоритмів, застосування сучасних засобів пришвидшення обчислень і раціональних структур зберігання розріджених матриць. Водночас, корисним є експериментальне оцінювання ефективності таких рішень на багатоядерних архітектурах процесорів, а також забезпечення наочності та фізичної адекватності отриманих результатів шляхом їх візуалізації. Це дасть змогу істотно скоротити тривалість дослідження.

© Copyright 2026 by the author(s)

Яркун Володимир Ігорович, ст. викладач, кафедра інженерії програмного забезпечення.

Email: yarkun@ntu.edu.ua; <https://orcid.org/0000-0002-4876-1111>

Карашецький Володимир Петрович, канд. техн. наук, доцент, кафедра інженерії програмного забезпечення.

Email: karashetsky@ntu.edu.ua; <https://orcid.org/0009-0008-1460-2674>

Процик Юрій Степанович, канд. фіз.-мат. наук, доцент, кафедра комп'ютерних наук.

Email: protsyk@ntu.edu.ua; <https://orcid.org/0000-0002-8226-2113>

Цитування за ДСТУ: Яркун В. І., Карашецький В. П., Процик Ю. С. Розпаралелювання розрахунку тривимірних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах методом скінченних елементів. Науковий вісник НЛТУ України. 2026, т. 36, № 4. С. 51–58.

Citation APA: Yarkun, V. I., Karashetsky, V. P., & Protsyk, Yu. S. Parallelization of the calculation of three-dimensional temperature fields in nonlinear anisotropic environments using the finite element method. *Scientific Bulletin of UNFU*, 36(4), 51–58.

<https://doi.org/10.36930/40360406>

Об'єкт дослідження – розпаралелювання розрахунку тривимірних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах.

Предмет дослідження – методи і засоби розпаралелювання розрахунку тривимірних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах, що дасть змогу зменшити часові витрати на формування та оброблення великих скінченно-елементних моделей.

Мета роботи – розробити гібридний паралельний алгоритм МСЕ для моделювання тривимірних стаціонарних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах, який забезпечить усунення обчислювальних обмежень ("вузьких місць") під час розв'язання задач з великою кількістю скінченних елементів.

Для досягнення зазначеної мети визначено такі основні завдання дослідження:

- визначити "вузькі місця", які обмежують продуктивність реалізацій МСЕ, що дасть змогу встановити основні джерела обчислювальних витрат та обґрунтувати напрями їх подальшої оптимізації;
- дослідити вплив формату зберігання розріджених матриць на швидкість процесу агрегації внесків скінченних елементів, що дасть можливість обґрунтувати вибір оптимальної структури даних для паралельної збірки матриці жорсткості;
- розробити гібридний паралельний алгоритм формування матриці жорсткості, що забезпечить підвищення швидкодії процесу генерування СЛАР та ефективне використання обчислювальних ресурсів;
- реалізувати програмне забезпечення із застосуванням сучасних засобів пришвидшення обчислень та оптимізованих структур зберігання розріджених матриць, що дасть можливість зменшити часові витрати на формування та оброблення великих скінченно-елементних моделей;
- провести експериментальне дослідження ефективності розробленого ПЗ, що дасть змогу оцінити показники ефективності розпаралелювання обчислень та проаналізувати масштабованість гібридного паралельного алгоритму МСЕ на задачах різної розмірності.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Перенесення теплової енергії є одним з ключових фізичних механізмів у багатьох галузях техніки, враховуючи технологію деревооброблення [25], електроніку [11, 12], медицину [5] та інші. Наявні реалізації паралельних обчислень розподілу температури стикаються з рядом проблем. Для вирішення цих проблем застосовують числові методи, наприклад, метод скінченних елементів, метод скінченних різниць [9] та ряд інших. У роботі [11] виконано числовий аналіз поведінки температури як функції просторових координат для заданих значень геометричних і теплофізичних параметрів. Досліджено вплив потужності зовнішніх джерел тепла, теплофізичних та геометричних параметрів середовища на розподіл температури.

У дослідженні [22] значна увага приділяється розробленню ефективних паралельних підходів до моделювання теплових та масообмінних процесів у тривимірних середовищах.

В праці [20] зазначається, що особливої актуальності такі алгоритми набувають при аналізі складних капілярно-пористих матеріалів з анізотропними теплофізичними властивостями, де обчислювальні навантаження істотно зростають зі збільшенням розмірності задачі та щільності скінченно-елементної сітки.

У публікації [25] автори зазначають, що на основі тривимірної математичної моделі неізотермічного теп-

ломасоперенесення в капілярно-пористих матеріалах, з урахуванням анізотропії теплофізичних властивостей розроблено програмне та алгоритмічне забезпечення для проведення скінченно-елементного аналізу вологоперенесення з використанням технології CUDA.

Розвиток ідей автоматизації МСЕ наведено у проєкті Firedrake [6], де акцент зміщено на композицію абстракцій. На відміну від монолітних систем, Firedrake впроваджує проміжний шар, який дає змогу розділити локальну дискретизацію математичних операторів та їх паралельне виконання на неструктурованих сітках. Це забезпечує гнучкість у виборі стратегій виконання та дає змогу проводити глибоку оптимізацію обчислювальних ресурсів.

У публікації [18] запропоновано багаторівневий алгоритм, що спирається на застосування методу multigrid на нелінійному рівні з метою зменшення затрат часу на розв'язування великих СЛАР. МСЕ подається як загальновизнаний стандарт для розв'язання таких задач, дає змогу моделювати області зі складною геометрією та різнорідними, часто анізотропними та нелінійними властивостями середовищ.

У роботі [4] описано паралельний лінійний спосіб, який поєднуючи алгебраїчний метод multigrid (PAMG) та схему Constraint Pressure Residual (CPR), демонструє п'ятикратне пришвидшення процесу розв'язування великих СЛАР. Такий підхід пропонує гнучкий об'єктно-орієнтований фреймворк для розв'язання нелінійних анізотропних задач теплоперенесення та корелює з нашим дослідженням.

Проведений аналіз останніх досліджень та публікацій свідчить про те, що попри наявність потужних інструментів для розв'язання великих СЛАР (зокрема PAMG/CPR [4] та CUDA [25]), розроблення програмного забезпечення на основі гібридних паралельних алгоритмів МСЕ для моделювання тривимірних температурних полів у складних інженерних об'єктах залишається актуальним завданням, оскільки під час масштабування задач для нелінійних анізотропних середовищ [20] та реалізації гнучких обчислювальних абстракцій [6] головні обмеження продуктивності зміщуються з етапу розв'язання рівнянь на етапи формування матриці жорсткості – обчислення та безпосередньої агрегації локальних компонентів. Відповідно, ключова наукова проблема полягає в необхідності розроблення та дослідження нових ефективних гібридних паралельних підходів до її вирішення на рівні архітектури процесорів, здатних усунути ці обмеження ще на стадії збирання розріджених даних.

Матеріали та методи дослідження. У роботі застосовано методи чисельного моделювання теплофізичних процесів, паралельних обчислень та аналізу продуктивності алгоритмів паралельної збірки для дослідження ефективності реалізації МСЕ у задачах розрахунку тривимірних статичних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах з використанням триангуляції тривимірної області розрахунку лагранжевими тетраедрами першого порядку. Для формування системи рівнянь використано методи агрегації локальних внесків у розріджені матриці із застосуванням формату COO (Coordinate list). Методичну основу дослідження становлять підходи до паралелізації обчислень та методи JIT-компіляції. Оцінювання ефективності паралельної реалізації алгоритму МСЕ здійснювалось шляхом

експериментального аналізу часових характеристик окремих його етапів та визначення їх коефіцієнтів пришвидження. Для візуалізації результатів моделювання температурних полів застосовано засоби тривимірної графіки Plotly та Matplotlib.

Результати дослідження та їх обговорення / Research results and their discussion

Математичне забезпечення чисельного моделювання теплофізичних процесів базується на розв'язанні крайової задачі розрахунку тривимірного стаціонарного потенціального температурного поля з урахуванням нелінійних та анізотропних властивостей середовища шляхом мінімізації енергетичного функціоналу методом скінченних елементів [15], який для задачі теплоперенесення добре наведено у роботах [5, 25].

У роботі [15] детально описано постановку крайової задачі розрахунку тривимірних стаціонарних потенціальних теплових полів МСЕ. Автори побудували скінченно-елементну модель для розрахунку розподілу температури всередині тривимірної області, заповненої безгістерезисними нелінійними анізотропними середовищами. Обчислення реалізовано із застосуванням кубатурної формули чисельного інтегрування за об'ємом лагранжевого тетраедра на базі інтерполяційного повного поліному першого порядку. На основі умови мінімуму функціоналу отримано систему нелінійних алгебраїчних рівнянь, для розв'язання якої традиційно застосовують ітераційний метод Ньютона.

Реалізація гібридного паралельного алгоритму МСЕ для розв'язання крайової задачі складається з чотирьох основних етапів, кожен з яких має власну обчислювальну складність, що визначає загальну продуктивність моделі [17, 18, 25]:

1. *Triangulation* (побудова сітки). Принцип цього етапу – це поділ тривимірної області розрахунку на скінченну кількість скінченних елементів у вигляді лагранжевих тетраедрів першого порядку. Теоретична обчислювальна складність O зазвичай залежить від алгоритму триангуляції. Для якісної сітки вона може бути близькою до $O(M \log M)$ або $O(M)$, де M – кількість скінченних елементів. Внаслідок очікується створення набору вузлів (з координатами), скінченних елементів (списку вузлів, що формують кожен із скінченних елементів) та відповідних граничних умов. Триангуляція визначає кількість рівнянь (кількість внутрішніх вузлів R) та кількість скінченних елементів R , які прямо впливають на складність наступних етапів.
2. *Assembly* (формування внесків скінченних елементів). Це найбільш масово-паралельний етап, який передбачає незалежне обчислення внесків кожного із скінченних елементів. На цьому етапі для кожного m -го скінченних елементів обчислюється локальна матриця жорсткості ϕ_m та внесок $\bar{\phi}_m^*$ у вектор нев'язок $\bar{\phi}$. Обчислення містить інтегрування функцій форми (кубатурних формул чисельного інтегрування за об'ємом лагранжевого тетраедра першого порядку). Теоретична обчислювальна складність при цьому становитиме $O(Mp^3)$, де p – розмірність локальної матриці ($p = 4$ для лагранжевого тетраедра першого порядку). Обчислювальна складність визначається лінійною залежністю $O(M)$ від кількості скінченних елементів M . Цей процес потребує масштабних обчислень, що можуть бути пришвидшені за допомогою компілятора Numba та бібліотеки Joblib.
3. *Aggregation* (складання внесків скінченних елементів у глобальну матрицю жорсткості та вектор нев'язок). Для

формування глобальної системи рівнянь використовуємо метод агрегації локальних внесків у розріджені матриці із застосуванням формату COO, який зберігає матрицю у вигляді трьох окремих одновимірних масивів: масиву індексів рядків, масиву індексів стовпців та масиву значень (даних). У нашій паралельній схемі формат компілятора Numba + COO використовують як проміжний, паралельно-заповнюваний буфер. Внески кожного з M скінченних елементів обчислює власний окремий процес, який незалежно генерує свою частину трьох COO-масивів, уникаючи гонки даних. Після того, як обчислені внески всіх скінченних елементів зібрані, всі локальні COO-масиви конкатенуються у глобальну матрицю жорсткості (Якобі) ϕ . Формат COO слугує ідеальним мостом між паралельним обчисленням внесків та вимогами розв'язувача СЛАР, який потребує формату CSR для максимальної швидкості. Складність цього етапу $O(M)$ лінійно залежить від кількості скінченних елементів M .

4. *Solver* (розв'язання задачі). На цьому етапі знаходиться фінальний розв'язок – значення температури у вузлах. Нелінійну систему алгебраїчних рівнянь [15], отриману з умови мінімуму функціонала F , розв'язують, зазвичай, ітераційним методом Ньютона з використанням рекурентної формули $\varphi(\bar{U}_{*1})(\bar{U}_{*1} - \bar{U}_{*0}) = -\bar{\phi}(\bar{U}_{*0})$ для h -го наближення, яка сповна відображає СЛАР. Обчислення проводимо доти, поки виконується норма $\|\bar{U}_{*1} - \bar{U}_{*0}\| > \varepsilon$ для забезпечення точності розв'язання задачі ε .

Теоретична обчислювальна складність гібридного паралельного алгоритму МСЕ для розв'язання крайової задачі, яка складається з чотирьох основних етапів, становить $O(R^3)$, де R – кількість рівнянь (кількість внутрішніх вузлів). Цей етап має найвищу теоретичну обчислювальну складність (поліноміальна залежність від R), і є найвужчим місцем на сітках з великою кількістю скінченних елементів.

Реалізовано ПЗ для паралельного розв'язання задачі моделювання теплових процесів у тривимірних нелінійних анізотропних середовищах МСЕ, що охоплює головний метод `fem_solver_PO()`, ключова ідея якого полягає у використанні бібліотеки Joblib для розподілу елементів на "чанки" та їх паралельне оброблення даних функцією `element_chunk_PO()`. Алгоритм паралельної реалізації обчислення полягає в тому, що внески кожного m -го скінченних елементів власний окремий процес обчислює незалежно за допомогою функції `assemble_element()` і збирає всі ненульові елементи матриці та вектори нев'язок у три окремі масиви COO (`rows_list`, `cols_list`, `data_list`). Після завершення паралельної фази ці локальні масиви з усіх ядер конкатенуються в один великий набір, який потім використовується для швидкісного перетворення з формату COO у формат CSR. Це перетворення автоматично підсумовує дублікати внесків. Отримана CSR-матриця та вектор нев'язок передаються розв'язувачу для знаходження кінцевого рішення.

На кожному з трьох етапів (*assembly*, *aggregation*, *solver*) фіксуємо час, витрачений для послідовного та паралельного розрахунку. Для прикладу, реалізовано розпаралелювання розрахунку тривимірного стаціонарного потенціального теплового поля всередині тривимірної області, заповненої лінійним ізотропним середовищем МСЕ. Вихідні параметри, що визначають триангуляцію тривимірної області розрахунку та властивості середовища, наведено у табл. 1.

Табл. 1. Вхідні параметри (геометрія та матеріал) /
Input parameters (geometry and material)

Категорія	Параметр	Опис та призначення
Геометрія області розрахунку	Область розрахунку D	Тривимірний об'єкт у вигляді куба, для якого необхідно визначити розподіл температури U .
	Триангуляція області розрахунку	Сукупність M лагранжевих тетраедрів (скінченних елементів) 1-го порядку.
	Координати вузлів	Координати x, y, z усіх вузлів (R внутрішніх та G граничних).
Властивості середовища	μ_s	Коефіцієнт теплопровідності для лінійного безгістерезисного ізотропного середовища.

Для виконання граничних умов Діріхле задамо значення температури U у G у граничних вузлах, розміще-

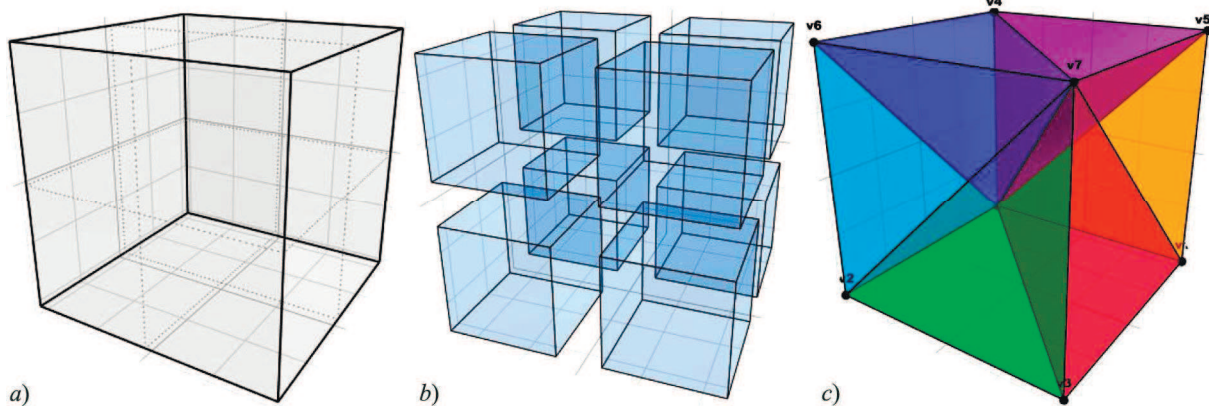


Рис. 1. Триангуляція області розрахунку / Triangulation of the calculation domain: a) область розрахунку / calculation domain; b) декомпозиція області на елементарні куби / decomposition of the domain into elementary cubes; c) поділ елементарного куба на 6 лагранжевих тетраедрів / partitioning of the elementary cube into 6 Lagrangian tetrahedra

Однією з головних проблем забезпечення високої обчислювальної продуктивності під час реалізації методу скінченних елементів засобами інтерпретованих мов програмування, зокрема – Python, є їх нижча швидкість порівняно з компільованими мовами, такими як C або C++. Особливо помітним це стає під час розв'язання тривимірних задач великої розмірності зі значною кількістю скінченних елементів. Хоча бібліотека NumPy ефективно виконує векторизовані операції, її продуктивність істотно зменшується у разі, коли алгоритм передбачає поетапне опрацювання елементів або використання складних вкладених циклів, що не піддаються векторизації. Тому виникає потреба у використанні технологій JIT (англ. *Just-in-Time*) компілятора Numba, яка дає змогу пришвидшити виконання найбільш обчислювально навантажених фрагментів програмного коду.

Важливим етапом дослідження є візуалізація та перевірка отриманих результатів моделювання. Оскільки розрахунки виконуються для тривимірного температурного поля, найінформативнішим способом подання результатів просторового розподілу температурного потенціалу є побудова перерізів розрахункової області, що дає змогу наочно аналізувати характер розподілу температури, середнє значення якої становить близько 50 °C.

З використанням бібліотеки matplotlib та mpl_toolkits.mplot3d побудовано графік розподілу температури (рис. 2) в області на перерізі $Y = 0,5$ м.

Гradient теплової карти відповідає обчисленій температурі U , висока температура фіксується на гранях $X = 0, X = 1$ із зниженням до центру області.

Проведемо аналіз запропонованого гібридного паралельного алгоритму, результати якого дадуть можли-

них на гранях куба, зокрема – $U = 100$ °C – у вузлах на двох протилежних гранях та $U = 50$ °C – у вузлах на інших гранях. Для спрощення розрахунків вважаємо, що тривимірний об'єкт розрахунку заповнений лінійним ізотропним середовищем з коефіцієнтом теплопровідності $\mu_s = 1$ Вт/(м²К).

Для чисельного розв'язання тривимірної крайової задачі теплопровідності в середовищах методом скінченних елементів (МСЕ) першочерговим етапом є геометрична триангуляція області розрахунку, яка в нашому випадку виконується шляхом поділу суцільного середовища у вигляді куба з довжиною ребер, що дорівнює 1 м, на скінченну множину елементарних кубів, кожний з яких складається із шести лагранжевих тетраедрів (рис. 1). Вершини кожного тетраедра збігаються з вершинами елементарного куба.

вість виявити "вузькі місця", які обмежують його швидкість. Для послідовної реалізації етапу assembly виступає основним обмежувальним фактором через значний обсяг обчислень. Складнішим для оптимізації процесу збирання глобальної матриці жорсткості є етап aggregation, оптимізація якого досягається шляхом використання ефективних форматів зберігання розріджених матриць та мінімізації кількості операцій вставки.

Під час розроблення паралельної реалізації МСЕ було розв'язано дві взаємопов'язані задачі, що істотно впливають на продуктивність обчислень:

- усунення конфліктів доступу до пам'яті, що виникають під час паралельного етапу assembly, коли декілька обчислювальних потоків одночасно намагаються записати коефіцієнти локальних матриць в одну й ту саму позицію глобальної матриці жорсткості;
- використання оптимізованої структури для паралельного накопичення даних на основі COO-масивів, подальше об'єднання яких із наступним формуванням фінальної CSR-матриці дає змогу усунути конфлікти одночасного доступу до даних та підвищити швидкість обчислень.

Для етапу Solver характерна найвища теоретична обчислювальна складність, а результати паралелізації assembly та оптимізації етапу aggregation показують, що для сіток великої розмірності основним обмеженням обчислювальної продуктивності стає вже процес розв'язання СЛАР, а не формування глобальної матриці жорсткості.

Для оцінювання ефективності гібридної паралельної реалізації обчислення тривимірних стаціонарних потенціальних теплових полів було здійснено серію експериментальних досліджень, спрямованих на порівняння

тривалості виконання основних етапів обчислювального процесу. Здійснено аналіз послідовної та паралельної реалізації. Дослідження проводилось для різної кількості скінченних елементів M . У табл. 2 наведено загальну тривалість обчислення, а також тривалість виконання етапів assembly As , aggregation Ag та solver Sv під час паралельної та послідовної реалізації МСЕ.

Окрім цього, наведено коефіцієнти пришвидшення загальної тривалості розрахунку та тривалості виконання етапів assembly та aggregation. Для визначен-

ня коефіцієнтів пришвидшення $S = T_1/T_p$, де T_1 – тривалість послідовної реалізації, T_p – тривалість паралельної реалізації обчислювального процесу. Зазвичай у задачах високопродуктивних обчислень (HPC) або паралельного програмування коефіцієнти пришвидшення оцінюються за законом Амдала або законом Густафсона, де загальне пришвидшення залежить від того, яку частку часу займають окремі етапи (такі як assembly – збірка матриць/даних та aggregation – агрегація або редукція результатів).

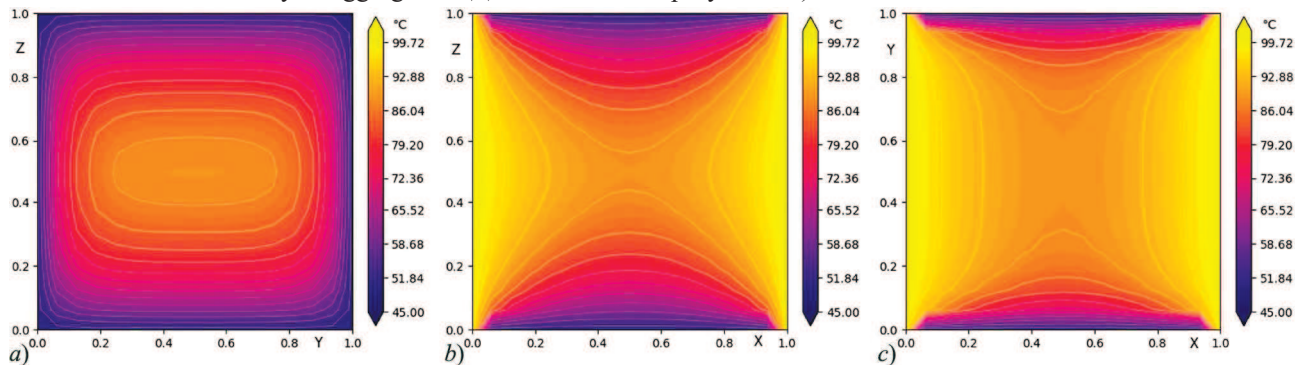


Рис. 2. Розподіл температури в нелінійному анізотропному середовищі на трьох центральних зрізах області розрахунку: а) серединний зріз по площині YZ ($X = 0,5$); б) серединний зріз по площині XZ ($Y = 0,5$); в) серединний зріз по площині XY ($Z = 0,5$) / Temperature distribution in a nonlinear anisotropic medium across three central slices of the computational domain: a) mid-plane slice along the YZ plane ($X = 0.5$); b) mid-plane slice along the XZ plane ($Y = 0.5$); c) mid-plane slice along the XY plane ($Z = 0.5$)

Табл. 2. Тривалість та пришвидшення обчислювального процесу під час послідовної та паралельної реалізації МСЕ для різної кількості скінченних елементів M / Time and acceleration during serial and parallel implementation of FEM for different number of finite elements of M

К-сть скінченних елементів	Реалізація обчислювального процесу	Тривалість, с				Пришвидження етапів розрахунку		
		Загальна	As	Ag	Sv	Загальне	As	Ag
384	Послідовна	0,12	0,1	0,02	0	1	1	1
	Паралельна	0,03	0,03	0	0	3,35	2,91	40,82
3072	Послідовна	1,27	1,01	0,25	0,01	1	1	1
	Паралельна	0,21	0,21	0	0	5,93	4,80	211,16
24576	Послідовна	10,03	7,46	2,46	0,11	1	1	1
	Паралельна	3,33	3,18	0,01	0,14	3,01	2,34	246,00
48000	Послідовна	20,08	15,26	4,55	0,27	1	1	1
	Паралельна	4,27	3,88	0,01	0,38	4,70	3,93	337,30
82944	Послідовна	23,98	16,5	6,58	0,9	1	1	1
	Паралельна	9,45	7,83	0,02	1,60	2,54	2,11	283,97
131712	Послідовна	40,14	26,45	10,17	3,53	1	1	1
	Паралельна	18,44	14,32	0,04	4,08	2,18	1,85	278,17
196608	Послідовна	58,90	33,00	16,72	9,18	1	1	1
	Паралельна	28,71	19,78	0,05	8,88	2,05	1,67	334,40

Отримані результати свідчать про підвищення ефективності паралельної реалізації порівняно з послідовною, особливо для задач середньої та великої розмірності. Загальна тривалість виконання алгоритму паралельної реалізації МСЕ за використання компілятора Numba значно зменшується незалежно від кількості скінченних елементів. Так, наприклад, для $M = 3072$ досягнуто пришвидшення загального часу у 5,93 раза, а для $M = 48000$ – у 4,70 раза, що підтверджує ефективність застосування засобів розпаралелювання розрахунку МСЕ.

Найбільший внесок у загальне швидшення обчислюваного процесу забезпечує етап assembly, який є найтривалішим у разі послідовної реалізації. Пришвидшення цього етапу становить від 1,52 до 4,80 разів залежно від розміру задачі. Водночас, етап aggregation демонструє надзвичайно високі значення динаміки обчислюваного процесу (до 337 разів), що можна пояснити переходом до ефективних структур даних та оптимізованих операцій додавання у розріджені матриці. Зі збільшенням розмірності задачі спостерігається тенденція до

встановлення загального коефіцієнта пришвидшення на рівні 2.

Результати експериментального дослідження розробленого гібридного паралельного алгоритму корелюють із дослідженнями [17, 21, 24], які демонструють, що ефективність масштабування паралельних обчислень істотно залежить від мінімізації накладних витрат під час роботи з пам'яттю та обходу обмежень інтерпретованих мов. Зокрема, використання формату COO у нашому алгоритмі для паралельної агрегації елементів матриці жорсткості дає змогу досягти високої продуктивності алгоритму, подібної до результатів оптимізації обчислень через JIT-компіляцію, описаних у роботі [21].

Обговорення результатів дослідження. У дослідженні [28] автори проаналізували програмні концепції та чисельні алгоритми для масштабованого адаптивного паралельного методу скінченних елементів у розподілених обчислювальних системах. Особливу увагу приділено ефективній організації структур даних і застосуванню паралельних розв'язувачів для великих роз-

ріджених систем рівнянь. Отримані результати підтверджують, що зі збільшенням розмірності задачі ключовим фактором продуктивності паралельного методу скінченних елементів стає не тільки швидкість формування матриці жорсткості, а й ефективність механізмів оброблення даних розріджених структур. Це узгоджується з результатами проведеного дослідження, у якому встановлено, що після оптимізації етапів Assembly та Aggregation основне обчислювальне навантаження переходить на етап Solver.

У роботі [19] автори дослідили сучасні підходи до реалізації МСЕ засобами Python та показали, що інтерпретоване виконання коду створює істотні накладні витрати під час роботи з великими тривимірними сітками. Отримані в роботі результати підтверджують доцільність використання JIT-компіляції Numba та багатопроцесорного оброблення даних бібліотекою Joblib для пришвидшення критичних ділянок FEM-коду. На відміну від роботи [19], у нашому дослідженні акцент зроблено саме на оптимізації процесу Assembly та Aggregation без переходу до спеціалізованих суперкомп'ютерних платформ.

У роботі [7] автори запропонували використання MPI for Python та PETSc for Python як засобів організації високопродуктивних паралельних обчислень у Python-середовищі. Показано, що бібліотека NumPy забезпечує ефективне виконання векторизованих операцій, однак для задач із великою кількістю вкладених циклів і поелементним обробленням даних виникає потреба у використанні компільованих або оптимізованих обчислювальних модулів. Отримані висновки підтверджують результати проведеного дослідження, де встановлено, що найбільші втрати продуктивності паралельного методу скінченних елементів виникають саме на етапах локального формування внесків скінченних елементів та їх агрегації у глобальну матрицю жорсткості.

У роботі [13] автори розглядають проблему паралельної реалізації методу скінченних елементів для задачі термопружності, а саме – досліджуються проектні розрахунки конструкцій, що потребують всебічного аналізу процесів деформування під дією експлуатаційних навантажень. Одним з етапів розв'язування задач термопружності є формування матриць жорсткості та теплопровідності скінченних елементів. У випадку великих розмірів сіток кількість та тривалість розрахунків збільшуються, що потребує оптимізації обчислень з використанням алгоритмів паралельних обчислень.

У роботі [17] автор дослідив алгоритми паралельного формування розріджених матриць МСЕ на багатоядерних обчислювальних системах. Запропонований підхід передбачає повну паралелізацію процесу побудови глобальної матриці жорсткості та демонструє ефективну масштабованість на багатопроцесорних архітектурах. Отримані результати підтверджують важливість оптимізації саме етапу Assembly як одного з головних обмежувачів швидкодії FEM-систем. На відміну від дослідження [17], де реалізація паралельного методу скінченних елементів орієнтована на мову Julia та спеціалізовані алгоритми побудови sparse-структур, у наведеній роботі використано Python-орієнтований гібридний підхід із застосуванням компілятора Numba, бібліотеки Joblib і COO-формату як проміжного буфера для усунення конфліктів доступу до пам'яті.

У дослідженні [27] автори виконали детальний аналіз впливу нерегулярного доступу до пам'яті на продуктивність алгоритмів формування скінченно-елементних матриць. Показано, що оптимізація структур зберігання даних та мінімізація операцій поелементного їх запису істотно зменшують обсяги трафіку пам'яті та підвищують ефективність багатопотокових обчислень. Результати цього дослідження безпосередньо підтверджують доцільність використання COO-масивів у наведеній роботі, де заміна повільного поелементного додавання у CSR-структури на пакетне об'єднання COO-даних забезпечила пришвидшення етапу Aggregation до 337 разів.

У роботі [24] автори запропонували триетапну GPU-орієнтовану стратегію генерування глобальних матриць МСЕ для неструктурованих сіток. Основною ідеєю роботи стало розділення процесів обчислення індексів та значень матриці, що дало змогу ефективно організувати паралельне оброблення даних на графічних процесорах. Отримані авторами результати підтверджують, що правильний розподіл обчислювального навантаження між окремими етапами алгоритму істотно впливає на загальну продуктивність FEM-систем. Аналогічний підхід використано і в наведеному дослідженні, де окремо оптимізовано етапи Assembly та Aggregation, що дало змогу істотно скоротити тривалість генерування СЛАР навіть без використання GPU-архітектур.

Внаслідок обговорення результатів досліджень з'ясовано, що проблема ефективної паралелізації МСЕ залишається актуальною, а основні обчислювальні труднощі виникають на етапах формування та агрегації розріджених матриць. Отримані результати підтверджують доцільність використання гібридного підходу, який поєднує JIT-компіляцію, паралельне оброблення даних та оптимізовані формати зберігання розріджених даних для підвищення продуктивності програмних систем чисельного моделювання температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах.

Отже, внаслідок виконаної роботи можна сформулювати такі наукову новизну та практичну значущість результатів дослідження.

Наукова новизна отриманих результатів дослідження – розроблено методику паралельного формування глобальної матриці жорсткості та вектора нев'язок методу скінченних елементів для моделювання тривимірних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах, яка базується на поєднанні JIT-компіляції та використанні COO-формату розріджених матриць, що забезпечує усунення конфліктів доступу до пам'яті, підвищення ефективності агрегації внесків скінченних елементів і покращення масштабованості окремих етапів обчислювального процесу.

Практична значущість результатів дослідження – можна використати для розроблення високопродуктивних систем чисельного моделювання задач теплоперенесення, оскільки вони дають можливість скоротити тривалість обчислень під час розв'язання рівнянь стаціонарних температурних полів великої розмірності.

Висновки / Conclusions

Розроблено гібридний паралельний алгоритм МСЕ для моделювання тривимірних стаціонарних температурних полів у нелінійних анізотропних середовищах, який забезпечує усунення обчислювальних обмежень ("вузьких місць") під час розв'язання задач з великою

кількістю скінченних елементів. За результатами проведеного дослідження можна зробити такі основні висновки.

1. Удосконалено метод агрегації внесків скінченних елементів шляхом впровадження формату COO як проміжного наведення даних, що забезпечило ефективне усунення конфліктів доступу до пам'яті за паралельного збирання глобальної матриці жорсткості.
2. Визначено ключові "вузькі місця" МСЕ під час моделювання тривимірних стаціонарних температурних полів з великою кількістю скінченних елементів та доведено, що використання розріджених структур даних дає змогу уникнути оброблення даних нульових елементів.
3. Проаналізовано вплив структурних характеристик розріджених матриць на масштабованість використаних алгоритмів, що дало змогу встановити пряму залежність між типом наведення даних та швидкістю розв'язання задач теплоперенесення на сучасних багатоядерних CPU-архітектурах.
4. Проведено серію експериментальних досліджень, результати яких свідчать про істотне підвищення ефективності гібридної паралельної реалізації порівняно з послідовною, особливо для задач середньої та великої розмірності. Отримані результати підтвердили істотне скорочення тривалості обчислень на етапах формування внесків скінченних елементів та їх складання у глобальну матрицю жорсткості та вектор нев'язок.
5. Створено масштабоване прикладне ПЗ, яке реалізує запропоновані рішення і може бути використане як база для побудови високоавантажених систем чисельного моделювання складних фізичних процесів, таких як теплоперенесення та дифузія.

Декларація про використання засобів ШІ. Програмні засоби ChatGPT та Grammarly було використано авторами виправдано і винятково для лінгвістичного редагування, стилістичного коригування та перефразування окремих фрагментів тексту. Автори критично перевірили, систематизували й остаточно затвердили зміст роботи, беручи на себе повну відповідальність за поданий матеріал.

References

1. Bekas, B. O., Prots, A. M., & Hrytsiuk, Y. I. (2026). Software for isolated deployment of a web application in a containerized environment. *Scientific Bulletin of UNFU*, 36(3), 86–97. <https://doi.org/10.36930/40360309>
2. Belhamadia, Y., & Seaid, M. (2024). A mixed finite element method for nonlinear radiation–conduction equations in optically thick anisotropic media. *Mathematics and Computers in Simulation*, 216, 15–29. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2023.08.031>
3. Bouziane, M. T., Benhamou, B., & El Alami, M. (2021). 3D hybrid finite elements for anisotropic heat conduction in a multi-material cylinder and complex geometry. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 161, article ID 120251. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119795>
4. Cao, H., Tchelepi, H. A., Wallis, J., & Yardumian, H. (2005). Parallel scalable unstructured CPR-type linear solver for reservoir simulation. *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, 1(1), article ID 96809. <https://doi.org/10.2118/96809-MS>
5. Chagas Paz, A. A., Abreu de Souza, M., Wyatt Brock, P., & Ferreira Mercuri, E. G. (2022). Finite element analysis to predict temperature distribution in the human neck with abnormal thyroid: A proof of concept. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 227(1), article ID 107234. <https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2022.107234>
6. Chen, Z. X. (2005). Finite element methods and their applications. *Springer, Berlin*, 1(1), article number 424. <https://doi.org/10.1007/3-540-28078-2>
7. Dalcin, L. D., Paz, R. R., Kler, P. A., & Cosimo, A. (2011). Parallel distributed computing using Python. *Advances in Water Resources*, 34(9), 1124–1139. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.04.013>
8. Fenii, N. S., & Hrytsiuk, Y. I. (2020). Automation of the process of classification of text news from internet sites by neural network methods. *Scientific Bulletin of UNFU*, 30(4), 123–133. <https://doi.org/10.36930/40300421>
9. Gembarovic, J., Löffler, M., & Gembarovic Jr, J. (2004). Simple algorithm for temperature distribution calculations. *Applied Mathematical Modelling*, 28(2), 173–182. [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(03\)00129-X](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(03)00129-X)
10. Havrysh, V. I., & Hrytsiuk, Y. I. (2023). Mathematical models for the determination of temperature fields in elements of electronic devices with semi-through foreign inclusions. *Scientific Bulletin of UNFU*, 33(3), 55–65. <https://doi.org/10.36930/40330308>
11. Havrysh, V. I., & Shkrab, R. R. (2023). Mathematical models for determining temperature fields in digital device elements with local external heating and taking into account thermal sensitivity. *Scientific Bulletin of UNFU*, 33(5), 84–92. <https://doi.org/10.36930/40330511>
12. Havrysh, V. I., Yatsyshyn, S. I., & Kruk, O. H. (2025). Mathematical modeling and analysis of temperature regimes in electronic devices with thermosensitive elements. *Scientific Bulletin of UNFU*, 35(3), 67–74. <https://doi.org/10.36930/40350307>
13. Homeniuk, S. I., & Kozub, V. Yu. (2022). Parallel implementation of the finite element method for the thermoelasticity problem. *Visnik of the Volodymyr Dahl East Ukrainian National University*, No. 5 (275), 8–9. <https://doi.org/10.33216/1998-7927-2019-256-8-5-9>
14. Hrytsiuk, Y. I., & Havrysh, V. I. (2022). Numerical differentiation of periodic tabular-specified functions using the Fourier polynomial. *Scientific Bulletin of UNFU*, 32(5), 69–79. <https://doi.org/10.36930/40320510>
15. Karashetskyi, V. P., & Yarkun, V. I. (2024). Calculation of three-dimensional stationary potential thermal fields by the finite element method. *Information Technologies and Computer Engineering*, 1(1), 139–145. <https://doi.org/10.31649/1999-9941-2024-59-1-139-145>
16. Kratos Multiphysics Team. (2025). Three-dimensional finite element modeling of thermal stratification using variational multiscale stabilization. *Water*, 17(5), article ID 674. <https://doi.org/10.3390/w17050674>
17. Krysl, P. (2024). Parallel assembly of finite element matrices on multicore computers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 428, article ID 117076. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2024.117076>
18. Lee, C. S., Hamon, F., Castelletto, N., Vassilevski, P., & White, J. (2022). An aggregation-based nonlinear multigrid solver for two-phase flow and transport in porous media. *Computers & Mathematics with Applications*, 113(1), 282–299. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2022.03.026>
19. Nangraj, A. R., Sabira, S., & Mallah, G. Y. (2026). Numerical solution of partial differential equations using Finite Element Method (FEM) implemented in Python for scientific computing applications. Center for Management Science Research; Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.19874921>
20. Prykhodko, M. A., & Herasymov, H. H. (2008). Thermodynamics and heat transfer: Textbook. *NUWEE*. URL: <https://ep3.nuwm.edu.ua/id/eprint/1847>
21. Rathgeber, F., Ham, D. A., Mitchell, L., Lange, M., Luporini, F., McRae, A. T. T., Bercea, G. T., Markall, G. R., & Kelly, P. H. J. (2016). Firedrake: Automating the finite element method by composing abstractions. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 43(3), article number 24. <https://doi.org/10.1145/2998441>
22. Saedi, O. (2024). Towards eco-conscious Python: A comparative analysis of performance, energy efficiency and carbon emissions between CPython and alternative implementations. *ResearchGate*, 1–15. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.12314.04803>
23. Salo, M. F., & Hrytsiuk, Y. I. (2026). Web application for forecasting military needs based on analysis and monitoring of

- their humanitarian support. *Scientific Bulletin of UNFU*, 36(3), 45–61. <https://doi.org/10.36930/40360305>
24. Sanfui, S., & Sharma, D. (2020). A three-stage graphics processing unit-based finite element analyses matrix generation strategy for unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 121(17), 3824–3848. <https://doi.org/10.1002/nme.6383>
 25. Sokolovskyy, Y., Nechepurenko, A., Samotii, T., Yatsyshyn, S., Mokrytska, O., & Yarkun, V. (2020). Software and algorithmic support for finite element analysis of spatial heat-and-moisture transfer in anisotropic capillary-porous materials. 2020 *IEEE Third International Conference on Data Stream Mining & Processing*, pp. 316–320. <https://doi.org/10.1109/DSMP47368.2020.9204175>
 26. Torskyi, O. I., & Hrytsiuk, Y. I. (2025). Application of machine learning to enhance the efficiency of automated software testing. *Scientific Bulletin of UNFU*, 35(4), 142–149. <https://doi.org/10.36930/40350416>
 27. Trotter, J. D., Cai, X., & Funke, S. W. (2022). On memory traffic and optimisations for low-order finite element assembly algorithms on multi-core CPUs. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 48(2), article ID 19, 1–31. <https://doi.org/10.1145/3503925>
 28. Witkowski, T., Ling, S., Praetorius, S., & Voigt, A. (2015). Software concepts and numerical algorithms for a scalable adaptive parallel finite element method. *Advances in Computational Mathematics*, 41, 1145–1177. <https://doi.org/10.1007/s10444-015-9405-4>

V. I. Yarkun, V. P. Karashetskyy, Yu. S. Protsyk

Ukrainian National Forestry University, Lviv, Ukraine

PARALLELIZATION OF THE CALCULATION OF THREE-DIMENSIONAL TEMPERATURE FIELDS IN NONLINEAR ANISOTROPIC ENVIRONMENTS USING THE FINITE ELEMENT METHOD

The paper presents the results of the development and comprehensive investigation of a hybrid parallel finite element method (FEM) algorithm for modeling three-dimensional steady-state temperature fields in nonlinear anisotropic media. It is shown that conventional FEM implementations, particularly those developed in Python, encounter computational bottlenecks when applied to dense meshes due to the Global Interpreter Lock (GIL), which restricts the concurrent execution of multiple threads within a single process, as well as the low performance of loop-based operations. The study establishes that the main computational performance limitations of standard FEM algorithms arise from the stages of local finite element contribution assembly and their aggregation into the global stiffness matrix (GSM), which account for the major portion of computational time prior to solving the system of linear algebraic equations (SLAE). The study demonstrates that the application of a hybrid computational model combining just-in-time (JIT) compilation provided by the Numba library with multiprocessing techniques implemented through the Joblib library enables efficient parallelization of the assembly stage and accelerates SLAE generation. The influence of sparse matrix storage formats on the overall computation time of three-dimensional temperature field simulations was evaluated. It is proven that the use of the coordinate list (COO) format eliminates the data race problem by allowing each process to independently generate contributions to the stiffness matrix and residual vector. The scalability characteristics of the proposed algorithm were analyzed. The results show a substantial acceleration of the matrix aggregation stage (up to 337×), achieved by replacing slow element-wise insertion into sparse matrices with efficient batch merging of COO arrays followed by rapid conversion into the compressed sparse row (CSR) format. It was also established that, after optimization of the matrix formation stages, the primary computational load shifts to the SLAE solution stage (solver). The practical significance of the developed software was confirmed by achieving up to a 5.93-fold reduction in SLAE generation time compared with the reference implementation. The scientific novelty of the research lies in the proposed methodology for parallel assembly of the global stiffness matrix and residual vector within the FEM framework for modeling three-dimensional temperature fields in nonlinear anisotropic media.

Keywords: parallel FEM implementation; Lagrangian tetrahedron; Numba JIT compiler; Joblib library; sparse matrices; COO format.